

Schémas aux résidus distribués et méthodes à propagation des ondes pour la simulation d'écoulements compressibles diphasiques avec transfert de chaleur et de masse

Julien Carlier

▶ **To cite this version:**

Julien Carlier. Schémas aux résidus distribués et méthodes à propagation des ondes pour la simulation d'écoulements compressibles diphasiques avec transfert de chaleur et de masse. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. Université Paris Saclay (COmUE), 2019. Français. NNT : 2019SACLY008 . tel-02421613

HAL Id: tel-02421613
https://pastel.hal.science/tel-02421613

Submitted on 20 Dec 2019

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.

université PARIS-SACLAY

ENSTA

IP PARIS

NNT : 2019SACLY008

Thèse de doctorat

Schémas aux résidus distribués et méthodes à propagation des ondes pour la simulation d'écoulements compressibles diphasiques avec transfert de chaleur et de masse

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay
préparée à l'Ecole nationale supérieure de techniques avancées

Ecole doctorale n°579 Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)
Spécialité de doctorat : mécanique des fluides

Thèse présentée et soutenue à Palaiseau, le 6/12/2019, par

JULIEN CARLIER

Composition du Jury :

Mario Ricchiuto Directeur de recherche, Inria (Bordeaux Sud-Ouest)	Rapporteur
Eric Goncalves Professeur des universités, ENSMA (Institut Pprime)	Rapporteur
Rémi Abgrall Professeur, Université de Zurich	Examinateur
Christian Tenaud Directeur de recherche, CNRS (LIMSI)	Président
Romain Monchaux Professeur associé, IMSIA, ENSTA Paris	Directeur de thèse
Pietro Marco Congedo Chargé de recherche, Inria (Saclay Île-de-France)	Co-directeur de thèse
Marica Pelanti Maître de conférences, IMSIA, ENSTA Paris	Co-encadrante-invitée

Remerciements

Je souhaite dans un premier temps exprimer ma gratitude à mes encadrants pour m'avoir permis de travailler sur ce sujet. Je remercie mon directeur de thèse Romain Monchaux pour son accueil chaleureux. Je souhaite également exprimer mes remerciements à mon co-superviseur Pietro Marco Congedo qui m'a inspiré par son perfectionnisme et sa passion pour la recherche. Je souhaite également exprimer ma gratitude à ma co-encadrante Marica Pelanti pour sa disponibilité et son encadrement sans faille.

Je voudrais aussi remercier le professeur Rémi Abgrall et le docteur Paola Bacigaluppi pour leur disponibilité et l'aide qu'ils m'ont apportée dans la compréhension et le développement des méthodes aux résidus distribués.

Je remercie aussi Mario Ricchiuto, directeur de recherche à l'INRIA-Bordeau Sud-Ouest, et Eric Goncalves, professeur à l'institut P', pour m'avoir fait l'honneur d'accepter d'être les rapporteurs de ma thèse ainsi que Christian Tenaud, directeur de recherche au LIMSI, pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je souhaite aussi remercier l'équipe de l'UME pour leur accueil chaleureux et l'esprit d'entraide dans le laboratoire.

Je souhaite finalement exprimer ma gratitude à mes proches pour leur soutien et leur aide durant ces trois années.

Nomenclature

Modèle :

t : temps ($[s]$)

k : index de la phase

ε_k : énergie interne de la phase k ($[N]$)

e_k : énergie interne spécifique de la phase k ($\left[\frac{m^2}{s^2}\right]$)

ρ_k : densité de la phase k ($\left[\frac{kg}{m^3}\right]$)

α_k : fraction volumique de la phase k

Y_k : fraction de masse de la phase k

ε : énergie interne du mélange ($[N]$)

e : énergie interne spécifique du mélange ($\left[\frac{m^2}{s^2}\right]$)

ρ : densité du mélange ($\left[\frac{kg}{m^3}\right]$)

E : énergie totale de la mixture ($\left[\frac{J}{m^3}\right]$)

P : pression ($[Pa]$)

T : température ($[K]$)

$\overrightarrow{u}$: vitesse ($\left[\frac{m}{s}\right]$)

c : vitesse du son ($\left[\frac{m}{s}\right]$)

λ : valeur propre

∇ : opérateur nabla

Γ : terme source des transferts de masse

Q_I : terme source des transferts de chaleur

$\dot{\alpha}$: terme source de la compaction dynamique

ν : potentiel chimique ($\left[\frac{J}{kg}\right]$)

g : énergie libre de Gibbs ($\left[\frac{J}{kg}\right]$)

Θ_t : temps de relaxation des transferts de masse (s)

Θ : terme de relaxation des transferts de masse ($\left[\frac{1}{s}\right]$)

θ : terme de relaxation des transferts de température ($\left[\frac{1}{s}\right]$)

μ : terme de relaxation d'équilibre mécanique ($\left[\frac{1}{s}\right]$)

P_I : pression interfaciale entre les phases (Pa)

Z_k : impédance acoustique de la phase k

Paramètres de l'équation d'état :

γ : coefficient de Laplace

P_∞ : pression de cohésion (Pa)

cv : capacité calorifique massique à volume constant (J/kg/K)

q : énergie de référence (J/Kg)

q' : énergie libre de Gibbs de référence (J/Kg/K)

Γ_k : coefficient de Grüneisen de la phase k

P_c : pression critique (Pa)

Discrétisation des méthodes aux résidus distribués :

i, j : indice du nœud du maillage

Ω_h : domaine discrétisé

Γ : frontière du domaine discrétisé

K : cellule du domaine

∂K : frontière de la cellule K

φ_i : fonction de base

Φ^K : résidu de K

$\Phi_i^{K,n}$: résidu de K envoyé au nœud (i,n)

ϕ^K : fluctuation de K

$\phi_i^{K,n}$: fluctuation de K envoyé au nœud (i,n)

dt : pas de temps

C_i : cellule de contrôle

θ_s : détecteur de choc du schéma combiné

Discrétisation du schéma à propagation des ondes :

dt : pas de temps temporel

dx : pas de temps spatial

$A^- \Delta Q_{i+\frac{1}{2}}$: fluctuation entre les cellules i et i+1

$W^p_{i+\frac{1}{2}}$: onde de la p-ème caractéristique entre les cellules i et i+1

$\mathscr{F}_{i+\frac{1}{2}}$: flux de correction

$\theta^p_{s,i+\frac{1}{2}}$: senseur de choc pour le limiteur de l'onde $W^p_{i+\frac{1}{2}}$

Algorithme de MOOD

$\mathscr{B}$: Espace des cellules déficientes

$\mathscr{V}(K)$: Espace des cellules voisines de l'élément K

PAD : Physical Admissibility Detection

CAD : Computational Admissibility Detection

P : Plateau Detection

NAD : Numerical Admissibility Principle

DMP : Discreted Maximum Principle

SE : Smoothness Extrema

LSE : Linearized Smoothness Extrema

Probabilité :

y : résultat expérimental

N : nombre de simulations numériques

ϑ : set de paramètres incertains

$f(\vartheta)$: résultat numérique du set ϑ

σ^2, D : variance

σ : écart type

LOO : leave-one-out

$M(\vartheta)$: résultats de la résolution numérique du set ϑ

$M^{Pc}(\vartheta)$: résultats du métamodèle du set ϑ
$M^{Pc\setminus i}(\vartheta)$: résultats du métamodèle du set ϑ sans la contribution i
ξ : paramètres incertains du polynôme du chaos
n_ξ : nombre de paramètres incertains du polynôme du chaos
n_p : ordre du polynôme du chaos
$u(\xi)$: polynôme du chaos de paramètre ξ
u_α : indice α du polynôme du chaos
Ψ_α : fonction orthogonale α du polynôme du chaos
S_{ϑ_i} : coefficient de Sobol d'ordre 1 de la variable ϑ_i
$S_{\vartheta_{i,\ldots,j}}$: coefficient de Sobol couplé des variables $\vartheta_{i,\ldots,j}$
$S^t_{\vartheta_i}$: coefficient de Sobol total de la variable ϑ_i

Table des matières

1 Modèles multiphasiques **13**

1.1 Introduction 13

1.2 Hiérarchisation des modèles 14

1.2.1 Modèle à sept équations 14

1.2.1.1 Obtention du modèle 14

1.2.1.2 Définitions des termes d'échanges interfaciaux 15

1.3 Modèles réduits 17

1.3.1 Modèle à quatre équations 17

1.3.2 Modèle à cinq équations 18

1.3.3 Modèle à six équations 19

1.4 Loi de fermeture des modèles 21

1.4.1 Loi des fluides monophasiques 21

1.4.2 Loi du mélange 22

1.4.2.1 Modélisation du milieu diphasique 22

1.4.2.2 Variables du milieu diphasique 23

2 Résolution par la méthode des volumes finis **25**

2.1 Méthode de type Godunov 25

2.1.1 Solution d'un problème de Riemann 25

2.1.2 Formulation d'une méthode de type Godunov : discrétisation intégrale . 26

2.1.3 Formulation d'une méthode de type Godunov : évaluation des flux . . . 28

2.2 Schéma à propagation des ondes 29

2.2.1 Formulation au premier ordre 29

2.2.2 Formulation au second ordre 30

2.2.3 Limiteur dans la méthode des volumes finis 31

2.3 Traitement des conditions aux limites 32

2.3.1 Méthodes des cellules fantômes 32

2.3.2 Condition de sortie 32

2.3.3 Mur impénétrable 32

3 Méthode aux résidus distribués **35**

3.1 Méthode stationnaire 35

3.1.1 Discrétisation et résidu total 35

3.1.2 Principe de la méthode 36

3.1.3 Schémas monotones et d'ordre élevé . . . 37
3.2 Méthode instationnaire . . . 40
3.2.1 Principe en instationnaire . . . 40
3.2.2 Schéma explicite d'ordre élevé . . . 41
3.3 Conditions aux limites . . . 43
3.3.1 Formulation faible des conditions aux limites . . . 43
3.3.2 Condition de sortie . . . 44
3.3.3 Mur impénétrable . . . 44

4 Comparaison entre les modèles diphasiques à 4 et 6 équations 45
4.1 Principes et Objectifs . . . 45
4.2 Résolution des systèmes . . . 46
4.2.1 Méthodologie de splitting . . . 46
4.2.2 Solveur convectif . . . 46
4.2.2.1 Solveur HLLC pour le système à quatre équations . . . 46
4.2.2.2 Solveur HLLC pour le système à six équations . . . 48
4.2.3 Traitement des termes sources . . . 49
4.2.3.1 Relaxation des pressions . . . 49
4.2.3.2 Relaxation des températures . . . 50
4.2.3.3 Relaxation des potentiels chimiques . . . 51
4.3 Résultats numériques . . . 53
4.3.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur . . . 53
4.3.2 Dépression d'une conduite de CO_2 . . . 53
4.3.3 Cavitation de l'eau à faible vitesse . . . 58
4.3.4 Cavitation de l'eau à haute vitesse . . . 61
4.3.5 Bulle d'hélium heurtée par un choc . . . 67
4.3.6 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel . . . 76
4.3.7 Commentaires sur les résultats . . . 76

5 Extension des méthodes aux résidus distribués aux écoulements diphasiques 79
5.1 Intérêts et objectifs . . . 79
5.2 Résolution numérique avec la méthode aux résidus distribués . . . 81
5.2.1 Schémas spatiaux . . . 81
5.2.2 Schéma temporel . . . 83
5.2.3 Comment assurer la conservation . . . 83
5.2.4 Algorithme d'optimisation à postériori . . . 85
5.2.4.1 Principe de l'algorithme . . . 85
5.2.4.2 Critères de détection . . . 86
5.3 Validation croisée de la méthode sur des maillages structurés . . . 89
5.3.1 Résultats 1D . . . 89
5.3.1.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur . . . 89
5.3.1.2 Dépression d'une conduite de CO_2 . . . 92
5.3.1.3 Cavitation de l'eau à faible vitesse . . . 97

5.3.1.4 Cavitation de l'eau à haute vitesse . . . 101
5.3.2 Résultats 2D . . . 102
5.3.2.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel . . 102
5.3.2.2 Bulle d'hélium heurtée par un choc . . . 103
5.4 Résultats avec des maillages non structurés . . . 110
5.4.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel . . . 110
5.4.2 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe . . . 111
5.5 Conclusion du chapitre . . . 117

6 Prise en compte des incertitudes et applications à des problèmes industriels 119
6.1 Principes et objectifs . . . 119
6.2 Méthodes de quantification d'incertitude . . . 120
6.2.1 Polynômes du chaos . . . 120
6.2.2 Indices de Sobol . . . 121
6.2.2.1 Définition des indices de Sobol . . . 121
6.2.2.2 Détermination à partir des polynômes du chaos . . . 123
6.3 Expérience de Canon . . . 125
6.3.1 Problème numérique . . . 125
6.3.1.1 Formulation du problème numérique . . . 125
6.3.1.2 Résultats numériques . . . 126
6.3.2 Prise en compte des incertitudes . . . 127
6.3.2.1 Caractérisation des incertitudes . . . 127
6.3.2.2 Analyse par décomposition ANOVA . . . 127
6.3.2.3 Commentaire sur la quantification d'incertitude . . . 133
6.4 Expérience de Simpson . . . 135
6.4.1 Formulation du problème . . . 135
6.4.1.1 Formulation du problème numérique . . . 135
6.4.1.2 Caractérisation des incertitudes . . . 137
6.4.2 Résultats . . . 138
6.4.2.1 Résultats numériques . . . 138
6.4.2.2 Résultats de l'étude d'incertitude . . . 138

A Détermination des conditions aux limites pour un mur impénétrable I
A.1 Détermination des vecteurs propres . . . I
A.2 Mise en forme du solveur de Roe . . . II
A.2.1 Moyenne de Roe . . . II
A.2.2 Consistance du transport des densités partielles . . . II
A.2.3 Consistance de la quantité de mouvement . . . III
A.2.4 Relation sur l'énergie moyennée . . . IV
A.3 Détermination des coefficients entre les sauts et les vecteurs propres . . . IV
A.4 Détermination du flux . . . V

Introduction

Contexte

Ce travail a pour objectif de contribuer à l'avancement de méthodes permettant des simulations précises d'écoulements diphasiques dans des configurations industrielles. En effet dans de nombreuses configurations industrielles, la présence de milieux diphasiques est très fréquente. On peut par exemple citer les mélanges d'eau sous forme vapeur et liquide servant à entraîner les turbines dans les centrales nucléaires ou les changements de phase lors de la combustion dans un moteur. Malheureusement, ces fluides sont très complexes à caractériser notamment en raison de nombreux phénomènes, comme les transferts de masse (comme la cavitation) et de chaleur entre les différentes phases. On peut mentionner par exemple la cavitation provenant d'une décompression rapide d'un milieu liquide qui est généralement très dommageable pour les installations industrielles.

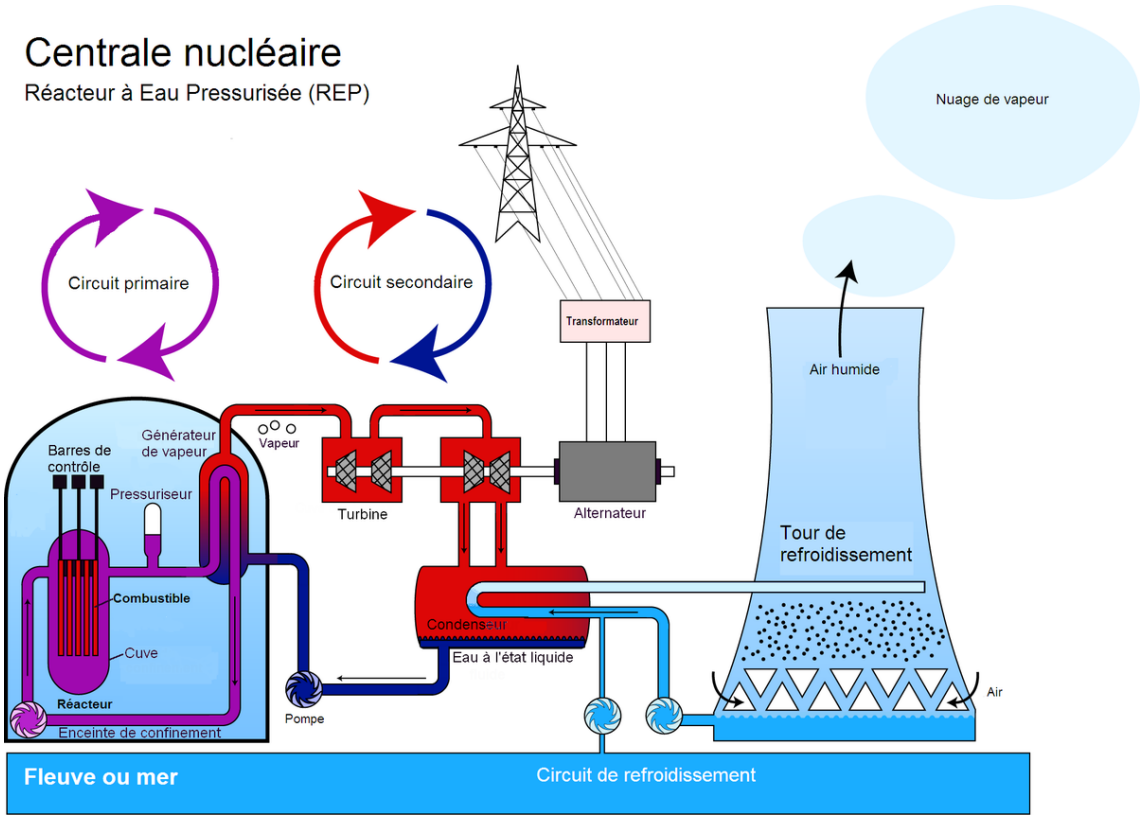


FIGURE 1 – Fonctionnement d'une centrale nucléaire, on observe que le bon fonctionnement du processus dépend en partie des changements de phase de l'eau (image libre de droit reprise de [1])

Ainsi, pour concevoir et dimensionner ces systèmes, il est alors primordial de pouvoir bien caractériser ces milieux et prédire leurs comportements et leurs caractéristiques physiques dans les configurations considérées. Pour cela, deux approches sont généralement utilisées. La première est l'approche expérimentale, où des maquettes sont utilisées pour reproduire les phénomènes qui sont à caractériser. Dans certains cas, celles-ci peuvent alors selon les nécessités être de tailles réelles pour permettre une reproduction exacte du problème, mais plus généralement un modèle réduit similaire moins coûteux peut être construit en utilisant les grandeurs adimensionnées caractérisant le problème. En outre, dans certains cas prendre les mesures reste un challenge. En effet des méthodes intrusives peuvent perturber le problème et l'outil peut aussi être déformé ou endommagé en conditions extrêmes. Les méthodes non-intrusives nécessitent quant à elles la résolution de problèmes d'inversion très complexes. On peut par ailleurs noter que pour un problème de grande dimension par rapport à ses plus petites structures il est alors difficile d'obtenir une bonne définition des petites structures en considérant le problème en entier. Il vaut alors mieux utiliser cette approche pour une étude de finition après que les ordres de grandeurs du problème sont connus pour limiter les coûts et définir au mieux les méthodes de mesure.

La deuxième approche est de résoudre numériquement les équations de bilan physiques conçues pour reproduire les comportements des fluides. Ces équations étant très complexes il est nécessaire d'avoir recours à des méthodes de résolution numérique afin de résoudre celles-ci. L'avantage est alors de pouvoir générer aisément de nouvelles configurations à résoudre afin de mieux comprendre le problème et prédire au mieux sa physique. Il faut toutefois faire attention à ce que le modèle soit suffisamment représentatif de la réalité. Par exemple dans des problèmes d'aérodynamique les équations d'Euler peuvent être privilégiées aux équations de Navier-Stokes si l'effet de la viscosité est négligeable. En revanche, quand la viscosité n'est pas négligeable les équations d'Euler donneraient des résultats trop éloignés de la réalité et il est alors nécessaire d'utiliser les équations de Navier-Stokes. Cela est d'autant plus vrai quand on cherche à simuler des écoulements diphasiques.

En effet, quand plusieurs espèces non-miscibles sont à étudier, il est évidemment possible d'utiliser simplement les équations de Navier-Stokes ou d'Euler en utilisant des propriétés thermodynamiques adaptées à un mélange de plusieurs espèces. Malheureusement, cette approche ne permet pas de modéliser de nombreux phénomènes comme les interactions entre les fluides. En outre, cela ne permet pas de prendre en compte les inhomogénéités dans le domaine étudié. Pour cela, on introduit le concept de phase, chaque phase correspondant à la présence d'un des fluides formant alors un écoulement multiphasique. On fait alors la distinction entre deux types d'écoulements diphasiques : les écoulements à phases dispersées où une des phases est incluse dans une autre, par exemple un spray de bulles dans l'air ou des bulles de vapeur dans de l'eau en ébullition ; les écoulements à phases séparées où les phases sont en contact mais sans inclusions.

Dans ce travail, nous nous intéressons aux modèles à interfaces diffuses. Ces modèles sont très utilisés pour simuler des écoulements compressibles soumis à des gradients de pressions intenses et permettent de résoudre à la fois des problèmes à phases séparées et à phases dispersées. On considère alors le fluide comme un mélange et on ne cherche pas à définir les structures des phases dispersées, contrairement à d'autres méthodes diphasiques comme les méthodes VOF

[2] ou level-set [3] pour lesquelles le maillage doit être de l'ordre des plus petites structures diphasiques pour que celles-ci soient représentées. On peut alors utiliser des maillages moins fins et on ne cherche pas à suivre précisément l'évolution des micro-structures diphasiques, information généralement peu intéressante pour des écoulements à fort gradient de pression mais uniquement d'observer leurs effets dans le mélange.

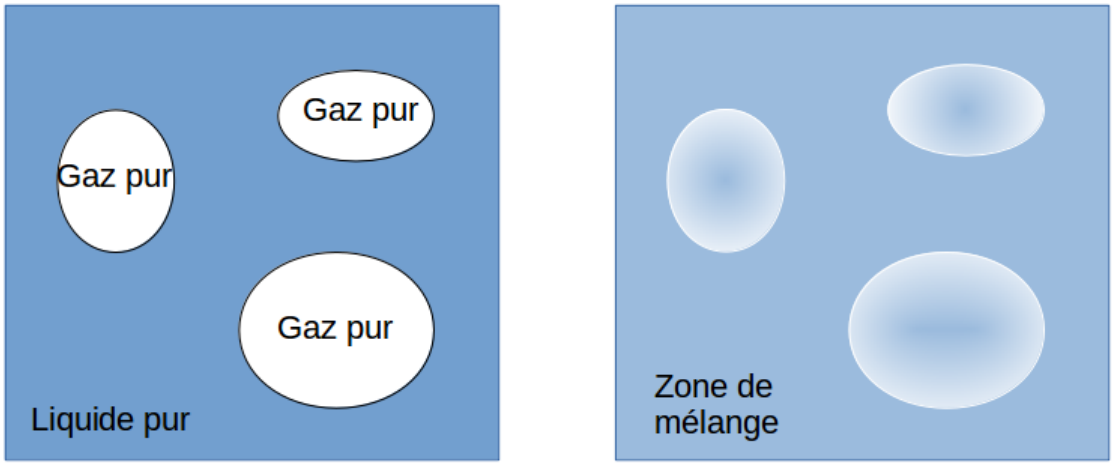


FIGURE 2 – Les méthodes VOF ou level-set considèrent des milieux purs séparés par des interfaces nettes (à gauche). Avec les méthodes à interfaces diffuses (à droite) tout le domaine est considéré comme une zone de mélange contenant une proportion plus ou moins importante des milieux constitutifs

Etat de l'art

Nous procédons tout d'abord à une revue des connaissances actuelles concernant la simulation numérique d'écoulements diphasiques. Cette partie est illustrée en trois parties :

— Tout d'abord, nous présentons les différentes méthodes numériques utilisées à ce jour pour modéliser des écoulements diphasiques. Nous nous concentrons alors sur la catégorie des modèles à interfaces diffuses que nous utiliserons par la suite.

— Dans un second temps, nous présentons une classe de méthodes numériques très connues, la méthode des volumes finis et notamment son application à des systèmes d'équations hyperboliques et aux modèles à interfaces diffuses. Nous utiliserons cette méthode par la suite pour étudier l'effet de l'incertitude de certains paramètres des modèles à interfaces diffuses à des expériences en milieu industriel.

— Finalement, nous présentons la méthode aux résidus distribués. Nous chercherons par la suite à étendre cette classe de méthodes aux modèles à interfaces diffuses. Une comparaison avec la méthode des volumes finis nous permettra de valider notre extension.

Modèles pour les écoulements diphasiques

Comme présenté dans [4, 5, 6] les méthodes numériques actuelles pour traiter les écoulements multiphasiques peuvent être classées en deux catégories (voir figure 2) :

— Les méthodes à interfaces tranchées (SIM), qui regroupent les méthodes level-set [3], VOF [2], les méthodes lagrangiennes [7] et les méthodes front-tracking [8] pour citer les principales. Ces méthodes caractérisent chacun des fluides indépendamment par leurs équations d'Euler respectives. L'interface entre les fluides est alors représentée par des traitements des équations caractéristiques du problème. Cela permet de construire une interface infiniment mince entre les fluides. Cela permet de simuler par exemple des écoulements de spray de bulles avec une grande définition [9]. Un des défauts de ces méthodes est que les maillages doivent alors être extrêmement fins afin de définir avec précision les différentes interfaces. En outre, il est très compliqué de modéliser l'apparition spontanée d'une des phases comme le développement de poches de cavitation dans un liquide.

— La deuxième catégorie concerne les méthodes auxquelles nous nous intéressons, les méthodes à interfaces diffuses (DIM). Pour ces méthodes, le domaine entier est considéré comme un mélange dans lequel toutes les phases co-existent en tout point et à tout moment, les fractions volumiques des fluides permettent alors la caractérisation du mélange. Ainsi une zone monophasique est définie par une zone presque pure ayant une fraction volumique proche de 1. En raison de cette définition, il n'y a plus d'interfaces nettes et les changements de phase séparant les fluides sont alors inclus dans le modèle et sont modélisés par un changement brusque des fractions volumiques. En raison d'erreurs de diffusion numérique les interfaces sont alors étendues sur plusieurs cellules de calcul, d'où leur nom de méthodes à interfaces diffuses. En revanche, cette définition permet alors d'observer l'apparition d'une phase. En outre, en présence d'écoulements à phases dispersées comme des sprays, le maillage peut alors être plus gros que les micro-structures diphasiques. Les micro-structures ne sont alors pas visibles mais leurs effets dans le mélange sont bien modélisés. Cela permet alors une grosse économie des temps de calculs quand on ne cherche pas à les définir.

Les modèles multiphasiques à interfaces diffuses sont notamment connus depuis le modèle précurseur de Baer et Nunziato [10]. Ce modèle comprenant sept équations fut à l'origine conçu pour traiter des processus de sublimation dans des explosifs granulaires en prenant en compte les échanges mécaniques, visqueux, thermiques et chimiques entre les phases. Plus tardivement, Drew et Passman [11] en utilisant un procédé d'homogénéisation sur les équations de Navier-Stokes obtiennent une catégorie plus générique de modèles comprenant lui aussi sept équations et les différentes interactions entre les phases. Ce modèle fut notamment utilisé par Saurel et Abgrall [12] pour résoudre des problèmes d'écoulements à phases séparées et à phases dispersées non visqueux.

Les modèles à interfaces diffuses disposent d'une pléthore de variantes et notamment de modèles simplifiés. En effet, ces modèles considèrent des pressions, des vitesses, des températures et des potentiels chimiques différents entre les phases. Ceci entraîne des termes d'échange entre les phases ayant pour but de ramener les quantités à l'équilibre. Ainsi, en considérant les transferts entre les phases suffisamment rapides, on peut par un procédé de convergence asymptotique (voir [4]), obtenir des modèles simplifiés considérant les variables considérées toujours à l'équilibre et donc égales. Les équations des milieux monophasiques sont alors remplacées par une équation de mélange à l'équilibre. Les modèles les plus connus sont donc les suivants :

— Un modèle constitué de quatre équations [13] pour lequel les pressions, les vitesses et les températures sont considérées à l'équilibre. On peut ajouter que ce modèle n'est pas à confondre avec le modèle HRM (homogeneous relaxation model) de Bilicki [14]. Ce dernier considère l'équilibre entre les phases des vitesses et des pressions. En revanche les températures sont quant à elles en déséquilibre, puis pour fermer le système la température du milieu gazeux est toujours considérée à son état de saturation.
— Le modèle à cinq équations de [15] pour lequel on assume l'équilibre entre les vitesses et les pressions des phases. Ce modèle a initialement été introduit comme un modèle simplifié du modèle de Baer et Nunziato pour simuler des problèmes d'explosifs granulaires. Dans [16], ce modèle est utilisé pour traiter des écoulements liquide-vapeur et d'epoxy-spinel.
— Le modèle à six équations de Pelanti et Shyue [17], où seulement les vitesses sont imposées à l'équilibre, utilisé pour résoudre une pléthore de problèmes diphasiques. Dans [18], le modèle est appliqué à des écoulements triphasiques.

D'autres travaux récents [19] permettent d'ajouter des phénomènes physiques comme la tension de surface. En effet, dans les SIM, la tension de surface est introduite comme un terme de force surfacique séparant les deux états autour d'une interface. Dans les méthodes DIM cette définition ne peut pas être utilisée puisque l'interface est diffuse, celle-ci est alors introduite comme une force volumique dans les équations de bilan du modèle en utilisant la méthode de Brackbill [20]. Cela a notamment permis dans [21] la simulation d'écoulements d'ébullition dans l'eau avec la tension de surface permettant de prendre en compte les effets capillaires sur la forme des bulles.

Méthodes des volumes finis

La méthode des volumes finis est une catégorie de méthodes numériques très connues. Elle est couramment utilisée en mécanique des fluides par sa propriété inhérente à conserver les flux des quantités transportées.

Dans le cadre de ce travail nous présentons uniquement son utilisation pour résoudre des systèmes d'équations hyperboliques. Deux très bonnes références pour s'introduire à ces méthodes sont les livres de Toro [22] et de LeVeque [23] auxquels nous renvoyons le lecteur non-initié.

Une avancé majeure des méthodes numériques appliquées aux équations hyperboliques vient de Godunov. En effet dans [24], celui-ci propose de calculer les flux permettant l'évolution des variables évolutives en résolvant un problème de Riemann, ce qui permet alors une très bonne modélisation des ondes acoustiques. La résolution des systèmes d'équations non-linéaires nécessite alors la résolution de problèmes de Riemman généralisés (des exemples de résolutions de problèmes de Riemann généralisés peuvent être trouvés dans [25]).

Bien que très efficace pour capturer les chocs, la méthode de Godunov est une méthode d'ordre 1. Une avancé majeure ayant permis l'extension de ces méthodes pour construire des schémas d'ordre plus élevé provient de Van Leer. En effet dans [26], Van Leer introduit les méthodes de reconstruction polynomiale lui permettant la conception du schéma MUSCL-Hancock d'ordre 2. La reconstruction polynomiale sert à calculer de nouveaux états utilisés pour résoudre des problèmes de Riemann de la même manière que la méthode de Godunov.

Par soucis de complétude nous rajoutons que la reconstruction polynomiale a alors permis la construction de schéma d'ordre définissable. On peut alors citer les schémas ENO d'Harten ([27], [28]) et son extension WENO de Jiang et Shu [29]. De même les schémas ADER de Toro ([30], [31]) sont en concurrence avec ces derniers schémas. On peut rajouter que ces schémas ne sont pas TVD (Total Variation Diminishing), mais possèdent la propriété d'être essentiellement non oscillatoire, c'est à dire que les oscillations parasites deviennent négligeables pour des maillages de plus en plus fins.

Dans le cadre de ce travail nous utilisons une variante de la méthode de Godunov, la méthode de propagation des ondes développée par LeVeque (voir [23]).

La méthode des volumes finis a déjà été appliquée aux modèles à interfaces diffuses. Dans [32] Tokareva et Toro résolvent le modèle à sept équations avec un solveur HLLC. Dans [17], un système composé de six équations est résolu avec des solveurs HLLC et de Roe. D'autre part, un modèle à quatre équations est résolu dans [33] avec un solveur HLLC.

On peut conclure en rajoutant que dans [34], des écoulements de sang artériel ont été simulés avec succès avec l'utilisation des méthodes ADER.

Ainsi les principaux avantages des méthodes des volumes finis sont leur capacité à assurer la conservation des quantités physiquement conservées ainsi qu'une très bonne modélisation de la propagation des ondes grâce aux méthodes de Godunov. Des méthodes d'ordre très élevé sont en outre facilement extensibles pour des problèmes en une dimension. En revanche, pour des problèmes multidimensionnels il est difficile de conserver l'ordre élevé des méthodes et notamment pour des maillages non-structurés. En outre, afin d'augmenter l'ordre de convergence, il est nécessaire d'augmenter le stencil, rendant difficile une parallélisation efficace pour des problèmes ayant un temps de calcul coûteux. Par soucis de complétude nous pouvons citer deux travaux récents [35] et [36] présentant des méthodes des volumes finis d'ordre très élevé pour des maillages fortement non-structurés appliquées au modèle diphasique à sept équations de Baer et Nunziato en deux et trois dimensions.

Méthodes aux résidus distribués

Les méthodes aux résidus distribués aussi appelées "fluctuation splitting" découlent d'un travail de Roe [37], [38] définissant les notions de signal et de fluctuation. Elles ont été reprises et developpées par Roe, Struijs et Deconinck [39], [40], Abgrall [41], et Roe et Abgrall [42].

L'objectif recherché de ces méthodes est d'utiliser un maximum d'informations afin de construire des schémas "multidimentional upwind", monotones, d'ordre élevé et à support compact.

Ces schémas ont dans un premier temps été développés pour résoudre des problèmes stationnaires. Ces méthodes ont permis la conception de méthodes d'ordre très élevé pour des maillages fortement non-structurés (une revue récente peut être trouvée dans [43]). On peut citer les travaux de Abgrall [44], [45] et plus récemment [46] pour résoudre des équations hyperboliques avec les équations de Burgers ou d'Euler. Récemment, les méthodes ont été étendues aux problèmes paraboliques. Ainsi, De Santis et Abgrall ont traité des problèmes en utilisant les équations de Navier-Stokes [47, 48, 49, 50] pour résoudre des écoulements autour de profils d'ailes d'avions telles qu'une géométrie NACA 012. Cela a été fait pour des vitesses de

convergence d'ordre très élevé.

Du point de vue instationnaire, les méthodes sont toujours en cours de développement. Une des difficultés majeures de cette extension est la difficulté de conception de méthodes d'ordre élevé explicites en temps. En revanche des méthodes d'ordre élevé implicites ont déjà été développées avec succès. On peut citer les travaux de Palma [51], [52] pour les équations d'Euler ou de Nishikawa [53] pour des problèmes paraboliques et plus exactement l'équation de Burgers visqueuse. De nombreux travaux ont aussi été réalisés par Ricchiuto pour les équations des " eaux peu profondes" [54] [55]. Un très bon recueil des méthodes aux résidus distribués peut être trouvé dans [56] présentant la simulation de tsunamis.

Assez récemment des méthodes très prometteuses ont permis de mettre au point des méthodes à multi-pas semblables aux méthodes de Runge-Kutta permettant d'obtenir des méthodes aux résidus distribués explicites et d'ordre élevé. Cette méthode a permis l'obtention de méthodes à l'ordre 2 dans [57], qui ont été généralisées par Abgrall [58]. Ces méthodes ont permis d'effectuer des calculs à l'ordre 3 et 4 pour les équations d'Euler [59] pour des problèmes de "Double Mach Reflection" et de tunnel de vent à Mach 3 pour des maillages fortement non structurés.

On peut finalement citer quelques travaux concernant les fluides multiphasiques [60], [61] résolvant le modèle à cinq équations de Kapila [15] mais sans transfert de masse et uniquement pour des problèmes en une dimension.

Enjeux et objectifs

A ce jour, les méthodes aux résidus distribués ont été développées pour résoudre des problèmes impliquant des fluides monophasiques comme les équations d'Euler ou de Navier-Stokes. Ainsi l'un des objectifs majeurs de ce travail est d'étendre ces méthodes en cours d'essor aux modèles à interfaces diffuses afin de traiter des problèmes impliquant des fluides multiphasiques.

Donc, le premier enjeu est de formuler un schéma aux résidus distribués d'ordre élevé pour la simulation d'écoulements diphasiques. En effet, afin d'optimiser le temps de calcul on cherche à construire des méthodes d'ordre élevé permettant d'obtenir les résultats les plus précis possible pour un maillage comportant le moins de mailles possible pour réduire le temps et donc le coût des calculs. Les méthodes des volumes finis d'ordre élevé sont développées pour être facilement utilisables pour des maillages structurés dans des géométries simples mais sont difficilement implémentables et perdent en grande partie en précision dans des géométries complexes nécessitant des maillages fortement non-structurés. Puisque les écoulements industriels se déroulent majoritairement dans des géométries complexes, les méthodes aux résidus distribués sont alors de très bonnes candidates. En effet, les méthodes aux résidus distribués sont non seulement facilement applicables à des maillages fortement non-structurés mais sont aussi à support compact, ce qui permet une parallélisation triviale des méthodes d'ordre élevé. Nous cherchons donc ici à obtenir des méthodes aux résidus distribués efficientes en utilisant des maillages fortement non-structurés pour des problèmes diphasiques.

Le second enjeu est de construire une méthode aux résidus distribués en utilisant nos sys-

tèmes sous une forme non-conservative. En effet, comme bien connu depuis [62], résoudre numériquement une équation de bilan sous forme non-conservative entraîne une mauvaise convergence du problème vers la solution réelle du modèle. Usuellement, pour résoudre une équation de bilan sous forme non-conservative, il est courant d'avoir recours à des schémas "path-conservatif" [63]. Malheureusement, comme présenté dans [64], même si un schéma path-conservatif est construit en se basant sur la forme conservative (si elle est connue), le résultat peut ne pas converger vers la bonne solution. Un autre problème ici est que d'un point de vue industriel ce ne sont pas les variables des formes conservatives des systèmes qui présentent un intérêt. Celles-ci peuvent bien entendu être déterminées une fois les variables conservatives connues mais pour des problèmes complexes utilisant par exemple des lois d'états non-linéaires, leurs profils peuvent être dégradés lors de leurs obtentions (par exemple le profil de pression est souvent dégradé dans une onde de contact).

D'autre part, la construction d'une méthode numérique efficace n'est pas la seule difficulté pour effectuer une résolution réaliste du problème. En effet cela passe non seulement par un choix d'équations et de modèles adéquats mais aussi par la mise en place d'un domaine spatial, de conditions aux limites et d'un état initial suffisamment représentatif du problème à étudier.

Lors de la résolution de ces modèles on peut observer l'apparition d'interfaces diffuses qui ne sont pas cohérentes physiquement. En effet, deux fluides diphasiques sont séparés par une zone microscopique induisant la tension de surface entre les fluides, or les modèles à interfaces diffuses considèrent une séparation nette entre les fluides (dans [19] une méthode pour implémenter la tension de surface est proposée quand celle-ci ne peut pas être négligée). En outre l'interface diffuse se forme en raison des erreurs de diffusion numérique et n'est donc pas incluse dans la physique du modèle, on peut voir dans [65] une méthode de compression d'interface pour minimiser l'épaisseur de l'interface.

De même pour résoudre nos systèmes, il est nécessaire d'imposer une fermeture thermodynamique aux fluides en utilisant une loi d'état. Les corrélations entre les variables d'état du fluide étant fortement non-linéaires on peut par exemple utiliser une loi d'état très complexe (on peut citer pour l'eau la loi d'état IAPWS [66]) nécessitant un fort coût en temps de calcul. Dans le cas de faibles variations des variables d'état on peut utiliser une loi plus simple comme la loi d'état stiffened gas assurant une variation linéaire entre l'énergie et la pression du fluide [67]. Dans ce cas, il faut alors bien calibrer les paramètres de l'équation d'état.

Plus généralement, la mise en place d'un cas-test numérique est construite à partir de nombreuses études d'origines expérimentales. Les conditions initiales et les résultats de l'expérience permettent alors la construction du modèle, ces données présentant malheureusement des erreurs de mesure. Par conséquent, en plus des erreurs liées aux phénomènes non pris en compte par les modèles s'ajoutent des données incertaines provenant d'erreurs expérimentales. De même, l'utilisation d'outils numériques ne permet alors pas de quantifier l'effet d'imprévus sur l'évolution du problème pouvant dans le pire des cas causer des accidents.

Ainsi, nous chercherons à étudier l'effet de ces incertitudes sur deux expériences de problèmes industriels réels, l'expérience de Canon et l'expérience de Simpson.

Travaux réalisés

Les contributions apportées par ce travail peuvent-être décomposées en trois parties.

En premier lieu, nous résolvons deux différents modèles à interfaces diffuses en utilisant la méthode de propagation des ondes. Les modèles à six équations et quatre équations sont alors résolus avec les solveurs HLLC présentés dans [17] pour le système à six équations et [33] pour le système à quatre équations. Les résultats sont alors comparés pour de nombreux cas tests et maillages où l'on considère initialement l'égalité des pressions et des températures.

La seconde contribution de ces travaux est l'extension de méthodes aux résidus distribués au modèle à quatre équations. Ce travail a notamment été effectué en collaboration avec l'université de Zurich (le professeur Rémi Abgrall et le docteur Paola Bacigaluppi). Cette résolution est effectuée en partant de la forme non-conservative du système sur l'énergie interne. Puis la conservation est assurée en utilisant la technique introduite dans [68] en utilisant la forme conservative connue afin d'assurer la bonne convergence du problème. La méthode d'optimisation de [69] est utilisée afin d'améliorer les résultats. Une comparaison est alors effectuée avec la méthode de propagation des ondes pour des cas tests utilisant des maillages structurés en une et deux dimensions. Nous appliquons ensuite notre méthode aux résidus distribués à des problèmes utilisant des maillages fortement non-structurés.

Finalement, la dernière partie présente une analyse de l'incertitude des paramètres du modèle appliquée à deux expériences provenant de problèmes industriels réels : les expériences de Simpson et Canon. Premièrement, nous estimons l'impact sur la variabilité de certaines quantités d'intérêt. Donc, une décomposition ANOVA est alors utilisée pour mesurer l'impact de chaque incertitude sur la variabilité de la solution numérique.

Structure de la thèse

Le but de ce travail est de développer des méthodes numériques permettant des simulations d'ordre élevé d'écoulements diphasiques dans des configurations complexes. Ce manuscrit est articulé comme suit :

Chapitre 1 :

Ce chapitre présente une introduction aux modèles diphasiques à interfaces diffuses. En outre nous présentons la construction de la loi d'état diphasique permettant la fermeture du système.

Dans le premier chapitre, nous présentons la classe des modèles diphasiques à interfaces diffuses. Nous rappelons la méthode d'obtention de ces modèles à partir des équations de Navier-Stokes via le procédé d'homogénéisation de Passman et Drew [11]. Nous définissons alors les différents termes de transfert entre les phases et la modélisation que nous avons utilisée. Puis, nous discutons de différents modèles réduits obtenables par limite asymptotique, de leurs avantages et de leurs inconvénients. Nous nous attardons notamment sur le modèle à quatre équations [13] et le modèle à six équations [17] que nous utilisons par la suite. Le reste du chapitre est consacré à décrire la modélisation de l'équation d'état du mélange et des hypothèses inhérentes

permettant de modéliser les transferts de masse.

Chapitre 2 :

Ce chapitre présente une base bibliographique concernant les méthodes de type Godunov et notamment la méthode de propagation des ondes telle qu'elle est utilisée dans nos calculs.

Nous présentons ici la méthode de propagation des ondes, une variante des méthodes de Godunov [24]. Ainsi, dans un premier temps nous rappelons rapidement la résolution d'un problème de Riemann. Puis nous présentons le cadre de travail de la méthode des volumes finis et la manière dont la résolution d'un problème de Riemann permet d'obtenir des schémas modélisant très bien les chocs. Nous voyons en outre aussi comment la méthode est passée à l'ordre 2 en utilisant des limiteurs tout en restant monotone. Pour conclure le chapitre, nous voyons comment les conditions aux limites sont imposées dans les problèmes numériques que nous résolvons dans les chapitres suivants.

Chapitre 3 :

Ce chapitre illustre les méthodes aux résidus distribués. Nous présentons leur fonctionnement pour résoudre des problèmes instationnaires.

Comme déjà explicité, un des objectifs de ce travail est d'étendre les méthodes aux résidus distribués aux modèles diphasiques à interfaces diffuses. Ainsi, dans ce troisième chapitre nous présentons ces méthodes, leurs principes et leurs fonctionnements et leurs cadres de travail mixant les éléments finis et les volumes finis, pour des problèmes stationnaires et instationnaires. Nous définissons et rappelons notamment les notions de fluctuation et de résidu. En outre, nous nous attardons sur les méthodes permettant d'obtenir des méthodes explicites, monotones et d'ordre élevé (d'abord pour des problèmes stationnaires, puis instationnaires en se basant sur les travaux de Ricchiuto et Abgrall [57], [58]). Pour terminer le chapitre, nous présentons l'implémentation des conditions aux limites.

Chapitre 4 :

Ce chapitre est consacré à une étude comparative entre les systèmes à quatre et six équations. Celle-ci est effectuée en utilisant la méthode de propagation des ondes avec le logiciel Clawpack.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au modèle à quatre équations [13] ainsi qu'au modèle à six équations [17]. Les systèmes sont alors résolus en utilisant des solveurs HLLC [70] repris de [33] et [17]. Nous ajoutons que les systèmes sont résolus par splitting, les termes sources sont ainsi traités indépendamment en suivant la procédure proposée dans [17]. Ces solveurs ont alors été implémentés dans le logiciel Clawpack [71]. Nous comparons alors les résultats des modèles diphasiques à quatre et six équations dans les cas où, initialement, les pressions et les températures des mélanges sont à l'équilibre. En outre, les remises à l'équilibre des pressions et des températures du modèle à six équations sont considérées instantanées.

Chapitre 5 :

Dans ce chapitre nous étendons la méthode aux résidus distribués au système à quatre équations. La validité de la méthode est alors confirmée en comparant les résultats avec la méthode de propagation des ondes. Notre méthode est utilisée pour résoudre de nombreux cas tests utilisant des maillages structurés et fortement non-structurés.

Ce chapitre est consacré à l'extension des méthodes aux résidus distribués au modèle à quatre équations. La première partie de ce chapitre est consacrée à la présentation des schémas spatiaux et temporels que nous avons utilisés. Nous ajoutons que suivant [69], la résolution utilise un algorithme d'optimisation à postériori se basant sur l'algorithme de MOOD [72] permettant d'appliquer le schéma idéal selon que la solution est continue ou présente un choc. Par ailleurs, nous avons recours à la méthode proposée dans [68] pour résoudre le système sous forme non-conservative de manière à assurer la bonne convergence du schéma.

Les résultats sont comparés avec ceux obtenus avec la méthode de propagation des ondes. Suite à cela nous nous consacrons à la méthode aux résidus distribués pour résoudre des cas tests dans des configurations industrielles complexes intraitables avec le logiciel Clawpack et nécessitant des maillages fortement non structurés.

Chapitre 6 :

Dans ce chapitre, nous présentons une étude de quantification d'incertitude appliquée aux modèles diphasiques à quatre et six équations quand ceux-ci sont appliqués à des problèmes industriels réels. L'étude est réalisée en utilisant la méthode de propagation des ondes.

Le dernier chapitre de ce travail présente les résultats obtenus en utilisant les modèles à quatre et six équations pour simuler des cas-tests expérimentaux. Pour ce chapitre, nous utilisons la méthode de propagation des ondes telle qu'elle est présentée dans le chapitre quatre. Les cas considérés sont l'expérience de Canon [73] et l'expérience de Simpson [74]. Pour affiner la prédiction numérique, nous utilisons des méthodes de quantification d'incertitude afin d'évaluer l'impact de l'incertitude de certains paramètres d'entrée sur la prédiction de certaines quantités de sortie.

Chapitre 1

Modèles multiphasiques

1.1 Introduction

Nous allons ici présenter les modèles d'écoulements multiphasiques compressibles que nous utiliserons par la suite. Il existe une grande variété de modèles servant à modéliser des écoulements multiphasiques, chacun ayant leurs avantages et leurs inconvénients. On peut nommer les méthodes level-set ([3], [75] ou VOF (volume of fluid [2],[76]) dans lesquelles chacun des fluides est modélisé indépendamment par un système d'équations monophasiques, la séparation des fluides est alors modélisée par une méthode de traitement de l'interface. Ces méthodes permettent ainsi une très bonne modélisation de l'interface. En revanche cela nécessite dans le cas d'écoulement à phases dispersées des maillages très fins et donc un fort coût de calcul. De plus ces modèles ne permettent pas de modéliser des apparitions spontanées de phases comme dans les problèmes de cavitation.

Nous nous intéressons à un autre type de modèle, des modèles permettant à la fois de modéliser des écoulements à phases séparées et à phases dispersées. En effet, dans ce cas le milieu est considéré comme un mélange et la séparation des modèles est alors incluse dans le modèle. Les écoulements à phases dispersées apparaisent alors comme une zone de mélange tandis que dans le cas des écoulements à phases séparées celles-ci sont séparées par une couche de mélange en raison des erreurs de diffusion numérique. On perd ainsi une bonne résolution de l'interface. Pour ces raisons, ces méthodes sont dénommées à interfaces diffuses. En revanche, ces méthodes permettent de traiter aisément des interactions entre les fluides et de modéliser des apparitions de phases spontanées. On peut rajouter, que l'utilisation de méthodes à interfaces tranchées demande généralement des domaines de calcul en trois dimensions pour modéliser les interfaces. En utilisant les modèles à interfaces diffuses, puisque les interfaces ne sont pas modélisées explicitement, il est alors possible d'obtenir des résultats concluant en réalisant des simulations en une ou deux dimensions (si la géométrie le permet).

Dans ce travail, nous nous intéressons aux modèles à interfaces diffuses. Il existe évidemment une grande variété de ces modèles, on peut citer le modèle précurseur de Baer et Nunziato [10], le modèle de Pelanti-Shyue [17] ou le modèle à cinq équations de Kapila [15] et le modèle HRM de Downar et Bilicki [14]. On peut se référer à la hiérarchie retranscrite par Lund pour y voir plus clair [77].

Pour cette raison, dans ce chapitre nous allons présenter cette classe de modèles multipha-

siques et mettre en valeur les atouts et les inconvénients des différentes variantes de ces modèles. Nous verrons ensuite, la conception de la loi d'état multiphasique que nous utilisons pour clore le modèle.

1.2 Hiérarchisation des modèles

1.2.1 Modèle à sept équations

1.2.1.1 Obtention du modèle

Afin de mieux comprendre l'origine et le comportement de ces modèles nous allons rappeler les étapes clés permettant l'obtention de ces modèles. Celles-ci peuvent être trouvées de manière détaillée dans [11] et dans [4].

On considère que chacun des fluides est modélisé par les équations de Navier-Stokes (1.1) définies de la façon suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + div(\rho_k \overrightarrow{u}_k) = 0, \\ \frac{\partial \rho_k \overrightarrow{u}_k}{\partial t} + div(\rho_k \overrightarrow{u}_k \otimes \overrightarrow{u}_k) + \nabla P_k - div\underline{\underline{\tau_k}} = \rho_k \overrightarrow{f}^v_k, \\ \frac{\partial E_k}{\partial t} + div((E_k + P_k) \otimes \overrightarrow{u}_k) + div(\overrightarrow{q}_k - \underline{\underline{\tau_k}}) = \rho_k \overrightarrow{f}^v_k . \overrightarrow{u}_k, \\ k = 1,2. \end{cases} \tag{1.1}$$

"t" est le temps de l'écoulement. Pour une phase "k", ρ_k est sa masse volumique, $\overrightarrow{u}_k$ est sa vitesse, P_k sa pression, $\underline{\underline{\tau_k}}$ est le tenseur des contraintes visqueuses et $\overrightarrow{f}^v_k$ les forces volumiques agissant sur les fluides. En outre, E_k est l'énergie totale volumique de la phase k et $\overrightarrow{q}_k$ sa conduction thermique.

Nous définissons les fonctions caractéristiques des domaines $X_k(x,t)$ telles que $X_k(x,t) = 1$ si x appartient au fluide k et $X_k(x,t) = 0$ si x n'appartient pas au fluide k. La suite de la procédure introduite dans [11] et [4] est alors un procédé d'homogénéisation, les équations de Navier-Stokes sont multipliées par la fonction X_k puis les équations sont moyennées. Notons la valeur moyenne de la fonction X_k, $< X_k >= \alpha_k$, celle-ci représente la fraction volumique du fluide k dans le mélange et permet donc de séparer le volume de chaque fluide k dans le mélange. Après quelques étapes de calcul le système peut alors être réécrit en un système (à six équations pour un mélange diphasique) reliant les valeurs moyennées des fluides dans le mélange par des termes sources modélisant les interactions et échanges entre les phases, que nous définirons plus en détail par la suite. Ce dernier système est donné par le système d'équations (1.2) :

$$\begin{cases}
\frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u_1}) = \Gamma, \\
\frac{\partial \alpha_1\rho_1\overrightarrow{u_1}}{\partial t} + \nabla(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u_1}\otimes\overrightarrow{u_1}) + \nabla(\alpha_1 P_1) - div(\alpha_1\underline{\underline{\tau_1}}) = \overrightarrow{u_r}\Gamma + P_I\nabla\alpha_1 + \overrightarrow{M^d} + \alpha_1\rho_1\overrightarrow{f_1^v}, \\
\frac{\partial \alpha_1 E_1}{\partial t} + \nabla((\alpha_1 E_1 + \alpha_1 P_1)\overrightarrow{u_1}) + \nabla(\alpha_1(\overrightarrow{q_1} - \underline{\underline{\tau_1}}\overrightarrow{u_1})) = \\
(h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma - P_I\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{M^d}.\overrightarrow{u_I} + Q_I + \alpha_1\rho_1\overrightarrow{f_1^v}.\overrightarrow{u_1}, \\
\frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u_2}) = -\Gamma, \\
\frac{\partial \alpha_2\rho_2\overrightarrow{u_2}}{\partial t} + \nabla(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u_2}\otimes\overrightarrow{u_2}) + \nabla(\alpha_2 P_2) - div(\alpha_2\underline{\underline{\tau_2}}) = -\overrightarrow{u_r}\Gamma - P_I\nabla\alpha_1 - \overrightarrow{M^d} + \alpha_2\rho_2\overrightarrow{f_2^v}, \\
\frac{\partial \alpha_2 E_2}{\partial t} + \nabla((\alpha_2 E_2 + \alpha_2 P_2)\overrightarrow{u_2}) + \nabla(\alpha_2(\overrightarrow{q_2} - \underline{\underline{\tau_2}}\overrightarrow{u_2})) = \\
-(h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma + P_I\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} - \overrightarrow{M^d}.\overrightarrow{u_I} - Q_I + \alpha_2\rho_2\overrightarrow{f_2^v}.\overrightarrow{u_2}.
\end{cases} \tag{1.2}$$

Finalement, pour clore le système, différentes approches existent ([4], [10]). Dans notre cas celle utilisée consiste à rajouter une équation additionnelle modélisant l'évolution de la fraction volumique. Cette dernière équation est donnée par (1.3) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{u_\alpha}\nabla\alpha_1 = \dot{\alpha_1}. \end{cases} \tag{1.3}$$

Finalement, pour un fluide diphasique, non pesant, en négligeant les effets de la viscosité et les transferts conductifs de chaleur, on obtient alors un système à sept équations donné par le système (1.4) :

$$\begin{cases}
\frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u_1}) = \Gamma, \\
\frac{\partial \alpha_1\rho_1\overrightarrow{u_1}}{\partial t} + \nabla(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u_1}\otimes\overrightarrow{u_1}) + \nabla(\alpha_1 P_1) = \overrightarrow{u_r}\Gamma + P_I\nabla\alpha_1 + \overrightarrow{M^d}, \\
\frac{\partial \alpha_1 E_1}{\partial t} + \nabla((\alpha_1 E_1 + \alpha_1 P_1)\overrightarrow{u_1}) = (h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma - P_I\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{M^d}.\overrightarrow{u_I} + Q_I, \\
\frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u_2}) = -\Gamma, \\
\frac{\partial \alpha_2\rho_2\overrightarrow{u_2}}{\partial t} + \nabla(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u_2}\otimes\overrightarrow{u_2}) + \nabla(\alpha_2 P_2) = -\overrightarrow{u_r}\Gamma - P_I\nabla\alpha_1 - \overrightarrow{M^d}, \\
\frac{\partial \alpha_2 E_2}{\partial t} + \nabla((\alpha_2 E_2 + \alpha_2 P_2)\overrightarrow{u_2}) = -(h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma + P_I\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} - \overrightarrow{M^d}.\overrightarrow{u_I} - Q_I, \\
\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{u_\alpha}\nabla\alpha_1 = \dot{\alpha_1}.
\end{cases} \tag{1.4}$$

Dans le cas d'un mélange gaz-solide soumis à de la sublimation, poser la pression interfaciale égale à celle du gaz $P_I = P_g$ et la vitesse de l'interface entre les fluides à celle du solide $u_\alpha = u_s$ permet de retrouver le modèle précurseur de Baer et Nunziato (se référer à [10] et [78] pour plus de détails, notammment concernant le traitement des termes sources).

Ce système est la version la plus élaborée des modèles à interfaces diffuses et regroupe toutes les interactions entre les fluides. Celles-ci sont modélisées par les termes sources $\dot{\alpha_1}$, M^d, Q_I, Γ. Malheureusement, ces termes n'ont pas de formulation analytique et doivent être adaptés aux problèmes considérés en utilisant des résultats expérimentaux. Nous allons maintenant voir un peu plus en détail ces termes.

1.2.1.2 Définitions des termes d'échanges interfaciaux

Les modèles à interfaces diffuses permettent de modéliser un milieu diphasique comme un milieu de mélange dans lequel a lieu de nombreuses interactions. Ces interactions sont re-

groupées dans quatre termes et ont pour but de mettre le mélange dans un état stable en ramenant les quantités des composants monophasiques à l'équilibre. On nomme ainsi : la compaction dynamique $\dot{\alpha_1}$, modélisant le processus de remise à l'équilibre mécanique et ramenant les pressions à l'équilibre ; le terme de traînée $\overrightarrow{M^d}$, ramenant les vitesses à l'équilibre ; les transferts de chaleur Q_I, modélisant le processus de convection de la chaleur ramenant les températures des phases à l'équilibre ; les transferts chimiques de masse Γ ramenant les potentiels chimiques des phases à un état stable.

Afin que le système ne perde pas en énergie et en matière, les sommes de chacun de ces termes sur toutes les phases doivent se compenser :

$$\sum_{k=1}^{2} \Gamma_k = 0; \sum_{k=1}^{2} M_k^d = 0; \sum_{k=1}^{2} Q_{k,I} = 0; \sum_{k=1}^{2} P_{k,I} \nabla \alpha_k = 0.$$

L'expression de ces termes n'étant pas connue, nous modélisons ceux-ci par une approche classique [4], soit :

— La compaction dynamique $\dot{\alpha_1} = \mu(P_2 - P_1)$
— La traînée : $M^d = \lambda(\overrightarrow{u_2} - \overrightarrow{u_1})$
— Les transferts de chaleur : $Q_I = \theta(T_2 - P_1)$
— Les transferts de masse : $\Gamma = \Theta(\nu_2 - \nu_1)$

Avec μ, λ, θ , Θ modélisant l'inverse des temps de relaxation du système $\varepsilon_p, \varepsilon_u, \varepsilon_T, \varepsilon_\nu$. Plus ceux-ci sont élevés et plus les temps de relaxation sont faibles et donc plus le processus est rapide. Fixer μ, λ, θ , Θ à une valeur tendant vers l'infini équivaut à un temps de relaxation nul et donc à un processus de relaxation instantané. A l'inverse fixer μ, λ, θ , Θ à 0 équivaut à un temps de relaxation infini, il n'y a alors pas de relaxation des variables. On peut de plus rajouter que cette formulation a l'avantage de respecter l'inégalité d'entropie.

Finalement une caractéristique très intéressante de ces processus est que leurs temps de relaxation ont des ordres de grandeur considérables entre eux. Un exemple de calcul des temps de relaxation peut être trouvé dans [4]. Les temps de relaxation des processus peuvent alors être classés comme suit :

$$\varepsilon_p << \varepsilon_u << \varepsilon_T << \varepsilon_g. \tag{1.5}$$

Cette propriété permet alors de découpler les différents transferts entre les phases et de les traiter l'une après l'autre en considérant que les variables aux temps de relaxation plus faibles sont à l'équilibre lorsque les processus des autres variables se déroulent. En outre cela permet notamment de réaliser des processus de limite asymptotique permettant d'obtenir des modèles simplifiés, comme montré par la suite.

1.3 Modèles réduits

1.3.1 Modèle à quatre équations

Nous commençons par présenter le système à quatre équations. Cette variante peut être observée dans les travaux d'Abgrall [13] ou encore dans ceux d'Hérard [79] et s'obtient à partir du système à sept équations par limite asymptotique des pressions, de la vitesse et des températures (1.6). Si on considère les termes interfaciaux, on a alors :

$$\dot{\alpha_1} \to \infty : P_1 = P_2, \lambda \to \infty : u_1 = u_2, \theta_I \to \infty : T_1 = T_2. \tag{1.6}$$

Ce modèle a l'avantage contrairement aux autres modèles de possèder une partie convective pouvant s'écrire sous forme conservative. Dans ce modèle, on considère que seulement les potentiels chimiques sont en déséquilibre, il n'est ainsi pas possible de prendre en compte les effets de déséquilibres liés à un liquide surchauffé ou un gaz sousrefroidi. Le système est défini par le système d'équations suivant (1.7) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1 \rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1 \rho_1 \overrightarrow{u}) = \Gamma, \\ \frac{\partial \alpha_2 \rho_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2 \rho_2 \overrightarrow{u}) = -\Gamma, \\ \frac{\partial \rho \overrightarrow{u}}{\partial t} + \nabla(\rho \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{u}) + \nabla(P) = 0, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla((E+P)\overrightarrow{u}) = 0. \end{cases} \tag{1.7}$$

Dans les cas où nous utilisons une équation d'état stiffened gas comme nous le verrons par la suite, la vitesse du son (1.8) peut être calculée comme suit ([21] ,[80]) :

$$\begin{cases} c^2 = \frac{1}{2}\Big([e - (Y_l q_l + Y_g q_g)](a_1 + a_2) + \frac{\frac{1}{2}(\frac{\partial R_1}{\partial \rho})_e R_1 + (\frac{\partial R_2}{\partial \rho})_e}{\sqrt{\frac{1}{4}R_1 R_1 + R_2}} \\ + \frac{P}{\rho^2}(\rho(a_1 + a_2) + \frac{\frac{1}{2}(\frac{\partial R_1}{\partial e})_\rho R_1 + (\frac{\partial R_2}{\partial e})_\rho}{\sqrt{\frac{1}{4}R_1 R_1 + R_2}}) \Big), \end{cases} \tag{1.8}$$

— $a1 = \frac{Y_l(\gamma_l - 1)C_{v,l}}{Y_l C_{v,l} + Y_g C_{v,g}}$,
— $a2 = \frac{Y_g(\gamma_g - 1)C_{v,g}}{Y_l C_{v,l} + Y_g C_{v,g}}$,
— $R1 = a_2\rho[e - (Y_l q_l + Y_g q_g)] - a_2 P_{\infty,g} - a_1\rho[e - (Y_l q_l + Y_g q_g)] + a_1 P_{\infty,l} - P_{\infty,g} + P_{\infty,l}$,
— $R2 = a_2 a_1(\rho[e - (Y_l q_l + Y_g q_g)] - P_{\infty,l})(\rho[e - (Y_l q_l + Y_g q_g)] - P_{\infty,g})$.

Y_k est la fraction massique de la phase k ($Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}$), e est l'énergie interne spéficique du mélange. q_k, $C_{v,k}$, $P_{\infty,k}$ et γ_k sont les paramètres pour la phase k de la loi d'état stiffened gas présentée plus tard.

Nous rajoutons que bien que similaire, il ne faut pas confondre ce modèle avec un autre modèle, très connu pour simuler les transferts diphasiques, le modèle HRM (Homogeneous relaxation model). Celui-ci vient des travaux de Downar et Bilicki [14] et bien que les équations de bilan soient formellement les mêmes, la fermeture du modèle est différente. En effet, dans le modèle HRM la température du milieu gazeux est alors imposée à sa valeur d'évaporation, ce qui permet de prendre en compte les effets métastables liés aux gradients de température entre les fluides.

1.3.2 Modèle à cinq équations

D'abord introduit dans Kapila [15] comme une version simplifiée du modèle de Baer et Nunziato, ce modèle considère que seulement les températures et les potentiels chimiques des phases sont en déséquilibre, alors que les vitesses et pressions des fluides sont constamment imposées à l'équilibre. Soit :

$$\mu \to \infty : P1 = P2; \qquad \lambda \to \infty : \overrightarrow{u_2} = \overrightarrow{u_1}. \tag{1.9}$$

Ces hypothèses permettent ainsi de construire un modèle à cinq équations donné par le système (1.10) (ici le système est présenté tel qu'il est introduit dans [18]) ($\Gamma_k = (\frac{\partial P_k}{\partial \varepsilon_k})_{\rho_k}$ est le coefficient de Grüneisen de la phase k avec ε_k l'énergie interne volumique de la phase k) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{u}.\nabla\alpha_1 = \beta(\rho_2 c_2^2 - \rho_1 c_1^2)\nabla.\overrightarrow{u} + \beta(\frac{\Gamma_1}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2}{\alpha_2})Q + \beta(\frac{\Gamma_1(g_I - h_1) + c_1^2}{\alpha_1} + \frac{\Gamma_2(g_I - h_2) + c_2^2}{\alpha_2})\Gamma, \\ \frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} + \nabla.(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u}) = \Gamma, \\ \frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} + \nabla.(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u}) = -\Gamma, \\ \frac{\partial \rho\overrightarrow{u}}{\partial t} + \nabla.(\rho\overrightarrow{u}\otimes\overrightarrow{u}) + \nabla P = 0, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla.((E+P)\overrightarrow{u}) = 0, \\ \beta = \frac{\alpha_1\alpha_2}{\alpha_2\rho_1 c_1^2 + \alpha_1\rho_2 c_2^2}, \Gamma_k = (\frac{\partial P_k}{\partial \varepsilon_k})_{\rho_k}. \end{cases} \tag{1.10}$$

Tout comme le modèle de Baer et Nunziato, ce modèle a été conçu pour traiter des problèmes d'explosifs granulaires. D'autre part, une variante est proposée par Allaire [81] utilisant une simple équation de transport pour la fraction volumique. Comme présenté plus tôt, ces modèles sont des modèles réduits du modèle à sept équations. En 2005 Murrone obtient ce modèle en utilisant une méthode de réduction de modèle par limite asymptotique en considérant les pressions et vitesses des deux milieux toujours à leurs valeurs d'équilibres (se référer à [16] et [4] pour plus de détails ainsi qu'une analyse mathématique du modèle).

On peut de plus rajouter que ce modèle est caractérisé par la vitesse du son de Wallis équivalente à la vitesse du son de Wood. Celle-ci est rappelée par l'expression (1.11) :

$$C_w = \sqrt{\frac{1}{\rho}(\frac{\alpha_1}{\rho_1 c_1^2} + \frac{\alpha_2}{\rho_2 c_2^2})^{-1}}, \tag{1.11}$$

Où c_k est la vitesse du son monophasique du milieu k.

Ce modèle est très utilisé dans les simulations des milieux diphasiques mais possède quelques inconvénients du point de vue de la résolution numérique. Cela est dû à l'équation de conservation de la fraction volumique contenant un terme non-conservatif qui dépend de la divergence de la vitesse. En effet, comme il est bien connu depuis les travaux de Lefloch et Hou [62], une approximation numérique discrète d'une équation écrite sous forme non-conservative converge systématiquement vers une mauvaise solution (dans [64] une étude montre que même si la forme conservative est connue, la solution peut tout de même converger vers une fausse solution). Cela est notamment dû au fait que la solution converge vers une solution prenant en compte la viscosité numérique lors de la résolution. En outre ces termes non-conservatifs sont très complexes,

si bien qu'il est difficile de choisir une discrétisation du terme permettant d'assurer la positivité des fractions volumiques.

En outre, un autre défaut de ce modèle, vient de l'expression de la vitesse du son (1.11). Différentes vitesses de différents modèles du son sont représentées sur la figure 1.2, on voit alors que la vitesse du son de Wallis diminue fortement dans la zone de mélange en comparaison des vitesses monophasiques, or comme déjà expliqué les modèles à interfaces diffuses présentent une interface élargie à cause de la viscosité numérique. Ainsi comme le montre la figure 1.1, les ondes acoustiques traversant l'interphase entre deux phases pures sont alors fortement retardées, ce qui peut poser des problèmes lors de la résolution numérique.

Cela est notamment introduit dans [82], ce même article propose pour contourner le problème d'utiliser un modèle à six équations. Une version améliorée de ce modèle a alors été introduite par Pelanti et Shyue [17]. Ce modèle est présenté dans la prochaine section.

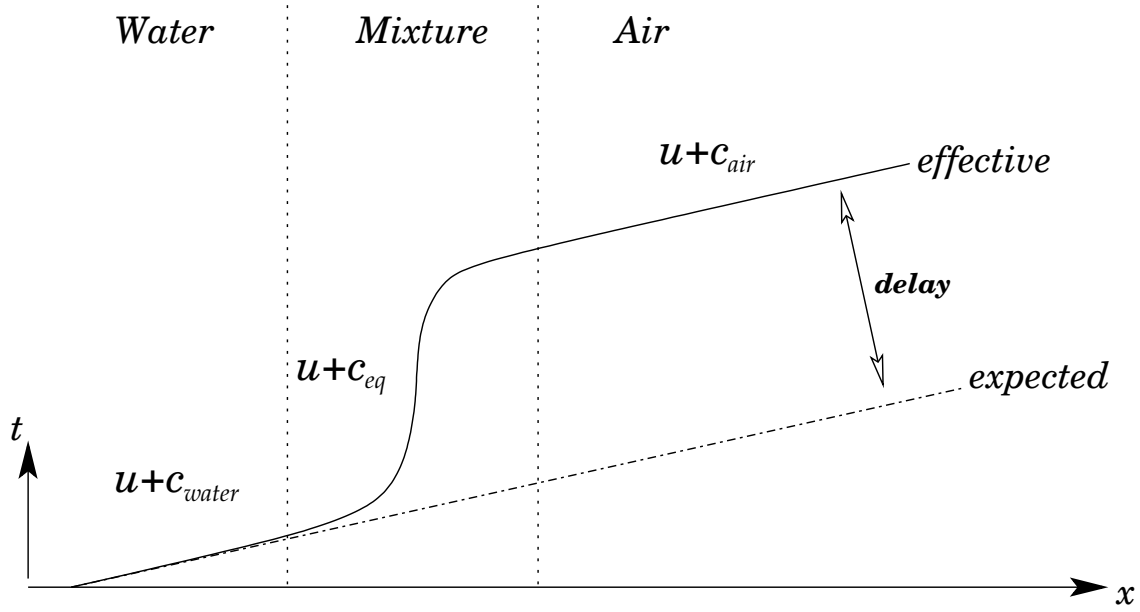


FIGURE 1.1 – Retard de la vitesse du son en raison des interfaces diffuses [83] (ce schéma présente la traversée d'une onde à travers une interface diffuse séparant des zones d'eau et d'air, on peut voir que l'erreur d'épaisseur de l'interface entraîne un retard de la traversée des ondes)

1.3.3 Modèle à six équations

D'abord introduit par Saurel [82], le modèle à six équations a pour but de contourner les problèmes liés à la résolution du système à cinq équations. Le modèle est alors obtenu à partir du système à sept équations en relaxant asymptotiquement les termes sources (1.12) :

$$\lambda \to \infty : u1 = u2. \tag{1.12}$$

Il est important de noter que cette relaxation ne respecte pas l'ordre des temps de relaxation (1.5). Il est alors nécessaire d'imposer que la relaxation des pressions soit instantanée lors de la résolution du problème pour que le modèle ait du sens.

Dans le cadre de ce travail, nous nous intéressons à une variante proposée plus tard par Pelanti et Shyue [17], réécrivant les équations de bilan des énergies internes pour leur forme de bilan sur les énergies totales. Cette expression est donnée par le système (1.13) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{u}\nabla\alpha_1 = \dot{\alpha_1}, \\ \frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} + \nabla(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u}) = \Gamma, \\ \frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} + \nabla(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u}) = -\Gamma, \\ \frac{\partial \rho\overrightarrow{u}}{\partial t} + \nabla(\rho\overrightarrow{u}\otimes\overrightarrow{u}) + \nabla(\alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_1 E_1}{\partial t} + \nabla((\alpha_1 E_1 + \alpha_1 P_1)\overrightarrow{u}) + \Upsilon = +(h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma - P_I\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + Q_I, \\ \frac{\partial \alpha_2 E_2}{\partial t} + \nabla((\alpha_2 E_2 + \alpha_2 P_2)\overrightarrow{u}) - \Upsilon = -(h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma + P_I\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} - Q_I, \\ c_{frozen} = \sqrt{Y_1 c_1^2 + Y_2 c_2^2}, \Upsilon = \overrightarrow{u}.(Y_1\nabla(\alpha_2 P_2) - Y_2\nabla(\alpha_1 P_1)). \end{cases} \tag{1.13}$$

Où P_I est la valeur de la pression à l'interface entre les deux fluides. Celle-ci est déterminée grâce aux impédances acoustiques des fluides k=1,2 $Z_k = \rho_k c_k$ et a pour expression $P_I = \frac{Z_2 P_1 + Z_1 P_2}{Z_1 + Z_2}$.

Les avantages de ce modèle par rapport au système à cinq équations peuvent être résumés comme suit :

— L'équation de bilan sur la fraction volumique est plus simple et comme nous le verrons plus en détail, nous résolverons le modèle avec une méthode de splitting. L'équation se réécrit alors comme une simple équation d'advection. Comme expliqué par Parés [84] dans ce cas particulier, le traitement numérique sous forme non-conservative n'empêche pas de converger vers la bonne solution faible du système. De plus, il n'y a pas de problème à assurer la positivité de la fraction volumique puisqu'il s'agit d'une simple équation d'advection.

— On peut toutefois noter un terme non-conservatif Υ dans les équations de bilan des énergies totales. Une première remarque est que dans tout les cas la conservation de l'énergie totale du mélange est assurée puisque les deux termes s'annulent de manière globale, de façon analogue la propriété est aussi garantie au niveau discret. En outre, comme présenté dans [17] et illustré dans [85], une fois l'étape de relaxation des pressions effectués, la méthode de traitement de ces termes n'est pas importante et la solution semble converger approximativement vers la même solution. On peut toutefois noter que cela n'est pas le cas pour des écoulements multiphasiques fortement impurs (masse volumique très éloignée de 0 et 1), mais par la suite nous ne nous intéresserons pas à ces cas. Ces termes peuvent ainsi être négligés sans que cela affecte la solution pour les écoulements qui nous intéressent.

— Le système est caractérisé par la vitesse du son figée c_{frozen}, en se référant à la figure 1.2. On voit que celle-ci est strictement monotone, ce qui permet d'éviter les difficultés numériques liées aux retards des ondes acoustiques.

Evidemment pour compléter ces modèles il est nécessaire d'imposer le comportement du fluide en lui allouant une loi d'état le caractérisant. Nous allons ainsi voir comment dans ce travail une loi d'état a été imposée aux milieux diphasiques.

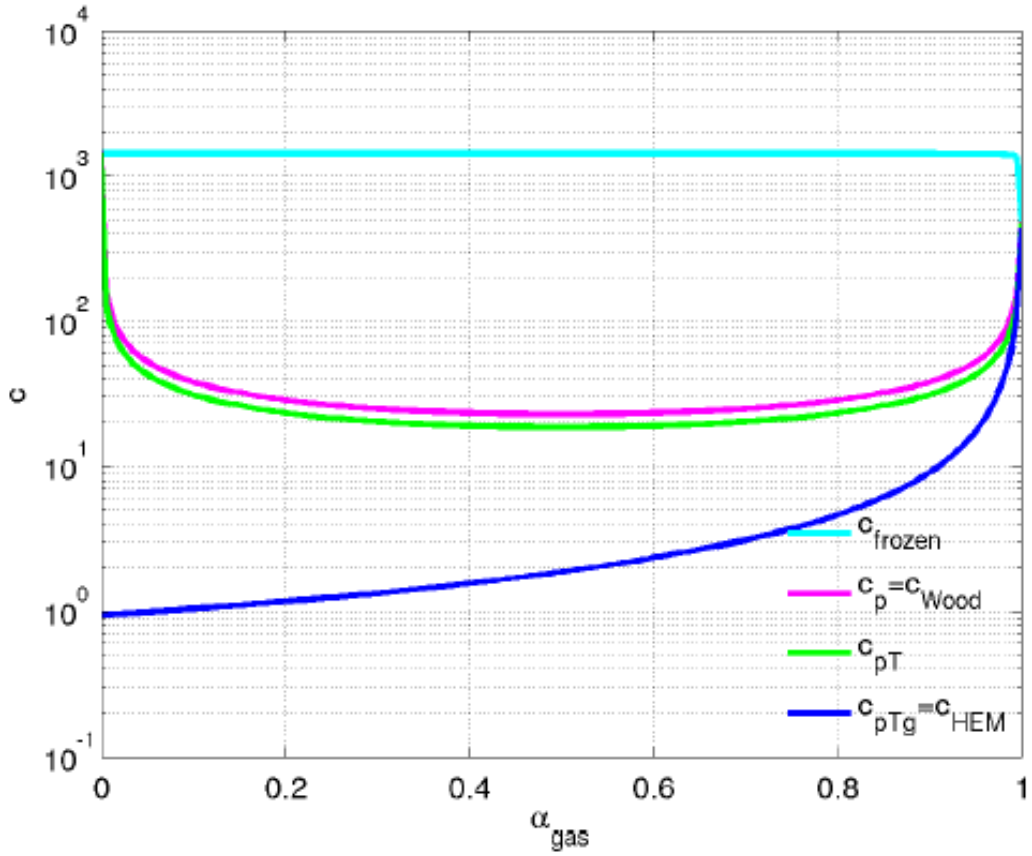


FIGURE 1.2 – Comparaison des vitesses du son de différents modèles [80] (La vitesse du son c_{frozen} du modèle à six équations est monotone. En rose et en vert les vitesses du son des modèles à cinq et quatre équations sont non-monotones. En bleu foncé, dans le cas d'un mélange totalement à l'équilibre, la vitesse du son présente une discontinuité)

1.4 Loi de fermeture des modèles

1.4.1 Loi des fluides monophasiques

Afin de fermer les modèles présentés il est nécessaire d'imposer des lois d'état modélisant à la fois les milieux monophasiques ainsi que le mélange. Avant de parler du cas diphasique, nous allons présenter comment nous avons modélisé les fluides dans un état monophasique.

Pour cela nous avons eu recours à une équation d'état de type stiffened gas. Cette équation d'état simple est une version linéarisée des équations de Mie-Grüneisen et assume un comportement linéaire entre l'énergie et la pression du fluide. Celle-ci est notamment présentée dans [67]. Une version plus complète a été élaborée récemment, dénommée Noble-Abel stiffened gaz, celle-ci est introduite par Le Métayer [86].

Ainsi, avec une loi d'état stiffened gas, la pression, l'énergie interne spécifique, la densité et l'énergie libre de Gibbs ("g_k") d'un milieu monophasique k sont données par les relations (1.14) :

$$\begin{cases} P_k = \rho_k(\gamma_k - 1)cv_k T_k - P_{\infty,k}, \\ e_k = cv_k T_k + \frac{P_{\infty,k}}{\rho_k} + q_k, \\ \rho_k = \frac{P_k + P_{\infty,k}}{(\gamma_k - 1)cv_k T_k}, \\ g_k = (\gamma_k cv_k - q_k^{'})T_k - cv_k T_k log\frac{T_k^{\gamma_k}}{(P_k + P_{\infty,k})^{\gamma_k - 1}} + q_k. \end{cases} \tag{1.14}$$

(T_k est la température de la phase k). La vitesse du son de ce milieu k est quant à elle donnée par la relation (1.15) :

$$c_k = \sqrt{\gamma_k \frac{P_k + P_{\infty,k}}{\rho_k}}. \tag{1.15}$$

L'équation d'état stiffened gas caractérise le fluide avec 5 paramètres γ, P_∞, cv, q et $q^{'}$. Pour déterminer ces paramètres on a recours à la procédure présentée dans [87] utilisant un couple de données liquide-vapeur afin de reproduire la courbe de saturation expérimentale du couple, donnée nécessaire à la construction de la loi d'état du milieu diphasique.

1.4.2 Loi du mélange

1.4.2.1 Modélisation du milieu diphasique

Consacrons nous maintenant à la modélisation du mélange. Il y a alors différentes approches pour modéliser le milieu diphasique lors d'un changement de phase. Le problème est alors de modéliser le comportement des fluides sous la binodale (voir figure 1.3, nous rappelons que la binodale est la courbe séparant les milieux liquides et vapeurs stables des milieux métastables), dans [88] on distingue notamment deux approches. La première est l'approche thermodynamique et la seconde l'approche cinétique.

— L'approche thermodynamique, utilise une seule équation reliant les deux phases, c'est le cas de l'équation d'état de Van der Waals. Bien que confortable avec une seule formulation, cette approche présente néanmoins deux inconvénients. En effet, les états métastables sont ainsi imposés dans l'équation d'état, or ceux-ci sont dépendants de différents facteurs comme la rugosité du milieu ou de la quantité d'impureté. Le second problème est que sous la spinodale la modélisation de l'état instable du fluide conduit à une expression de la vitesse du son imaginaire induisant des ondes acoustiques n'ayant pas de sens physique et qui ne peuvent donc pas être traitées numériquement. En effet cela induit une perte d'hyperbolicité est le problème devient alors mal posé.

— Dans l'approche cinétique chaque phase est modélisée par son équation d'état. L'équation d'état du mélange est alors obtenue en combinant ces deux équations. Cette approche permet alors d'obtenir une vitesse du son au carré uniformément positive sous la spinodale et donc d'assurer l'hyperbolicité du modèle. Nous adoptons cette deuxième approche.

Afin de modéliser les états métastables, nous faisons l'hypothèse que le fluide possède suffisamment d'impuretés et que les parois sont assez rugueuses de sorte que la spinodale et la binodale soient identiques. Cela veut dire que dès que le fluide dépasse sa température de liquéfaction ou d'évaporation alors le milieu devient instable et revient à l'équilibre en suivant le

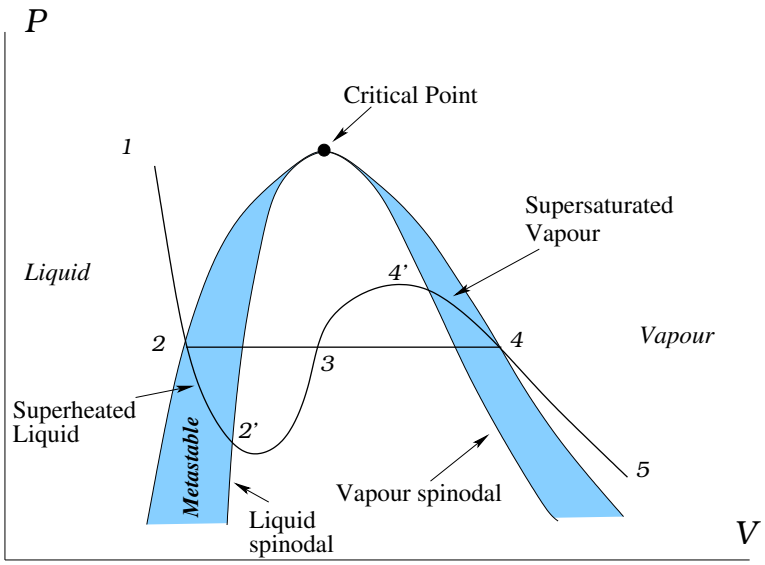


FIGURE 1.3 – Isotherme dans un diagramme d'équilibre des phases pression-volume d'un fluide diphasique [83]

chemin cinétique que nous avons imposé. Cette hypothèse est raisonnable dans le cas d'écoulements industriels.

1.4.2.2 Variables du milieu diphasique

Il nous reste à définir la loi d'état du mélange. En reprenant la méthodologie de [33], la loi d'état du mélange est alors donnée pour la densité et l'énergie interne spécifique, comme suit :

$$\begin{cases} \rho = \alpha_1\rho_1 + \alpha_2\rho_2, \\ e = Y_1 e_1 + Y_2 e_2. \end{cases} \tag{1.16}$$

En considérant le modèle à quatre équations, comme l'égalité des températures, des pressions et des vitesses entre les milieux est imposée on obtient alors les expressions suivantes pour la pression et pour la température :

$$\begin{cases} P = \frac{-a_1+\sqrt{a_1^2+4a_0a_2}}{2a_2}, \\ a_2 = Y_1 cv_1 + Y_2 cv_2, \\ a_1 = Y_1 cv_1(P_{\infty,2} + \gamma_1 P_{\infty,1} - (\gamma_1 - 1)Q) \\ +Y_2 cv_2(P_{\infty,1} + \gamma_2 P_{\infty,2} - (\gamma_2 - 1)Q), \\ a_0 = -Q((\gamma_1 - 1)Y_1 cv_1 P_{\infty,2} + (\gamma_2 - 1)Y_2 cv_2 P_{\infty,1}) \\ +P_{\infty,1}P_{\infty,2}(\gamma_1 Y_1 cv_1 + \gamma_2 Y_2 cv_2), \\ Q = \rho(e - (Y_1 q_1 + Y_2 q_2)). \end{cases} \tag{1.17}$$

$$T = \frac{1}{\rho}\left(\sum_k \frac{(\gamma_k - 1)Y_k cv_k}{P + P_{\infty,k}}\right)^{-1}. \tag{1.18}$$

En outre, afin de modéliser les transferts de masse et les états d'équilibre du modèle, il reste à définir la fonction représentant la courbe de saturation du modèle. Celle-ci s'obtient avec

l'égalité des potentiels chimiques $\mu_1 = \mu_2$ des deux phases. Dans le cas d'un milieu diphasique pur, cette expression est équivalente à l'égalité des énergies libres de Gibbs $g_1 = g_2$. En manipulant cette égalité on obtient alors l'expression liant la pression de saturation à la température de saturation caractérisant la courbe de saturation du milieu, comme suit :

$$\begin{cases} A_s + \frac{B_s}{T_k} + C_s log(T_k) + D_s log(P_k + P_{\infty,1}) - log(P_k + P_{\infty,2}) = 0, \\ A_s = \frac{cp_1 - cp_2 + q_2{}' - q_1{}'}{cp_2 - cv_2}, \qquad B_s = \frac{q_1 - q_2}{cp_2 - cv_2}, \\ C_s = \frac{cp_2 - cp_1}{cp_2 - cv_2}, \qquad D_s = \frac{cp_1 - cv_1}{cp_2 - cv_2}. \end{cases} \tag{1.19}$$

Nous avons présenté les modèles que nous utiliserons par la suite. Afin de résoudre ceux-ci il est nécessaire d'avoir recours à des méthodes de résolution numérique qui seront présentées par la suite.

Chapitre 2

Résolution par la méthode des volumes finis

2.1 Méthode de type Godunov

2.1.1 Solution d'un problème de Riemann

Dans un premier temps, nous allons présenter succinctement la méthode de propagation des ondes telle que nous l'avons utilisée. Celle-ci est une variante des méthodes de type Godunov, très utilisées pour résoudre numériquement des équations hyperboliques. Cette classe de méthodes se base sur la résolution des problèmes de Riemann permettant un très bon traitement des ondes acoustiques non-linéaires comme les chocs et les détentes. Ainsi en premier lieu, nous allons présenter rapidement les notions de base d'un problème de Riemann.

On introduit le vecteur des variables $\overrightarrow{q(\overrightarrow{x},t)}$ variant dans l'espace $\overrightarrow{x}$ et selon le temps t et on appelle $F(\overrightarrow{q(\overrightarrow{x},t)})$ les flux correspondants (par la suite on remplace $\overrightarrow{x}$ par x pour plus de visibilité).

On considère le système hyperbolique (2.1) caractérisé par n valeurs propres ordonnées telles que $\lambda_1 < \lambda_2 < ... < \lambda_n$:

$$\frac{\partial \overrightarrow{q(x,t)}}{\partial t} + \frac{\partial F(\overrightarrow{q(x,t)})}{\partial x} = 0, \qquad \overrightarrow{q} = q_1, q_2, ..., q_n. \tag{2.1}$$

La condition initiale est donnée par (2.2) :

$$\overrightarrow{q}(x, t=0) = \begin{cases} \overrightarrow{q_l} & \text{si x<0} \\ \overrightarrow{q_r} & \text{si x>0} \end{cases}. \tag{2.2}$$

Au temps initial le problème présente une solution discontinue (voir le système initial (2.2) et figure (2.1)). Cette catégorie de problème est appelée problème de Riemann.

Dans le cas d'un flux linéaire, les valeurs initiales sont alors transportées le long des courbes caractéristiques linéaires $\lambda_i = \frac{x}{t}$. La solution consiste alors en une suite d'états constants $q^{*1}, ..., q^{*n-1}$ délimités par les caractéristiques des valeurs propres $\lambda_{1,..,n}$. Ceci est représenté par la figure 2.2, le problème est alors de chercher les valeurs $q^{*1}, ..., q^{*n-1}$ délimitées par les ondes acoustiques associées à chaque valeur propre.

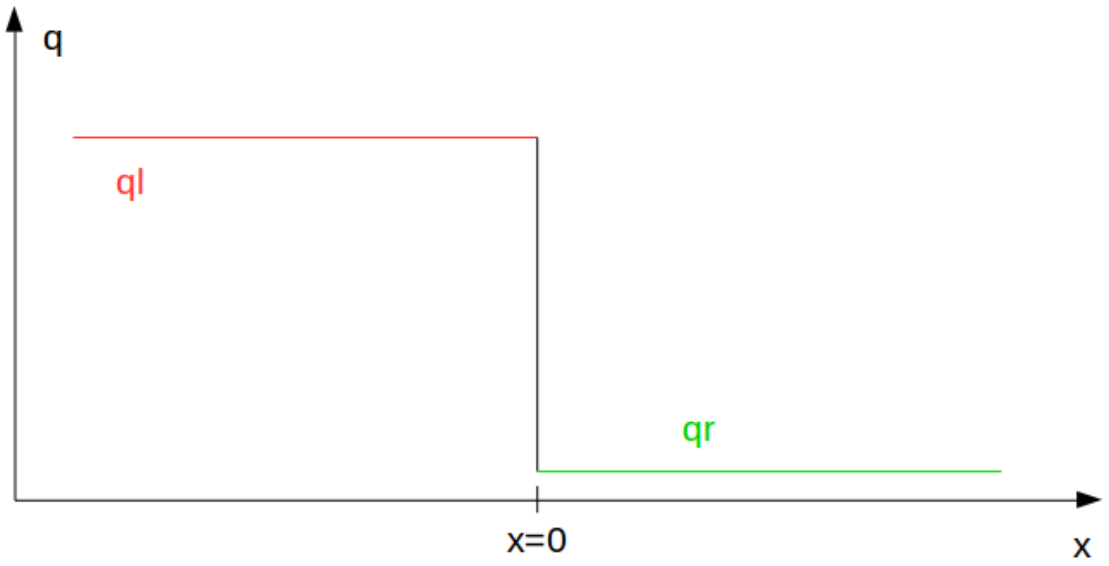


FIGURE 2.1 – Condition initiale d'un problème de Riemann (à t=0 une discontinuité de contact sépare deux états constants q_l (”left”) et q_r (”right”))

Dans notre cas, nous utilisons des systèmes hyperboliques non-linéaires. Par conséquent les vitesses caractéristiques ne sont pas constantes et les courbes caractéristiques ne sont alors plus linéaires d'où l'apparition d'ondes caractéristiques plus complexes. Ainsi quand le temps ”t” augmente si elles se croisent on a alors un choc, si elle divergent comme dans un éventail on a une détente et une discontinuité de contact désigne alors le cas où les courbes caractéristiques sont parallèles (se référer à [23] pour plus de détails). Pour des temps plus long, des interactions plus complexes peuvent se former quand ces ondes se croisent néanmoins pour des pas de temps suffisamment petits on peut ne pas prendre en compte ses nouvelles interactions et on peut en outre considérer les vitesses caractéristiques des valeurs propres constantes. Généralement on considère des pas de temps suffisamment petits afin d'appliquer ces hypothèses.

2.1.2 Formulation d'une méthode de type Godunov : discrétisation intégrale

La méthode de Godunov à l'origine développée par Godunov [24] est une méthode numérique ayant révolutionnée le traitement numérique des problèmes hyperboliques par sa propriété à capturer de manière précise les ondes acoustiques. Celle-ci se base sur la méthode des volumes finis, et utilise un stencil spatial de trois points ainsi qu'un schéma d'Euler progressif pour exprimer et traiter l'évolution temporelle des lois de conservation. Par conséquent la méthode de Godunov converge à l'ordre 1, mais est explicite. Nous verrons plus tard comment étendre la méthode à un ordre plus élevé. Dans un premier temps, nous allons formuler la formulation intégrale utilisée par cette méthode.

Pour un problème en une dimension, celle-ci est présentée par la figure 2.3. En considérant un domaine de taille [0,L] évoluant au cours du temps [0,T], le domaine est discrétisé en mailles de taille $dx_i = [x_i, x_{i+1}]$ telles que $\sum_i dx_i = L$. En considérant les sous-pas de temps $dt_n = [t_n, t_{n+1}]$, on cherche alors à partir de la solution $\overrightarrow{q}^n$ pour trouver les solutions $\overrightarrow{q}^{n+1}$ pour tous les sous-pas de temps et les mailles spatiales.

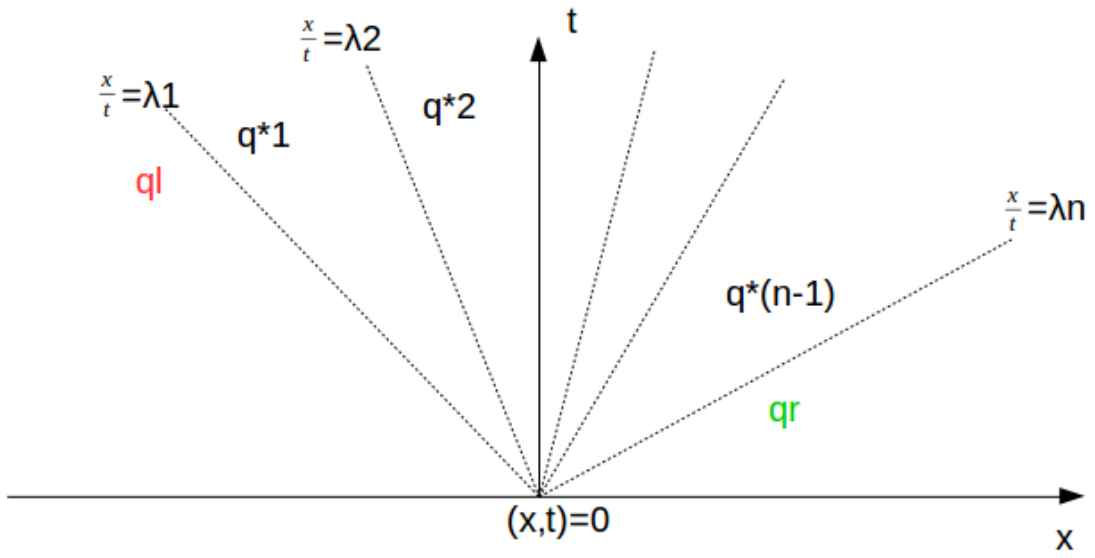


FIGURE 2.2 – Solution caractéristique d'un problème de Riemann d'un système d'équations linéaires (la solution consiste en une suite d'états constants séparés par les vitesses caractéristiques associées aux valeurs propres)

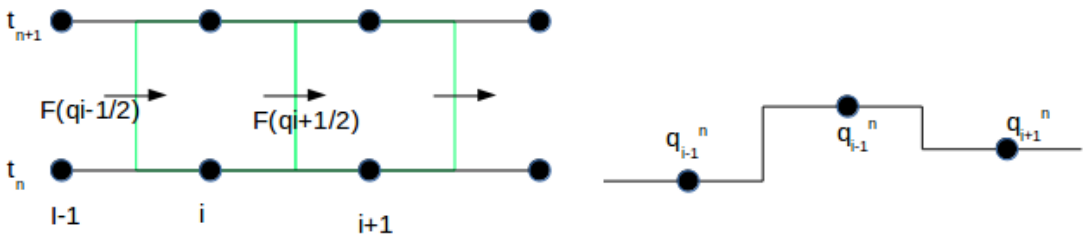


FIGURE 2.3 – Discrétisation de type volumes finis

En partant de l'équation (2.1), on considère les volumes de contrôle virtuels $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]x[t_n, t_{n+1}]$. On intègre alors l'équation sur le volume de contrôle, où le résultat est donné par l'équation (2.3) :

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \overrightarrow{q}(x,t_{n+1})dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \overrightarrow{q}(x,t_n)dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(\overrightarrow{q}(x_{i-\frac{1}{2}},t))dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} F(\overrightarrow{q}(x_{i+\frac{1}{2}},t))dt. \tag{2.3}$$

Finalement, en définissant les valeurs moyennes (2.4) :

$$\begin{aligned} \overrightarrow{q}_i^{n+1} &= \frac{1}{dx}\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \overrightarrow{q}(x,t_{n+1})dx; \overrightarrow{q}_i^{n} = \frac{1}{dx}\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \overrightarrow{q}(x,t_n)dx, \\ F_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{dt}\int_{t_n}^{t_{n+1}} F(\overrightarrow{q}(x_{i+\frac{1}{2}},t))dt; F_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{dt}\int_{t_n}^{t_{n+1}} F(\overrightarrow{q}(x_{i-\frac{1}{2}},t))dt. \end{aligned} \tag{2.4}$$

L'équation se réécrit sous la forme (2.5) :

$$\overrightarrow{q}_i^{n+1} = \overrightarrow{q}_i^{n} - \frac{dt}{dx}(F_{i+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}). \tag{2.5}$$

Comme le montre cette équation, la méthode consiste à attribuer une valeur moyenne spatiale à la cellule de contrôle $[x_i, x_{i+1}]$. Cette valeur est alors perturbée par les flux entrants et

sortants du volume de contrôle au cours du pas de temps $dt_n = [t_n, t_{tn+1}]$. On en déduit alors la valeur moyenne de la cellule au temps suivant. L'objectif est alors de trouver l'approximation du flux permettant de simuler de la manière la plus précise ces perturbations.

2.1.3 Formulation d'une méthode de type Godunov : évaluation des flux

Dans l'équation d'évolution des valeurs du domaine que nous avons présentée au paragraphe précédant, il est nécessaire de déterminer les valeurs des flux $F_{i+\frac{1}{2}}$ et $F_{i-\frac{1}{2}}$. L'originalité des méthodes de Godunov vient de profiter que les valeurs entre deux volumes de contrôle se présentent comme un problème de Riemann. L'objectif est de résoudre le problème de Riemann ainsi formé pour chaque couple de cellules adjacentes à chaque pas de temps. Ainsi l'évolution du flux en espace et en temps est alors connue.

Puisque les valeurs du flux sont constantes le long des courbes caractéristiques et que nous considérons les courbes caractéristiques linéaires les flux $F(\overrightarrow{q}(x_{i+\frac{1}{2}}, t))$ et $F(\overrightarrow{q}(x_{i-\frac{1}{2}}, t))$ de l'équation (2.4) sont alors constants selon les courbes $\frac{x_{i+\frac{1}{2}}}{t} = 0$ et $\frac{x_{i-\frac{1}{2}}}{t} = 0$.

On a donc : $F_{i+\frac{1}{2}} = F(\overrightarrow{q}(x_{i+\frac{1}{2}}, t))$ et $F_{i-\frac{1}{2}} = F(\overrightarrow{q}(x_{i-\frac{1}{2}}, t))$.

Ces méthodes de type Godunov correspondent entre autres à une généralisation des méthodes upwind pour une équation hyperbolique linéaire. La figure 2.4 reprend cet exemple pour illustration. Ainsi avec ces méthodes on se sert de l'information sur les cellules voisines au temps t_n pour estimer au mieux la solution au temps t_{n+1}.

On peut rajouter que comme précisé antérieurement, cette méthode est explicite et utilise une approximation d'ordre 1, le pas de temps est par conséquent régi par une condition CFL :

$$CFL \leq 1 \leq max_i(|\lambda_i|)\frac{dt_i}{dx_i}. \tag{2.6}$$

La difficulté est alors dans le cas d'un système non-linéaire de trouver la solution d'un problème de Riemann le plus précisément possible. Pour l'instant nous allons présenter une variante des méthodes de type Godunov appelée méthode à propagation des ondes qui a été developpée par LeVeque [23].

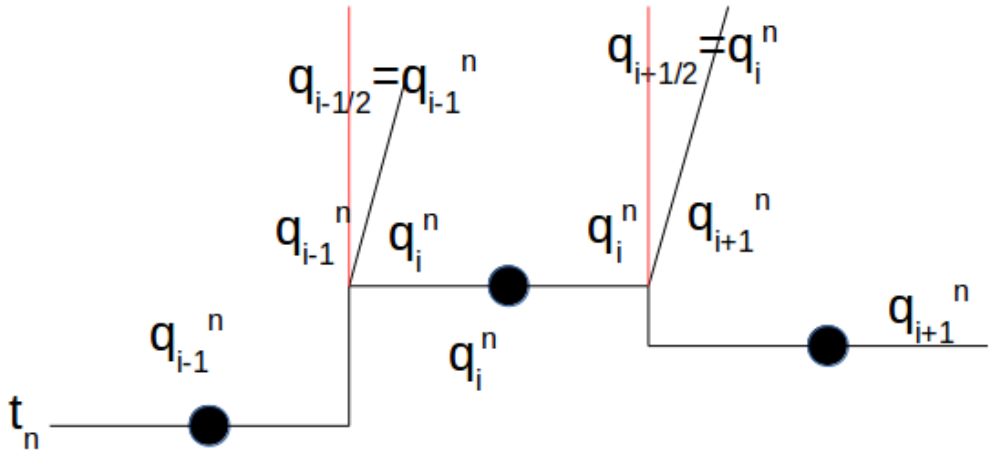


FIGURE 2.4 – Méthode de Godunov pour une équation linéaire scalaire (on cherche à déterminer la valeur $q_{i-\frac{1}{2}}$ le long de la caractéristique rouge de pente $\frac{x_{i-\frac{1}{2}}}{t} = 0$. La caractéristique noire ayant pour pente la vitesse d'advection du problème délimite la solution en deux valeurs, à gauche $q_{i-\frac{1}{2}} = q^n_{i-1}$ et à droite $q_{i-\frac{1}{2}} = q^n_i$. La solution montre que la valeur le long de la caractéristique rouge est constante au cours du temps et vaut q^n_{i-1})

2.2 Schéma à propagation des ondes

2.2.1 Formulation au premier ordre

Dans la partie précédente, nous avons présenté la méthode de Godunov dans sa version originelle. En ce qui concerne ce travail, nous avons utilisé une reformulation de cette méthode appelée méthode à propagation des ondes (voir [89],[23]). Celle-ci réécrit le schéma de Godunov non pas en un schéma dont les variables évoluent avec les variations des flux dans la cellule mais selon les ondes entrantes dans la cellule.

On se place dans une cellule à l'interface $x_{i+\frac{1}{2}}$ séparant les volumes de contrôle i et i+1 ayant pour valeurs respectives q^n_i et q^n_{i+1} au temps t_n. Par la suite nous omettons l'exposant n.

La structure du problème peut alors être représentée ou approchée par un ensemble d'ondes W^l se propageant aux vitesses s^l. Les ondes W^l représentent la variation du vecteur de variable $\overrightarrow{q}$ entre les ondes de la structure propre du problème de Riemann. Les vitesses s^l quant à elles sont les vitesses de propagation des ondes W^l et sont données par la l-ième valeur propre ordonnées par valeur croissante $s^l = \lambda_l$. Finalement on introduit M le nombre d'ondes utilisées pour résoudre le problème de Riemann, comme suit :

Les ondes W^l et s^l doivent alors être déterminées de manière à respecter deux conditions.

— La somme des ondes W^l doit être égale aux sauts entre les états q_i et q_{i+1} délimitant le problème de Riemann. Soit :

$$\Delta\overrightarrow{q} = \overrightarrow{q}_{i+1} - \overrightarrow{q}_i = \sum_{l=1}^{M} W^l_{i+\frac{1}{2}}. \tag{2.7}$$

— Les équations de Rankine Hugoniot doivent être respectées entre les états q_i et q_{i+1}, c'est à dire que la somme des ondes W^l associées à leurs vitesses de propagation s^l doit

être égale à la variation des flux $F(\overrightarrow{q}_{i+1})$ et $F(\overrightarrow{q}_i)$. Soit :

$$\Delta F(\overrightarrow{q}) = F(\overrightarrow{q}_{i+1}) - F(\overrightarrow{q}_i) = \sum_{l=1}^{M} (s^l_{i+\frac{1}{2}}) W^l_{i+\frac{1}{2}}. \tag{2.8}$$

On définit alors les termes $A^{\pm}\Delta\overrightarrow{q}_{i+\frac{1}{2}}$ comme défini dans [17] et [23] qui représentent les fluctuations entrantes à droite et à gauche du problème de Riemann à l'interface $x_{i+\frac{1}{2}}$ et sont définies par l'expression (2.9) :

$$\begin{aligned} A^{\pm}\Delta\overrightarrow{q}_{i+\frac{1}{2}} &= \sum_{l=1}^{M} (s^l_{i+\frac{1}{2}})^{\pm} W^l_{i+\frac{1}{2}}, \\ (s^l_{i+\frac{1}{2}})^+ = max(s^l_{i+\frac{1}{2}}, 0), &\qquad (s^l_{i+\frac{1}{2}})^- = min(s^l_{i+\frac{1}{2}}, 0). \end{aligned} \tag{2.9}$$

L'équation (2.4) peut alors se réécrire sous la forme à propagation des ondes donnée par la relation (2.10) reliant l'évolution du vecteur de variable $\overrightarrow{q}$ aux fluctuations :

$$\overrightarrow{q}^{n+1}_i = \overrightarrow{q}^n_i - \frac{dt}{dx}(A^+\Delta\overrightarrow{q}_{i-\frac{1}{2}} + A^-\Delta\overrightarrow{q}_{i+\frac{1}{2}}). \tag{2.10}$$

Finalement, en remplaçant l'expression des fluctuations et en utilisant l'expression (2.9), on obtient la relation (2.11) :

$$\begin{aligned} \overrightarrow{q}^{n+1}_i &= \overrightarrow{q}^n_i - \frac{dt}{dx}(\sum_{p=1}^{m} (\lambda^p)^+ W^p_{i-\frac{1}{2}} + \sum_{p=1}^{m} (\lambda^p)^- W^p_{i+\frac{1}{2}}), \\ \lambda^+ = max(\lambda, 0), &\qquad \lambda^- = min(\lambda, 0). \end{aligned} \tag{2.11}$$

On voit alors que cette relation met en évidence l'évolution des variables du système par les ondes entrantes à droite et à gauche du volume de contrôle, les ondes sortantes n'affectent en rien l'évolution du système.

Comme déjà explicité la méthode de Godunov est une méthode numérique à l'ordre 1. Nous allons maintenant illustrer l'extension du schéma à l'ordre 2.

2.2.2 Formulation au second ordre

Il existe de nombreuses expressions permettant d'obtenir une méthode d'ordre 2, comme le schéma de Lax-Wendroff ou la méthode Beam-Warming. On peut cependant noter que ces méthodes conduisent à des schémas non-monotones présentant des oscillations les empêchant de bien capturer les chocs. Dans notre cas nous utilisons des limiteurs permettant de contrôler le schéma à utiliser selon la continuité de la solution.

Comme connu depuis le théorème de Godunov, il n'est pas possible d'obtenir un schéma à la fois d'ordre élevé et monotone. En outre, les méthodes d'ordre élévé sont définies à partir de développement de Taylor et ne sont donc correctes que pour les solutions continues. Le principe des limiteurs est ainsi de construire un schéma appliquant une méthode d'ordre élevé non-monotone lorsque la solution est continue, alors qu'en présence de discontinuités et de chocs le schéma prend la forme d'une méthode monotone empêchant la formation d'oscillations autour des chocs.

Cela se traduit par l'expression (2.12) :

$$\overrightarrow{q}_i^{n+1} = \overrightarrow{q}_i^n - \frac{dt}{dx}(A^+\Delta U_{i-\frac{1}{2}} + A^-\Delta U_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{dt}{dx}(\mathscr{F}_{i-\frac{1}{2}} - \mathscr{F}_{i+\frac{1}{2}}). \tag{2.12}$$

Le second ordre est alors atteint en ajoutant les termes $\mathscr{F}_{i\pm\frac{1}{2}}$ appelés flux de corrections permettant au schéma d'obtenir une convergence au second ordre pour une solution continue et sont définis selon l'équation (2.13) :

$$\mathscr{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\sum_{l=1}^{M} |s^l_{i+\frac{1}{2}}|(1 - \frac{dt}{dx}|s_{i+\frac{1}{2}}|)\overline{W}^l_{i+\frac{1}{2}}. \tag{2.13}$$

Avec $\overline{W}^l_{i+\frac{1}{2}}$ la version limitée de $W^l_{i+\frac{1}{2}}$ définie par la fonction de limitation $\phi(\Theta)$:

$$\overline{W}^l_{i+\frac{1}{2}} = \phi(\theta_s)^l_{i+\frac{1}{2}} W^l_{i+\frac{1}{2}}. \tag{2.14}$$

Nous allons procéder à un rappel rapide des limiteurs dans la prochaine section.

2.2.3 Limiteur dans la méthode des volumes finis

Comme nous l'avons précisé, afin d'avoir une méthode monotone et d'ordre élevé avec la méthode de propagation des ondes, nous utilisons des limiteurs. Ces méthodes viennent du travail précurseur de Van-Leer [90] et consistent à construire une méthode TVD (total variation diminishing) quel que soit la solution à modéliser. C'est à dire que les variations spatiales des variables conservées diminuent à chaque pas de temps, ce qui empêche la formation d'oscillations parasites.

On introduit l'indicateur de continuité θ_s défini par l'égalité :

$$\theta^l_{s,i+\frac{1}{2}} = \frac{W^l_{I+\frac{1}{2}}.W^l_{i+\frac{1}{2}}}{W^l_{i+\frac{1}{2}}.W^l_{i+\frac{1}{2}}}, \tag{2.15}$$

avec $I = i-1$ si $s^l_{i+\frac{1}{2}} > 0$ et $I = i+1$ si $s^l_{i+\frac{1}{2}} < 0$.

On se sert alors du théorème d'Harten (voir [91]) permettant de déterminer si un schéma est TVD. On peut alors construire le domaine de Sweby pour lequel un schéma numérique est TVD en fonction de l'indicateur de continuité θ_s, le but est alors de construire une méthode d'ordre élevé toujours comprise dans ce domaine.

Remarque : L'indicateur de continuité θ_s mesure la continuité de la solution afin que la méthode utilise plus de diffusion pour capturer les discontinuités mais utilise moins de diffusion pour un meilleur ordre de convergence pour une solution continue.

On peut alors définir le limiteur minmod que nous avons utilisé dans ce travail :

$$\phi(\theta_s) = max(0, min(1, \theta_s)). \tag{2.16}$$

On peut en outre rajouter que la détermination de l'indicateur de continuité fait que la méthode utilise un stencil utilisant 5 cellules spatiales.

Finalement, pour conclure cette présentation des méthodes à propagation des ondes que nous avons utilisées, nous allons présenter des conditions aux limites telles que celles-ci sont programmées dans le logiciel Clawpack [71].

2.3 Traitement des conditions aux limites

2.3.1 Méthodes des cellules fantômes

Il existe de nombreuses techniques pour implémenter des conditions aux limites dans la méthode des volumes finis. Dans notre cas nous utilisons une approche courante, la méthode des cellules fantômes. Comme le présente la figure 2.5, cette méthode consiste à ajouter des cellules virtuelles aux bouts du domaine de calcul. L'objectif est alors que les frontières $x_{\frac{1}{2}}$ et $x_{N+\frac{1}{2}}$ aient les valeurs désirées. Il s'agit d'imposer les valeurs des cellules fantômes de façon à satisfaire cette demande. Deux cellules fantômes sont nécessaires avec la méthode de propagation des ondes que nous avons présentée puisque nous utilisons un stencil de cinq cellules. Dans la prochaine section, on utilise les notations de la figure 3.25 pour présenter l'implémentation des conditions aux limites, q_1 et q_2 sont les valeurs des cellules x_1 et x_2 à la limite du domaine et q_{-1} et q_0 sont les valeurs des cellules fantômes x_{-1} et x_0.

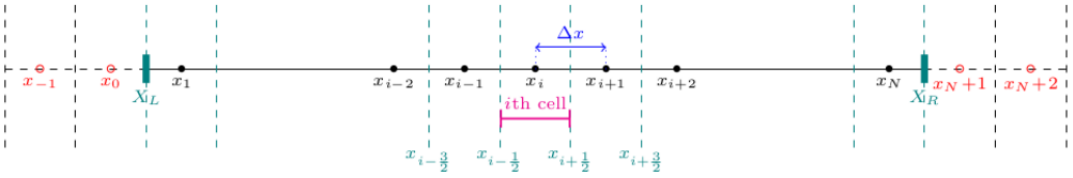


FIGURE 2.5 – Implémentation des conditions aux limites en utilisant la méthode des cellules fantômes (le domaine comprend toutes les cellules de x_1 à x_N, on ajoute deux cellules fictives, x_{-1} et x_0 à gauche et x_{N+1} et x_{N+2} à droite, à chaque limite du domaine)

2.3.2 Condition de sortie

Dans le cas de la sortie d'un écoulement ou de la continuité invariante d'un écoulement, on impose une condition de sortie se définissant par une invariance des variables dans les cellules fantômes. Les valeurs des cellules fantômes peuvent alors être facilement déterminer (2.17) :

$$\begin{aligned} \overrightarrow{q_0} &= \overrightarrow{q_1}, \\ \overrightarrow{q_{-1}} &= \overrightarrow{q_1}. \end{aligned} \tag{2.17}$$

2.3.3 Mur impénétrable

Pour simuler un mur impénétrable, pour un fluide non-visqueux, cela se caractérise par une vitesse normale nulle à la frontière. En revanche la pression doit garder la même valeur, ainsi les autres variables sont calculées en imposant une dérivée nulle aux bords du domaine. Les valeurs à imposer aux cellules fantômes sont alors données par l'équation (2.18) :

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \overrightarrow{q \setminus (\overrightarrow{u})}}{\partial x} = 0 = \frac{\overrightarrow{q_1 \setminus (\overrightarrow{u})} - \overrightarrow{q_0 \setminus (\overrightarrow{u})}}{dx}, \\
q_0 \setminus (\overrightarrow{u}) = q_1 \setminus (\overrightarrow{u}), \\
q_{-1} \setminus (\overrightarrow{u}) = q_2 \setminus (\overrightarrow{u}), \\
\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n} = 0 = \frac{\overrightarrow{u}_1.\overrightarrow{n} + \overrightarrow{u}_0.\overrightarrow{n}}{2}, \\
\overrightarrow{u}_1.\overrightarrow{n} = -\overrightarrow{u}_0.\overrightarrow{n}, \\
\overrightarrow{u}_2.\overrightarrow{n} = -\overrightarrow{u}_{-1}.\overrightarrow{n}.
\end{aligned}
\tag{2.18}
$$

Chapitre 3

Méthode aux résidus distribués

3.1 Méthode stationnaire

3.1.1 Discrétisation et résidu total

L'approche originale de ce travail est d'étendre la classe des méthodes aux résidus distribués pour traiter les modèles diphasiques à interfaces diffuses. Nous allons donc présenter le principe de ces méthodes. Une revue récente de l'état actuel de ces méthodes numériques peut être trouvée dans [43]. Dans notre cas nous présentons uniquement la construction de méthodes d'ordre 2. En premier lieu, nous allons voir comment ces méthodes ont été utilisées pour traiter efficacement les problèmes stationnaires, il s'agit alors de trouver l'état stationnaire du problème.

Pour commencer, nous discrétisons le domaine, notons que la méthode se place dans le même cadre de travail que pour les méthodes de types éléments finis. On considère le maillage spatial Ω_h (voir figure 3.1), le domaine est décomposé en éléments K tels que $\cup_i K_i = \Omega_h$ et $K_i \cap K_{j\neq i} = 0$. On introduit alors les polynômes par morceaux de degré 1 φ_i tels que :

$$\varphi_i(\overrightarrow{x}) = \begin{cases} 1 \text{ si } \overrightarrow{x} = \overrightarrow{x}_i \\ 0 \text{ si } \overrightarrow{x} = \overrightarrow{x}_{j\neq 1} \end{cases} . \tag{3.1}$$

On recherche alors une solution dans l'espace V_h telle que :

$$V_h = \{q \in L^2(\Omega_h) \cap C^0(\Omega_h), \overrightarrow{q}_{|K} \in \mathscr{P}_1, \forall K \in \Omega_h\}. \tag{3.2}$$

Au temps t_n la solution approchée $\overrightarrow{q}_i^n$ du problème s'écrit alors :

$$\overrightarrow{q}^n = \sum_{i,\Omega_h} \overrightarrow{q}_i^n \varphi_i. \tag{3.3}$$

La méthode aux résidus distribués a pour origine les travaux de Roe [37] visant à utiliser le maximum d'informations du problème discrétisé afin de concevoir des méthodes upwind multidirectionnelles, monotones, d'ordre élévé et à support compact. En considérant l'équation hyperbolique (2.1), soumise à la discrétisation spatiale (3.1), on peut définir le résidu intégral pour chaque élément K par $\Phi^k = \int_K \nabla F(\overrightarrow{q})$ (voir figure 3.2). L'idée est alors de considérer le résidu comme une instabilité se propageant comme un signal pour remettre le système à

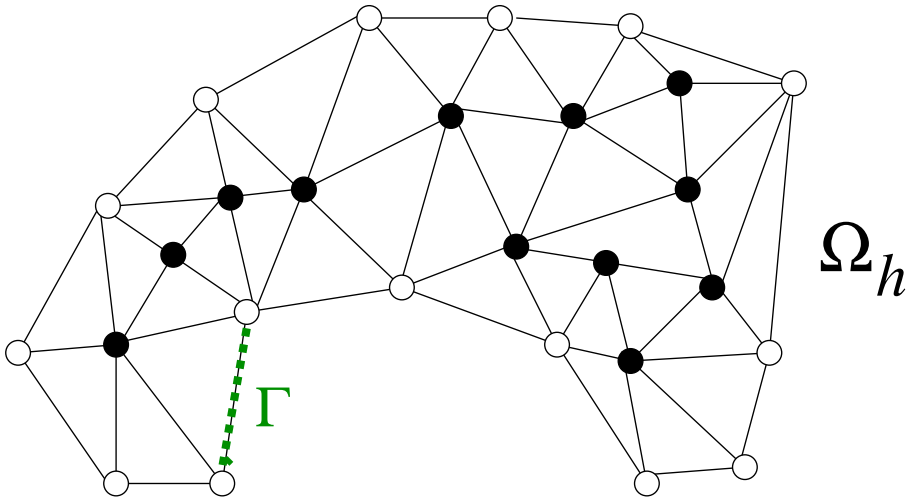


FIGURE 3.1 – Domaine discrétisé pour les méthodes aux résidus distribués [83]

l'équilibre (voir figure 3.3). On traite ainsi le problème comme un cas instationnaire convergeant vers un état stationnaire. Nous allons voir cela plus en détail dans la prochaine section.

3.1.2 Principe de la méthode

Le point de départ des méthodes aux résidus distribués est de déterminer le résidu total de chacune des cellules. Celui-ci est donné par la relation suivante :

$$\Phi_k = \int_K F(\overrightarrow{q}).\overrightarrow{n}\, d\partial K. \tag{3.4}$$

La deuxième étape est alors comme l'indique le nom de la méthode de distribuer le résidu total à chacun des nœuds de l'élément K. Pour des raisons de conservation la somme des résidus distribués Φ_i^K doit valoir le résidu total, soit :

$$\sum_{i\in K} \Phi_i^K = \Phi^K. \tag{3.5}$$

La définition de la méthode passe alors par la détermination des valeurs Φ_i^K.

Quelques exemples de schémas bien connus sont le schéma N de Roe [38] ou encore le schéma LDA [92] et le schéma de Lax-Friedrichs [44]. De manière générale tous les schémas de type volume fini peuvent être réécrits sous la forme d'une méthode aux résidus distribués.

Afin de déterminer la solution au temps t_{n+1}, on intègre la loi de conservation sur tout le domaine et en la multipliant par les fonctions de bases φ_i on obtient :

$$\int_{\Omega_h} \varphi_i \left(\frac{\partial \overrightarrow{q(x,t)}}{\partial t} + \frac{\partial F(\overrightarrow{q(x,t)})}{\partial x}\right) d\Omega_h = 0. \tag{3.6}$$

En approximant l'intégrale et en introduisant le volume de contrôle C_I (la figure 3.4 montre le volume de contrôle C_I pour des polynômes de degré 1) cela se réécrit sous la forme :

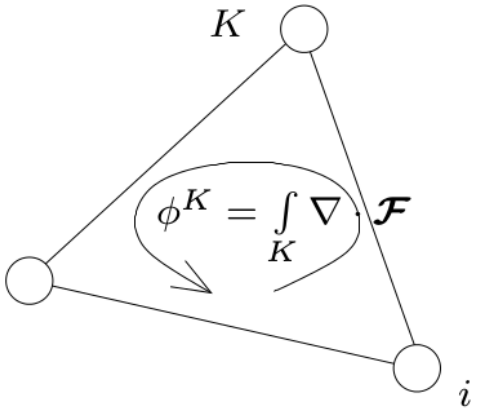


FIGURE 3.2 – Définition du résidu intégral pour une cellule K [56], [83]

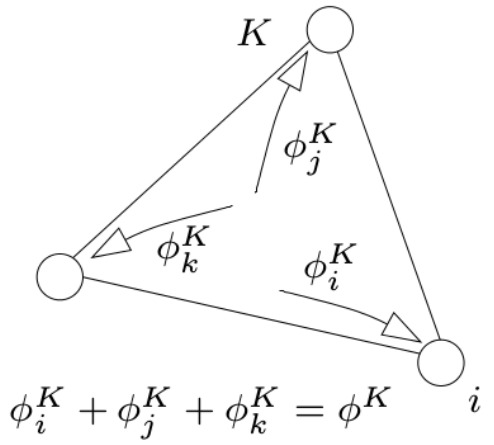


FIGURE 3.3 – Distribution des résidus [56], [83] (une fois le résidu de la cellule K calculé, celui-ci est distribué à chaque nœud de la cellule pour faire évoluer les variables vers l'état stationnaire)

$$|C_I|\frac{\partial \overrightarrow{q(x,t)}}{\partial t} + \sum_{K|i\in K} \Phi_i^K = 0, \qquad |C_I| = \int_{\Omega_h} \varphi_i d\Omega_h. \tag{3.7}$$

Puis en utilisant la méthode d'Euler progressif pour approximer l'expression en temps on obtient l'expression :

$$\overrightarrow{q}_i^{n+1} = \overrightarrow{q}_i^n - \sum_{K|i\in K} \frac{dt}{|C_I|}\Phi_i^K. \tag{3.8}$$

Le calcul continue alors jusqu'à ce que la valeur $max_i(\frac{q_i^{n+1}-q_i^n}{dt})$ soit inférieure à une certaine tolérance, on considère alors que l'on a atteint l'état stationnaire. (La figure 3.5 présente la distribution des résidus dans le volume de contrôle). Cela équivaut à avoir :

$$\sum_{K|i\in K} \frac{dt}{|C_I|}\Phi_i^K = 0. \tag{3.9}$$

Les signaux reçus ne font alors plus évoluer les variables et le domaine a alors atteint sa valeur d'équilibre.

En outre on peut ajouter que les méthodes aux résidus distribués combinent les méthodes des éléments finis et des volumes finis. Les résidus sont calculés en se basant sur la méthodologie des éléments finis et sont ensuite distribués dans des volumes de contrôle comme pour la méthode des volumes finis.

3.1.3 Schémas monotones et d'ordre élevé

De la même manière que pour les méthodes à propagation des ondes, en raison du théorème de Godunov, les schémas linéaires des méthodes aux résidus distribués ne peuvent

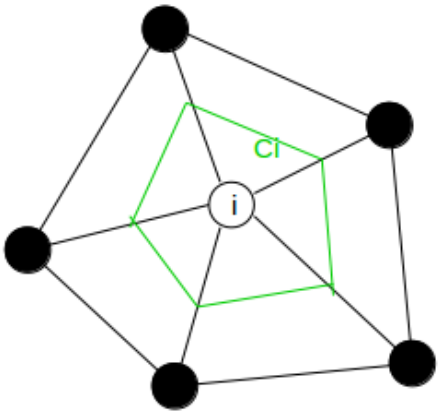


FIGURE 3.4 – Cellule de contrôle des méthodes aux résidus distribués (dans le cas de fonction de base de degré 1, celle-ci s'obtient en reliant les centres de chacune des cellules adjacentes)

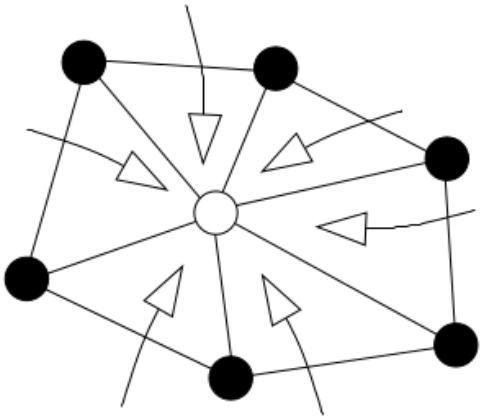


FIGURE 3.5 – Evolution des variables par redistribution des signaux [56], [83] (le nœud i reçoit un résidu local provenant de chacune des cellules adjacentes produisant les valeurs au temps suivant)

pas être d'ordre élevé. Ainsi le schéma LDA est d'ordre élevé mais pas monotone alors que les schémas N et de Lax-Friedrichs sont monotones mais d'ordre 1.

Nous rappelons rapidement, la mise en valeur de la notion de préservation de linéarité et de monotonicité pour les méthodes aux résidus distribués dans le cas scalaire.

On peut réécrire l'expression (3.8) sous la forme :

$$|C_i|\frac{\partial \overrightarrow{q_i}}{\partial t} + \sum_{K|j\in K, j\neq 1} c_{ij}(\overrightarrow{q_i} - \overrightarrow{q_j}) = 0. \tag{3.10}$$

Si le terme c_{ij} est toujours positif alors le schéma est monotone à condition de respecter la condition (3.11) sur le pas de temps dt comme suit :

$$dt \leq \frac{|C_i|}{\sum_{K|j\in K, j\neq 1} c_{ij}}, \forall i \in \Omega_h. \tag{3.11}$$

D'autre part, la notion de préservation de linéarité est importante, car celle-ci désigne la propriété d'une méthode à être d'ordre élevé. En utilisant comme fonction de base un polynôme d'ordre 1, alors la méthode converge à l'ordre 2. Dans le cadre des méthodes aux résidus distribués cela se traduit par des coefficients β_i :

$$\beta_i^K = \frac{\Phi_i^K}{\Phi^K}, \tag{3.12}$$

définis quelle que soit la solution. La condition de préservation de la linéarité est alors :

$$max_{K\in\Omega_h} max_{i\in K}(\beta_i^K) < \infty \tag{3.13}$$

Pour construire des schémas aux résidus distribués d'ordre élevé et monotones, il existe deux méthodes. La première consiste à combiner une méthode d'ordre élevé ainsi qu'une méthode monotone, on obtient alors le schéma combiné donné par l'équation suivante :

$$\Phi_i^{K,*} = (1-\theta_s)\Phi_i^{K,HO} + \theta_s \Phi_i^{K,m}. \tag{3.14}$$

On définit en outre le senseur de choc θ_s permettant à la méthode d'être monotone pour les chocs et d'ordre élevé pour une solution continue, des expressions de ce paramètre peuvent être trouvées dans [93] et [41].

La deuxième méthode consiste à partir d'un schéma monotone. Il s'agit alors de projeter les résidus dans un espace satisfaisant les conditions de positivité et de préservation de linéarité. Le nouveau résidu obtenu avec cette procédure est alors donné par l'expression :

$$\begin{aligned} \beta_i^{K,*} &= \frac{max(0, \frac{\Phi_i^{K,m}}{\Phi^K})}{\sum_{j\in K} max(0, \frac{\Phi_j^{K,m}}{\Phi^K})}, \\ \Phi_i^{K,*} &= \beta_i^{K,*}\Phi^K. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Cette procédure a notamment été utilisée dans [94] avec le schéma N pour construire le schéma PSI et peut être retrouvée dans [44] (une explication géométrique y est aussi présentée).

3.2 Méthode instationnaire

3.2.1 Principe en instationnaire

Maintenant que nous avons présenté l'application des méthodes stationnaires en utilisant les méthodes aux résidus distribués nous allons présenter comment celles-ci sont étendues aux problèmes instationnaires.

En premier lieu, revenons sur la définition du résidu, pour une équation hyperbolique instationnaire (2.1). On définit, pour un élément K et au temps n, le résidu Φ^k et la fluctuation ϕ^k par les expressions (nous précisons pour qu'il n'y ait pas de confusion que dans le cas stationnaire la dérivée temporelle étant nulle on considère le résidu égal à la fluctuation) :

$$\Phi_k = \int_K r^K = \int_K \Big(\frac{\partial \overrightarrow{q}}{\partial t} + \nabla . F(q) \Big) dK, \tag{3.16}$$

$$\phi_k = \int_K F(\overrightarrow{q}) . \overrightarrow{n} d\partial K. \tag{3.17}$$

L'idée est alors comme introduit par Roe [37] de considérer le résidu comme un signal faisant évoluer les variables du temps t_n au temps t_{n+1}. Il s'agit alors de le calculer puis de le redistribuer. Le processus peut être visualisé sur la figure 3.6, une différence majeure à regarder est que maintenant le résidu total est calculé et redistribué dans des cellules spatio-temporelles. On ne redistribue donc plus au nœud i mais à la cellule C_i et on détermine les variables au temps t_{n+1} permettant de respecter l'équation de conservation. Afin d'effectuer ces opérations il existe de nombreuses méthodes mais il y a cependant quelques règles à respecter :

- la somme des résidus en temps et en espace doit valoir le résidu total $\sum_{n=t_n}^{t_{n+1}} \sum_{i \in K} \Phi_i^{K,n} = \Phi^K$
- Dans la cellule de contrôle C_i, afin de respecter l'équation de conservation la somme de tous les résidus doit être nulle $\sum_{n=t_n}^{t_{n+1}} \sum_{K|i,K} \Phi_i^{K,n} = 0$
- Les résidus reçus par le nœud au temps t_n doivent se compenser : les valeurs passées ne peuvent pas évoluer

Comme en stationnaire en multipliant par les fonctions de base et intégrant sur tout le domaine on obtient alors la forme semi-discrétisée :

$$\sum_{K, i \in K} \Big(\sum_{j \in K} m_{i,j}^K \frac{d\overrightarrow{q}_j}{dt} + \beta_i^K \phi_i^K \Big) = 0. \tag{3.18}$$

Une méthode naïve pour traiter le problème est alors de reprendre la formulation (3.8) comme pour le cas stationnaire. Malheureusement, pour un problème stationnaire cette méthode est d'ordre 1 quel que soit l'ordre des fonctions de bases. En fait même avec une discrétisation en temps plus élaborée il n'est pas possible d'avoir une méthode explicite et d'ordre élevé. Cela vient notamment du fait que le résidu est dépendant des variables au temps t_{n+1}, les coefficients β_i^K et le résidu doivent donc être calculés en se basant sur ces variables. Cela entraîne des matrices de masse non diagonales et donc un problème implicite. Une formulation au deuxième ordre peut être trouvée dans [51] et une au troisième ordre dans [52]. Une mise au point des différentes méthodologies instationnaires peut être trouvée dans [56] ou [57].

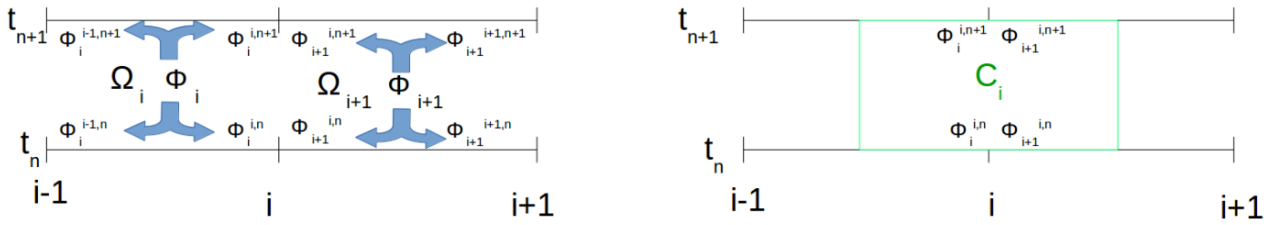


FIGURE 3.6 – Distribution des résidus pour un problème instationnaire (les résidus sont maintenant calculés dans des cellules spatio-temporelles, les résidus locaux sont alors déterminés de manière à vérifier les équations de bilan dans les cellules de contrôle C_I)

Cependant, il est tout de même possible d'obtenir une méthode aux résidus distribués d'ordre élevé. Dans ce travail nous utilisons la formulation d'Abgrall et Ricchiuto [57], nous allons donc présenter rapidement celle-ci dans la prochaine section.

3.2.2 Schéma explicite d'ordre élevé

En effet, il est bien possible de créer des méthodes aux résidus distribués d'ordre élevé et explicites pour les problèmes instationnaires. Comme montré dans [57], il est possible de développer des méthodes semblables aux méthodes de Runge-Kutta pour les méthodes aux résidus distribués. Une généralisation de ce travail à ensuite été développée par Abgrall [58]. En outre, récemment l'application de cette méthode aux équations d'Euler [59] a permis des simulations explicites d'ordre 3 et 4 mais nous n'emploierons pas cette méthode dans ce travail. Dans cette section nous remplaçons le vecteur des variables $\overrightarrow{q}$ par q pour une lecture simplifiée.

L'idée de [57], est d'utiliser une fonction de base $w_i^K = \varphi_i^K + \gamma_i^K$. De cette façon le problème peut alors se réécrire sous la forme :

$$\sum_{K\in K_i} \int_K w_i^K r_K = \sum_{K\in K_i} \int_K \varphi_i^K r_K + \sum_{K\in K_i} \int_K \gamma_i^K r_K = 0. \tag{3.19}$$

Cela conduit en théorie à un schéma implicite. L'idée est alors d'introduire une approximation $\bar{r}_h$ du deuxième terme intégral :

$$\sum_{K\in K_i} \int_K \varphi_i^K r_h + \sum_{K\in K_i} \int_K \gamma_i^K \bar{r}_h = 0. \tag{3.20}$$

Ce terme doit être choisi de manière à ce que le schéma puisse s'écrire de manière explicite sans dégrader la solution. Dans [56] et [57], il est montré que la forme suivante :

$$\bar{r}_K = \frac{d\bar{q}^{n+1}}{dt} + \nabla.F(q), \tag{3.21}$$

satisfait cette hypothèse, cela se traduit par une approximation du terme temporel ne dépendant que des temps déjà connus.

Avec cette hypothèse on peut alors réécrire le schéma sous la forme suivante :

$$\int_K \varphi_i \frac{q_i^{n+1} - q_i^n}{dt} - \int_K \varphi_i d\frac{\bar{q}_i^{n+1}}{dt} = -\sum_{K|i\in K} \int_K w_i^K \bar{r}_h. \tag{3.22}$$

Globalement la forme finale de cette méthode consiste à approximer le résidu avec un ordre faible puis en utilisant le résidu qui en résulte, de corriger et calculer une approximation d'ordre plus élevé. Cette méthode est assez semblable aux méthodes de Runge-Kutta pour les flux.

Cette procédure permet alors d'obtenir le schéma RK2 présenté dans [57]. En introduisant le pas de temps intermédiaire q_i^1 le schéma s'écrit :

$$\begin{cases} q_i^1 = q_i^n - \frac{dt}{|C_i|}\Big(\sum_{K|i\in K}(\frac{q_i^n - q_i^n}{dt} + \phi_i^K(q_i^n))\Big), \\ q_i^{n+1} = q_i^1 - \frac{dt}{|C_i|}\Big(\sum_{K|i\in K}(\frac{q_i^1 - q_i^n}{dt} + \phi_i^K(\frac{q_i^n + q_i^1}{2}))\Big). \end{cases} \tag{3.23}$$

En posant $q_i^n = q_i^0$ et $q_i^{n+1} = q_i^2$, la méthode correspond alors à l'algorithme suivant :

Algorithm 1 Calculate q_i^{n+1}

Require: $q_i^0 = q_i^n, r = 0$
  while $r < 2$ **do**
    $q_i^{r+1} = q_i^r - \frac{dt}{|C_i|}\Big(\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\frac{q_i^n + q_i^r}{2})\Big)$
    $r = r + 1$
  end while
  return $q_i^{n+1} = q_i^2$

Remarque : les fluctuations ϕ_i^K sont calculées de la même manière que dans le cas stationnaire. En outre on peut rajouter que l'algorithme (1) respecte le fait que les résidus totaux font évoluer les quantités du système. La première étape de calcul sert à obtenir une approximation plus précise du résidu. Puis en utilisant cette approximation, on corrige la valeur q_i^1 afin d'obtenir la valeur q_i^2 donnant une approximation plus précise de la quantité q_i^{n+1}.

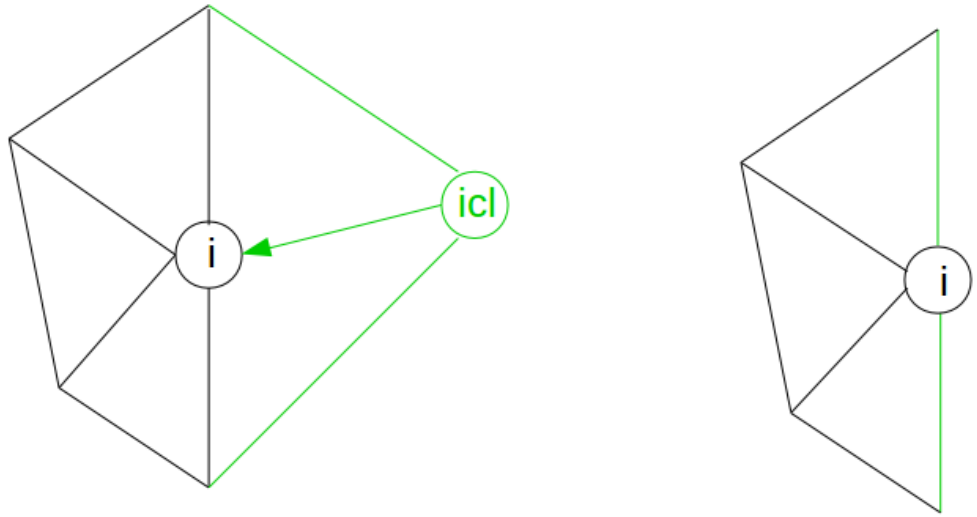


FIGURE 3.7 – Implémentation faible des conditions aux limites (cela est effectué en considérant des cellules infiniment minces, le résidu envoyé au nœud i de ces cellules permet alors d'imposer les conditions aux limites)

3.3 Conditions aux limites

3.3.1 Formulation faible des conditions aux limites

Il nous reste à présenter la manière dont nous avons implémenté les conditions aux limites pour les méthodes aux résidus distribués. Comme illustré dans la figure 3.7, on rajoute un nœud imaginaire *icl* ayant la valeur de la condition aux limites. Cela rajoute des cellules voisines au nœud i envoyant un résidu imposant la valeur de la condition aux limites au nœud i. La forme discrétisée de l'équation hyperbolique se réécrit alors sous la forme :

$$\int_{\Omega_h} \varphi_i r_h \, d\Omega_h = \int_{K|i\in K} \varphi_i r_h \, d\Omega_h + \int_{K|icl\in K} \varphi_i r_h \, d\Omega_h. \tag{3.24}$$

Cette formule distingue et sépare les résidus provenant des cellules du domaine, traîtés par les méthodes déjà expliquées et les résidus provenant des cellules imaginaires. On fait alors tendre le nœud icl vers le nœud i, la valeur du résidu peut alors être déterminée facilement et est donnée par la relation :

$$\int_{K|icl\in K} \varphi_i r_h \, d\Omega_h = \int_{\Gamma} \varphi_i (F(\overrightarrow{qcl}).n - F(\overrightarrow{q}).n) d\Gamma. \tag{3.25}$$

$F(\overrightarrow{q}cl)$ est le flux calculé avec la valeur imposée de la condition aux limites $\overrightarrow{q}cl$. $\overrightarrow{n}$ est la normale sortante de la frontière. Le résidu est nul quand la frontière prend la valeur de la condition aux limites. Nous allons voir dans la prochaine section les valeurs à imposer pour les conditions aux limites que nous avons utilisées.

3.3.2 Condition de sortie

Pour imposer une condition de sortie, nous reprenons la méthode présentée dans [47]. Cela consiste à implémenter une condition d'outflow subsonique, la différence des flux peut alors être réécrite sous la forme :

$$F(qcl) - F(q) = A_n^-(\overrightarrow{q})(\overrightarrow{q}cl - \overrightarrow{q}), \tag{3.26}$$

avec $A_n^-(\overrightarrow{q})$, la matrice diagonale des valeurs propres : $\lambda^- = min(0, \lambda)$.

Comme pour la méthode de propagation des ondes, on coupe le domaine et on considère qu'il n'y a alors plus d'interaction de la zone coupée sur l'écoulement. On impose alors les valeurs du nœud i au nœud fictif icl pour une sortie subsonique. La condition aux limites est alors obtenue en posant :

$$\overrightarrow{q}cl = \overrightarrow{q}. \tag{3.27}$$

3.3.3 Mur impénétrable

Pour imposer une condition de paroi, pour un fluide non visqueux, comme vu avec la méthode de propagation des ondes, la vitesse normale doit être nulle. En revanche, la condition n'affecte pas les densités partielles, la vitesse tangentielle et l'énergie totale. Pour cela on considère que l'état de la condition aux limites est tel que :

$$\begin{cases} (\alpha_1\rho_1)(qcl) = (\alpha_1\rho_1)(q) \\ (\alpha_2\rho_2)(qcl) = (\alpha_2\rho_2)(q) \\ (\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})(qcl) = -(\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})(q) \\ (\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{t})(qcl) = (\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{t})(q) \\ (E)(qcl) = (E)(q) \end{cases} \tag{3.28}$$

Ainsi la moyenne des états q et qcl donne bien la condition recherchée. Pour calculer la relation (3.25), il faut alors déterminer les flux correspondants. Pour cela on utilise un solveur de Riemann de Roe. La procédure du calcul est détaillée dans l'annexe A.

Pour le système du modèle diphasique à quatre équations on a alors :

$$(F(\overrightarrow{qcl}) - F(\overrightarrow{q})).\overrightarrow{n} = \begin{pmatrix} 2\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n} \\ 2\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n} \\ -2\rho(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{t})n_y, \\ 2\rho(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})(\overrightarrow{u}.\overrightarrow{t})n_x, \\ 2\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n}(E+P). \end{pmatrix}. \tag{3.29}$$

Chapitre 4

Comparaison entre les modèles diphasiques à 4 et 6 équations

4.1 Principes et Objectifs

Comme déjà expliqué le modèle diphasique à quatre équations (1.7) et le modèle diphasique à six équations (1.13) font tous les deux partie des modèles à interfaces diffuses et sont des versions simplifiées du modèle à sept équations (1.4). Pour traiter un problème, l'utilisation d'un modèle simplifié permet d'effectuer une résolution numérique plus rapide, cependant il est nécessaire que celui-ci soit adéquat et modélise de façon cohérente le problème.

En effet, pour des problèmes présentant initialement un équilibre des pressions et des températures et en assurant une relaxation instantanée de ces variables, les modèles à quatre et six équations peuvent être utilisés et convergent vers la même solution.

Dans cette section, nous présentons une étude comparative entre ces deux modèles diphasiques appliquée à de nombreux cas tests, afin de voir les avantages et inconvénients en utilisant ces deux modèles. En effet, à la connaissance de l'auteur il n'y a pas d'études comparatives des résultats donnés par les différents modèles à interfaces diffuses, nous avons ainsi procédé à une étude comparative des modèles que nous utilisons. On s'attend notamment à ce que les résultats convergent vers la même solution, par contre le modèle à six équations incluant plus de processus de transfert entre les phases devrait donner des résultats plus diffusifs. Cette étude est effectuée en utilisant la méthode de propagation des ondes. Ainsi dans cette section nous présenterons tout d'abord la manière dont les systèmes ont été résolus puis nous présenterons quelques résultats en une et deux dimensions qui sont alors comparés.

4.2 Résolution des systèmes

4.2.1 Méthodologie de splitting

Pour résoudre le système (1.7) et (1.13), nous avons recours à une méthode de splitting. Ainsi dans un premier temps nous résolvons uniquement la partie advective du système (4.1), (4.2) pour les systèmes à quatre et six équations, respectivement. Dans un deuxième temps, une fois la solution advective obtenue, nous résolvons le système (4.3), (4.4) pour les systèmes à quatre et six équations, respectivement, avec les termes sources en partant des résultats obtenus de la première étape du calcul.

Systèmes à quatre équations	Systèmes à six équations

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} + \nabla.(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u}) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} + \nabla.(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u}) = 0, \\ \frac{\partial \rho\overrightarrow{u}}{\partial t} + \nabla.(\rho\overrightarrow{u}\otimes\overrightarrow{u}) + \nabla(P) = 0, \\ \frac{\partial E}{\partial t} + \nabla.((E+P)\overrightarrow{u}) = 0. \end{cases} \tag{4.1}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + \overrightarrow{u}.\nabla\alpha_1 = 0, \\ \frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} + \nabla.(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u}) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} + \nabla.(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u}) = 0, \\ \frac{\partial \rho\overrightarrow{u}}{\partial t} + \nabla.(\rho\overrightarrow{u}\otimes\overrightarrow{u}) + \nabla(\alpha_1P_1 + \alpha_2P_2) = 0, \\ \frac{\partial \alpha_1E_1}{\partial t} + \nabla.((\alpha_1E_1 + \alpha_1P_1)\overrightarrow{u}) + \Upsilon = 0, \\ \frac{\partial \alpha_2E_2}{\partial t} + \nabla.((\alpha_2E_2 + \alpha_2P_2)\overrightarrow{u_2}) - \Upsilon = 0. \end{cases} \tag{4.2}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} = \Gamma, \\ \frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} = -\Gamma, \\ \frac{\partial \rho\overrightarrow{u}}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial E}{\partial t} = 0. \end{cases} \tag{4.3}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha_1}{\partial t} = \dot{\alpha_1}, \\ \frac{\partial \alpha_1\rho_1}{\partial t} = \Gamma, \\ \frac{\partial \alpha_2\rho_2}{\partial t} = -\Gamma, \\ \frac{\partial \rho\overrightarrow{u}}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial \alpha_1E_1}{\partial t} = +(h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma - P_I\frac{\partial \alpha_1}{\partial t} + Q_I, \\ \frac{\partial \alpha_2E_2}{\partial t} = -(h_r + \frac{\overrightarrow{u_r^2}}{2})\Gamma + P_I\frac{\partial \alpha_2}{\partial t} - Q_I. \end{cases} \tag{4.4}$$

4.2.2 Solveur convectif

4.2.2.1 Solveur HLLC pour le système à quatre équations

Pour résoudre le problème hyperbolique du système à quatre équations nous utilisons un solveur HLLC (voir [70] pour plus de détails). Comme le solveur HLLC de Toro est un solveur de Riemann approché utilisant 3 ondes, son utilisation est parfaitement adéquate puisque nos systèmes sont caractérisés par 3 vitesses caractéristiques. Nous avons repris la méthologie proposée par Saurel [33] que nous allons rappeler. La structure caractéristique de nos systèmes est approximée en utilisant un solveur HLLC donnée par la figure 4.1, où l'on voit quatre états constants séparés par deux chocs aux vitesses S_R et S_L et une discontinuité de contact à la vitesse S. Le problème est alors de trouver les inconnues U_L^* et U_R^* pour définir les fluctuations aux interfaces.

Il est nécessaire d'approximer les vitesses des ondes du solveur S_L, S et S_R. Nous suivons la

formulation donnée par Davis [95] en prenant l'approximation $S_L = min((u-c)_R,(u-c)_L)$ et $S_R = max((u+c)_R,(u+c)_L)$, avec u la vitesse du nœud et c la vitesse du son du nœud. Pour la vitesse de la discontinuité de contact nous prenons $S = u^*$ pour la caractéristique centrale. Afin de la déterminer nous imposons que l'onde centrale est une onde de contact et que la pression et la vitesse normale ne varient pas en la traversant :

$$\begin{cases} P_L^* = P_R^* = P^* \\ u_L^* = u_R^* = u^* \end{cases} \tag{4.5}$$

Les relations de Rankine-Hugoniot sur les équations de transport des densités partielles et de la quantité de mouvement peuvent alors s'écrire :

$$\begin{aligned} S_m(\alpha_1\rho_1)_m^* - (\alpha_1\rho_1)_m^* S &= S_m(\alpha_1\rho_1)_m - (\alpha_1\rho_1)_m u_m \\ S_m(\alpha_2\rho_2)_m^* - (\alpha_2\rho_2)_m^* S &= S_m(\alpha_2\rho_2)_m - (\alpha_2\rho_2)_m u_m \\ S_m\rho_m^* S - \rho_m^* S^2 - P^* &= S_m\rho_m u_m - \rho_m u_m^2 - P_m \\ m &= L,R \end{aligned} \tag{4.6}$$

En sommant les relations sur les densités partielles on obtient alors :

$$\begin{aligned} S_m\rho_m^* - \rho_m^* S &= S_m\rho_m - \rho_m u_m \\ S_m\rho_m^* S - \rho_m^* S^2 - P^* &= S_m\rho_m u_m - \rho_m u_m^2 - P_m \\ m &= L,R \end{aligned} \tag{4.7}$$

En combinant ces deux expressions on obtient alors les relations entre les pressions :

$$\begin{aligned} P^* &= P_m + \rho_m(S_m - u_m)(S - u_m) \\ m &= L,R \end{aligned} \tag{4.8}$$

On peut alors substituer la pression P^* dans ces deux expressions et obtenir alors l'expression de l'onde centrale :

$$S = u^* = \frac{P_R - P_L + \rho_L u_L(S_L - u_L) - \rho_R u_R(S_R - u_R)}{\rho_L(S_L - u_L) - \rho_R(S_R - u_R)}$$

Puis en utilisant les conditions de saut de Rankine-Hugoniot, les états à gauche et à droite de l'onde centrale peuvent être déterminés complètement en fonction des états initiaux à gauche et à droite :

$$\begin{aligned} &\rho_m^* = \rho_m \frac{u_m - S_m}{S - S_m}, \\ &u_m^* = u^* = S, \\ &\frac{E_m^*}{\rho_m^*} = \frac{E_m}{\rho_m} + \frac{P_m(u_m - S)}{\rho_m(u_m - S_m)} - S(u_m - S), \\ &Y_m^* = Y_m, \\ &m = R,L. \end{aligned} \tag{4.9}$$

Une fois ces valeurs connues, nous pouvons actualiser les résultats en utilisant la méthode de propagation des ondes.

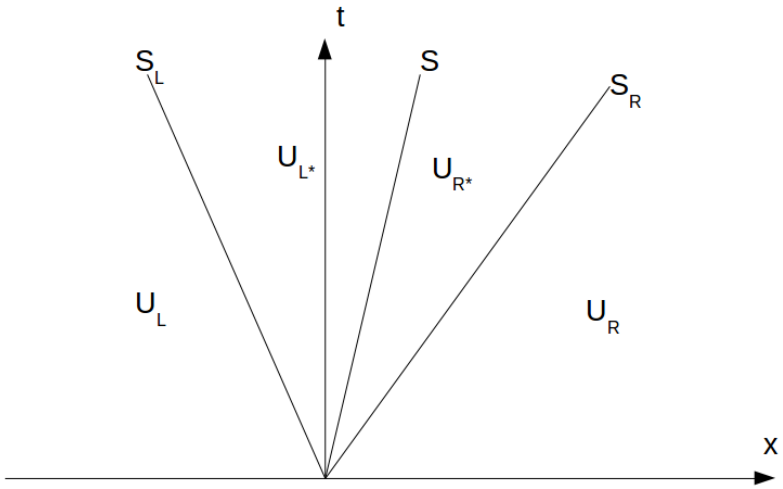


FIGURE 4.1 – Structure des ondes d'un problème de Riemann modélisée avec un solveur HLLC (la figure illustre le cas où les ondes S_R et S sont supérieures à 0, la structure est à adapter selon les signes des ondes S_R, S_L et S pour calculer les fluctuations $A^+\Delta q_{i-\frac{1}{2}}$ et $A^-\Delta q_{i+\frac{1}{2}}$)

4.2.2.2 Solveur HLLC pour le système à six équations

De même que pour le système à quatre équations, pour résoudre la partie hyperbolique du système à six équations, nous avons recours à un schéma de type HLLC. Comme fait dans [17] nous négligeons le terme non-conservatif Υ dans l'écriture des conditions de Rankine-Hugoniot des deux ondes externes. En effet comme il a été montré dans [85] une fois l'étape de relaxation des pressions effectuée, prendre en compte ce terme n'a qu'une influence infime sur les résultats de la simulation. Néanmoins, quelques différences peuvent subvenir pour des écoulements avec des chocs très forts dans des zones de mélange où les fractions volumiques des fluides sont proches de 0.5, mais cela ne concerne pas les cas que nous considérons. De la même manière que pour le système à quatre équations on peut alors déterminer les valeurs centrales rappelées par le système :

$$U_{*m} = \left\{ \begin{array}{l} \alpha_{1,m} \\ (\alpha_1\rho_1)_m \frac{S_m-u_m}{S_m-S} \\ (\alpha_2\rho_2)_m \frac{S_m-u_m}{S_m-S} \\ \rho_m \frac{S_m-u_m}{S_m-S} S \\ (\alpha_1\rho_1)_m \frac{S_m-u_m}{S_m-S} (\frac{E_{1,m}}{\rho_{1,m}} + (S-u_m)(S + \frac{P_m}{\rho_{1,m}(S_m-u_m)})) \\ (\alpha_2\rho_2)_m \frac{S_m-u_m}{S_m-S} (\frac{E_{2,m}}{\rho_{2,m}} + (S-u_m)(S + \frac{P_m}{\rho_{2,m}(S_m-u_m)})) \end{array} \right\}. \quad (4.10)$$

$$m = R, L$$

Nous rajoutons que les ondes S_L et S_R sont elles aussi approximées en utilisant la formulation de Davis.

4.2.3 Traitement des termes sources

4.2.3.1 Relaxation des pressions

Après que la partie hyperbolique du système est résolue, nous avons traité les différentes interactions entre les fluides modélisées par les différents termes sources. Comme le montre la thèse de Labois [4], les temps de relaxation de chacun de ces processus ont des ordres de grandeur très différents et peuvent ainsi être traités indépendamment du plus rapide au plus lent. Le processus le plus rapide est la relaxation mécanique et le plus lent est la relaxation chimique. Comme le modèle à six équations est une astuce de calcul du système à cinq équations, pour des raisons de cohérences physiques le processus doit être instantané, soit $\mu \to \infty$. Le système à résoudre est le système :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_1) = \mu(P_1 - P_2), \\ \partial_t(\alpha_1\rho_1) = 0, \\ \partial_t(\alpha_2\rho_2) = 0, \\ \partial(\rho\overrightarrow{u}) = 0, \\ \partial(\alpha_1 E_1) = -\mu P_I(P1 - P2), \\ \partial(\alpha_2 E_2) = \mu P_I(P1 - P2). \end{cases} \tag{4.11}$$

Les variables obtenues suite à la résolution du système hyperbolique sont notées avec l'exposant 0 tandis que celles obtenues après l'étape de relaxation sont notées avec l'exposant $*$. D'aucuns peuvent facilement remarquer que la quantité de mouvement et les densités partielles sont conservées durant le processus, soit $(\alpha_k\rho_k)^* = (\alpha_k\rho_k)^0, k = 1,2$ et $(\rho\overrightarrow{u})^* = (\rho\overrightarrow{u})^0$.

Pour résoudre les autres équations aux dérivées partielles nous procédons de la même manière que dans [17], le lecteur peut se référer à ce travail pour plus d'informations sur la procédure.

Dans le cas où une loi d'état stiffened gas est utilisée, en définissant $C_1 = 2\gamma_1 P_{\infty,1} + (\gamma_1 - 1)P_I^0$ et $C_2 = 2\gamma_2 P_{\infty,2} + (\gamma_2 - 1)P_I^0$ on trouve alors la pression P^* solution de l'équation quadratique :

$$a(P^*)^2 + bP^* + d = 0,$$

$$\text{avec} \begin{cases} a = 1 + \gamma_2\alpha_1^0 + \gamma_1\alpha_2^0, \\ b = C_1\alpha_2^0 + C_2\alpha_1^0 - (1+\gamma_2)\alpha_1^0 P_1^0 - (1+\gamma_1)\alpha_2^0 P_2^0, \\ d = -(C_2\alpha_1^0 P_1^0 + C_1\alpha_2^0 P_2^0), \\ P^* = \frac{-b+\sqrt{b^2-4ad}}{2a}, \end{cases} \tag{4.12}$$

et la fraction volumique α_1^* donnée par l'équation (4.13) :

$$\left\{ \alpha_1^* = \frac{(\gamma_1-1)P^* + 2P_1^0 + C_1}{(\gamma_1+1)P^* + C_1}\alpha_1^0. \right. \tag{4.13}$$

4.2.3.2 Relaxation des températures

La relaxation des pressions étant beaucoup plus rapide que la relaxation des températures, on peut considérer que la relaxation en température s'effectue donc avec la pression d'équilibre résultant de l'étape de relaxation des pressions. Le système à résoudre est donné par le système (4.14) :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_1) = \mu(P_1 - P_2), \\ \partial_t(\alpha_1\rho_1) = 0, \\ \partial_t(\alpha_2\rho_2) = 0, \\ \partial(\rho\overrightarrow{u}) = 0, \\ \partial(\alpha_1 E_1) = -\mu P_I(P1 - P2) + \theta(T2 - T1), \\ \partial(\alpha_2 E_2) = \mu P_I(P1 - P2) - \theta(T2 - T1). \end{cases} \tag{4.14}$$

De la même manière que pour la relaxation des pressions, les indices 0, $*$ et $**$ indiquent respectivement les variables résultant du solveur hyperbolique, de la relaxation des pressions et de la relaxation des températures.

Comme pour la relaxation des pressions, d'aucuns voient immédiatement que les densités partielles et la quantité de mouvement sont conservées ainsi que l'énergie totale et interne du mélange. Autrement dit nous avons $(\alpha_k\rho_k)^{**} = (\alpha_k\rho_k)^0, k = 1,2$, $(\rho\overrightarrow{u})^{**} = (\rho\overrightarrow{u})^0$, $\varepsilon^{**} = \varepsilon^0$ et $E^{**} = E^0$. En utilisant la même méthologie que [17], en considérant le processus instantané et donc en assumant l'égalité des pressions et des températures, en utilisant une loi stiffened gas il est possible de trouver les solutions analytiques suivantes pour la pression :

$$\begin{cases} a'(p^{**})^2 + b'(p^{**}) + d' = 0, \\ a' = cv_1(\alpha_1\rho_1)^0 + cv_2(\alpha_2\rho_2)^0, \\ b' = q_1cv_1(\gamma_1 - 1)((\alpha_1\rho_1)^0)^2 + q_2cv_2(\gamma_2 - 1)((\alpha_2\rho_2)^0)^2 + (\alpha_1\rho_1)^0cv_1(\gamma_1 P_{\infty,1} + P_{\infty,2}) + \\ (\alpha_2\rho_2)^0cv_2(\gamma_2 P_{\infty,2} + P_{\infty,1}) + (\alpha_1\rho_1)^0(\alpha_2\rho_2)^0(q_1cv_2(\gamma_2 - 1) + q_2cv_1(\gamma_1 - 1)) \\ -\varepsilon^0(cv_1(\gamma_1 - 1)(\alpha_1\rho_1)^0 + cv_2(\gamma_2 - 1)(\alpha_2\rho_2)^0), \\ d' = q_1cv_1(\gamma_1 - 1)P_{\infty,2}((\alpha_1\rho_1)^0)^2 + q_2cv_2(\gamma_2 - 1)P_{\infty,1}((\alpha_2\rho_2)^0)^2 + ((\alpha_1\rho_1)^0cv_1\gamma_1 \\ +(\alpha_2\rho_2)^0cv_2\gamma_2)P_{\infty,2}P_{\infty,1} + (\alpha_1\rho_1)^0(\alpha_2\rho_2)^0(q_1cv_2(\gamma_2 - 1)P_{\infty,1} + q_2cv_1(\gamma_1 - 1)P_{\infty,2}) \\ -\varepsilon^0(cv_1(\gamma_1 - 1)P_{\infty,2}(\alpha_1\rho_1)^0 + cv_2(\gamma_2 - 1)P_{\infty,1}(\alpha_2\rho_2)^0), \\ p^{**} = \frac{-b' + \sqrt{(b')^2 - 4a'd'}}{2a'}, \end{cases} \tag{4.15}$$

où la fraction volumique est donnée par (4.16) :

$$\left\{ \alpha_1^{**} = \frac{cv_1(\gamma_1 - 1)(p^{**} + P_{\infty,2})(\alpha_1\rho_1)^0}{cv_1(\gamma_1 - 1)(p^{**} + P_{\infty,2})(\alpha_1\rho_1)^0 + cv_2(\gamma_2 - 1)(p^{**} + P_{\infty,1})(\alpha_2\rho_2)^0}, \right. \tag{4.16}$$

et la température est donnée par :

$$\begin{cases} T^{**} = \frac{(p^{**}+P_{\infty,1})\alpha_1^{**}}{(\gamma_1-1)cv_1(\alpha_1\rho_1)^0}. \end{cases} \tag{4.17}$$

4.2.3.3 Relaxation des potentiels chimiques

Finalement, il reste à traiter les transferts chimiques entre les phases. Cette étape s'effectue pour le modèle à six équations mais aussi pour le système à quatre équations. Ce processus étant le même pour les deux modèles nous allons uniquement le présenter pour le système à six équations. Le système à résoudre est alors le système (4.18) :

$$\begin{cases} \partial_t(\alpha_1) = \mu(P_1 - P_2), \\ \partial_t(\alpha_1\rho_1) = \Theta(g_2 - g_1), \\ \partial_t(\alpha_2\rho_2) = -\Theta(g_2 - g_1,) \\ \partial(\rho\overrightarrow{u}) = 0, \\ \partial(\alpha_1 E_1) = -\mu P_I(P1 - P2) + \theta(T2 - T1) + \Theta e_I(g_2 - g_1), \\ \partial(\alpha_2 E_2) = \mu P_I(P1 - P2) - \theta(T2 - T1) - \Theta e_I(g_2 - g_1). \end{cases} \tag{4.18}$$

Pour cela, dans un premier temps nous définissons le terme exprimant les transferts de masse Γ. Nous utilisons l'approche classique qui consiste à écrire les transferts de masse sous la forme $\Gamma = \Theta(\nu_l - \nu_g)$ avec ν les potentiels chimiques des milieux liquides et vapeurs et Θ qui représente l'inverse du temps de relaxation du processus. Cette expression permet de respecter l'inégalité d'entropie. Dans les cas que nous considérons ces temps de relaxation sont généralement minimes comparés aux pas de temps de la résolution, par conséquent nous pouvons considérer que le processus est instantané localement.

Dans un premier temps, nous allons voir comment nous obtenons l'état d'équilibre résultant d'un processus instantané. Si la cellule contient une quantité non négligeable de liquide et de vapeur (nous avons mis pour nos calcul $\varepsilon_1 = 10^{-6}$) et que le potentiel chimique du milieu liquide est plus grand que celui du milieu vapeur il y a de l'évaporation. Au contraire, si le potentiel chimique du milieu vapeur est plus grand que le potentiel chimique du milieu liquide il y a de la liquéfaction. Dans ces deux cas Θ est considéré comme infini. Sinon il n'y a pas de transfert de masse soit $\Theta = 0 = \Gamma$, soit :

$$\begin{array}{lll} si & \varepsilon_1 < \alpha_1 < 1 - \varepsilon_1 \rightarrow \nu_l > \nu_g : \text{évaporation } \Theta = \infty, \\ & \rightarrow \nu_l < \nu_g : \text{liquéfaction } \Theta = \infty, \\ sinon & \Theta = 0. \end{array} \tag{4.19}$$

Pour résoudre ce système, la même approche que dans [17] est utilisée. En notant par 0 les variables obtenues après la résolution du système convectif et par *** celles obtenues après les transferts de masse, nous pouvons à partir du système (4.18) déduire la conservation durant le processus de la densité $\rho^0 = \rho^{***}$, de la quantité de mouvement $(\rho\overrightarrow{u})^{***} = (\rho\overrightarrow{u})^0$, et des énergies internes et totales $\varepsilon^{***} = \varepsilon^0$, $E^{***} = E^0$. Puis en utilisant les relations $\rho^0 = \alpha_l^{***}\rho_l^{***} + \alpha_g^{***}\rho_g^{***}$ et $\varepsilon^0 = \alpha_l^{***}\varepsilon_l^{***} + \alpha_g^{***}\varepsilon_g^{***}$ nous pouvons obtenir la relation quadratique suivante :

$$
\begin{aligned}
&a_p(P^{***})(T^{***})^2 + b_p(P^{***})T^* + d_p(P^{***}) = 0,\\
&a_p(P^{***}) = \rho^0 cv_1 cv_2((\gamma_2-1)(P^{***}+\gamma_1 P_{\infty 1}) - (\gamma_1-1)(P^{***}+\gamma_2 P_{\infty 2})),\\
&b_p(P^{***}) = \varepsilon^0((\gamma_1-1)cv_1(P^{***}+P_{\infty 2}) - (\gamma_2-1)cv_2(P^{***}+P_{\infty 1}))\\
&\qquad + \rho^0((\gamma_2-1)cv_2 q_1(P^{***}+P_{\infty 1}) - (\gamma_1-1)cv_1 q_2(P^{***}+P_{\infty 2}))\\
&\qquad + cv_2(P^{***}+P_{\infty 1})(P^{***}+\gamma_2 P_{\infty 2}) - cv_1(P^{***}+P_{\infty 2})(P^{***}+\gamma_1 P_{\infty 1}),\\
&d_p(P^{***}) = (q_2-q_1)(P^{***}+P_{\infty 1})(P^{***}+P_{\infty 2}),
\end{aligned}
\tag{4.20}
$$

reliant la température du mélange à la pression du mélange en fonction des quantités conservées.

Maintenant, nous avons deux inconnues, la température et la pression. Pour compléter le problème nous utilisons la condition d'équilibre chimique $v_l^{***} = v_g^{***}$. Dans notre cas, pour deux phases d'une même espèce, l'égalité des potentiels chimiques est équivalente à l'égalité des énergies libres de Gibbs. Pour une équation d'état stiffened gas pour deux phases celle-ci est donnée par l'égalité suivante :

$$
\begin{aligned}
&A_s + \frac{B_s}{T} + C_s log T + D_s log(P+P_{\infty 1}) - log(P+P_{\infty 2}) = 0,\\
&A_s = \frac{cp_1 - cp_2 + q_2^{'} - q_1^{'}}{cp_2 - cv2}; \qquad B_s = \frac{q_1-q_2}{cp_2-cv2}; \qquad C_s = \frac{cp_2-cp_1}{cp_2-cv2}; \qquad D_s = \frac{cp_1-cv_1}{cp_2-cv2}.
\end{aligned}
\tag{4.21}
$$

Cette deuxième équation est non-linéaire. Nous pouvons la résoudre en utilisant par exemple la méthode de Newton-Raphson sur la pression. A chaque itération, puisque nous avons une nouvelle valeur de la pression nous pouvons calculer avec (4.20) la valeur correspondante de la température. Puisque nous avons deux racines nous faisons le calcul avec les deux racines puis nous prenons la solution physiquement admissible. S'il n'y a pas de solution physique, alors le transfert de masse est total et nous imposons une quantité négligeable de la fraction de masse à la quantité qui disparaît. Dans nos calculs nous prenons $\varepsilon_2 = 10^{-8}$ (voir [17] pour plus de détails).

Dans ce chapitre, tous les transferts de masse sont considérés instantanés, en revanche dans une autre section de ce document des transferts de masse non-instantanés sont utilisés.

Dans ce cas, nous procédons comme dans [96]. L'évolution de la fraction massique de vapeur est modélisée par l'équation différentielle :

$$
\frac{dY_v}{dt} = -\frac{Y_v - Y_v^{***}}{\Theta_t}, \tag{4.22}
$$

en considérant Θ_t invariant le long du processus, la résolution de l'équation est triviale et on obtient alors la fraction volumique relaxée après le pas de temps dt :

$$
Y_v^{n+1} = Y_v^{***} - (Y_v^{***} - Y_v^n) exp^{-\frac{-dt}{\Theta_t}}, \tag{4.23}
$$

Y_v^{***} est la fraction massique de vapeur d'équilibre obtenue par la procédure déjà présentée et Θ_t le temps de relaxation donné par des relations de la littérature.

Dans les prochaines sections, de nombreux cas tests sont effectués. La résolution a été effectuée avec la méthode de propagation des ondes à l'ordre deux en utilisant des limiteurs minmod. La méthode a été implémentée dans le logiciel libre d'accès Clawpack.

4.3 Résultats numériques

4.3.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur

Le premier cas test que nous présentons est un des cas tests présentés dans [97], i.e. le problème d'un tube à choc pour un mélange liquide-vapeur. A l'instant initial deux mélanges à pressions et températures différentes sont séparés par un diaphragme, les états initiaux sont donnés dans la table 4.1. Le problème commence à l'instant où le diaphragme rompt et nous suivons alors l'évolution des mélanges à gauche et à droite. Les deux mélanges sont respectivement à leur température de cavitation et de liquéfaction, le gradient des températures entraîne alors la liquéfaction du côté gauche et l'évaporation du côté droit. Ce cas test est par conséquent très intéressant pour vérifier la validité du calcul des transferts de masse. Les fluides sont modélisés par une équation d'état stiffened gas dont les paramètres sont donnés dans le tableau 4.2. Les résultats sont présentés au bout de 0.8ms par les figures 4.2 à 4.8 pour plusieurs maillages.

Une étude de convergence en maillage est tout d'abord présentée sur les figures 4.2 pour le calcul sans transfert de masse et la figure 4.3 avec transfert de masse. Les résultats pour un maillage de 400 nœuds étant bien convergés nous utilisons par la suite ce maillage pour présenter la suite des résultats. Les figures suivantes comparent les résultats des modèles à six et quatre équations pour des résultats avec et sans transfert de masse. Les figures 4.4 et 4.5 présentent les profils de la densité et de la pression. Le profil de la densité présente bien la discontinuité de contact initiale (au début du calcul la discontinuité se situe à x=0.5m, en raison du gradient initial de température la discontinuité se déplace vers la droite au cours du calcul, à t=0.8ms elle se situe à x=0.6m), en outre on peut observer l'évolution de deux ondes non-linéaires (un choc et une détente) pour la densité et la pression comme le prévoit la structure caractéristique du problème. Les figures 4.6 et 4.7 présentent les profils de la température et de la fraction massique. Sans transfert de masse le profil de la température présente une structure à quatre plateaux délimitée par les ondes non-linéaires (choc et détente) et une discontinuité de contact. Comme le montre les résultats avec transfert de masse, l'évolution de la fraction massique de liquide est provoquée par le gradient initial de température (discontinuité de contact à x=0.5m) puis la liquéfaction et l'évaporation de part et d'autre de la discontinuité initiale ramènent la température à une valeur d'équilibre entre le choc et la détente.

On peut constater comme attendu que les résultats des modèles diphasiques à quatre et six équations convergent vers la même solution faible pour une relaxation des températures et des potentiels chimiques instantanée. On peut par ailleurs rajouter que le modèle à six équations donne des résultats plus diffusifs à maillage équivalent. Cela est illustré par la figure 4.8 comparant l'évolution en maillage des profils de la température pour les modèles à quatre et six équations avec et sans transfert de masse.

4.3.2 Dépression d'une conduite de CO_2

Notre second cas test reprend le test effectué dans [77] qui modélise la dépressurisation d'une conduite de CO_2 liquide presque pur ($\alpha_v = 1e^{-5}$) à température ambiante (T=273K) en raison d'un fort gradient de pression. L'état initial du domaine est donné dans la table 4.3 tandis que les paramètres de l'équation d'état sont donnés par le tableau 4.4. Concernant les para-

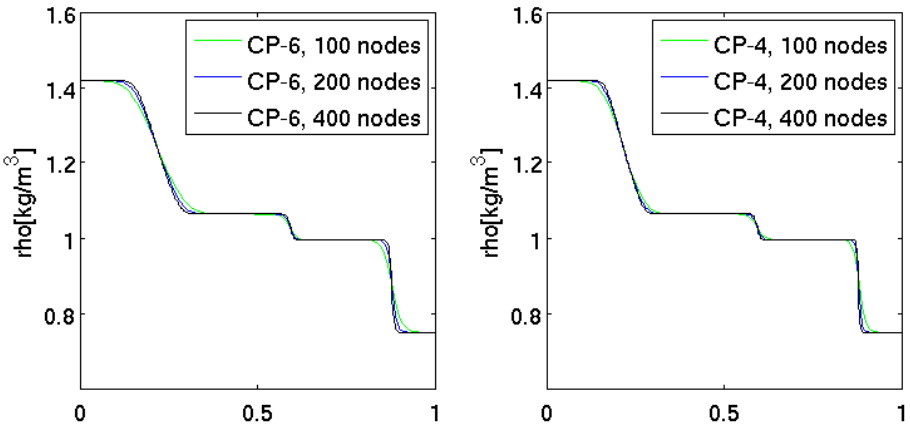


FIGURE 4.2 – Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

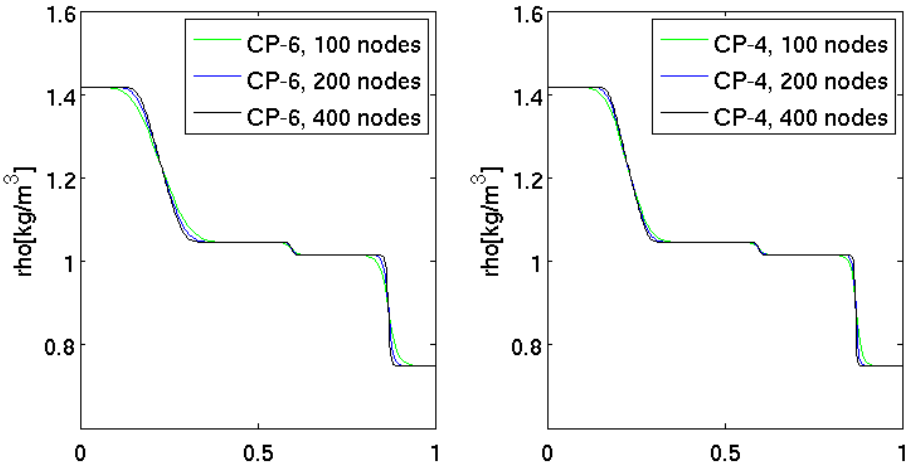


FIGURE 4.3 – Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

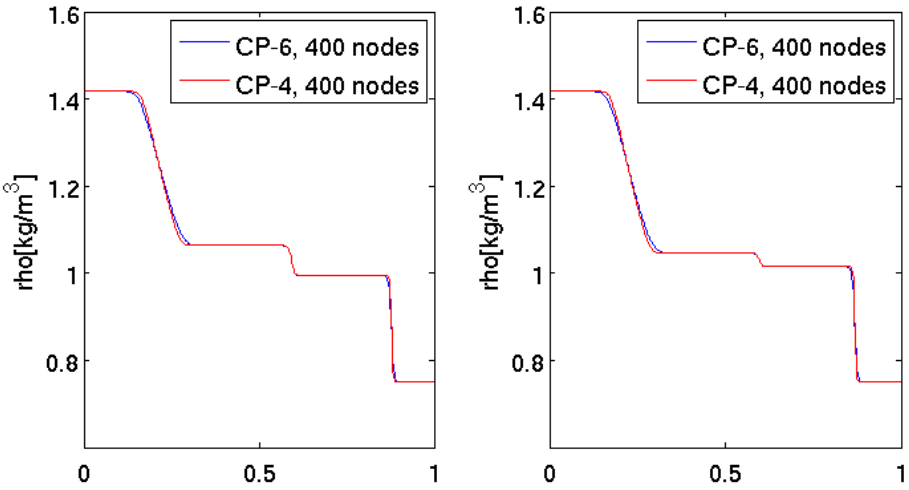


FIGURE 4.4 – Profil de la densité obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

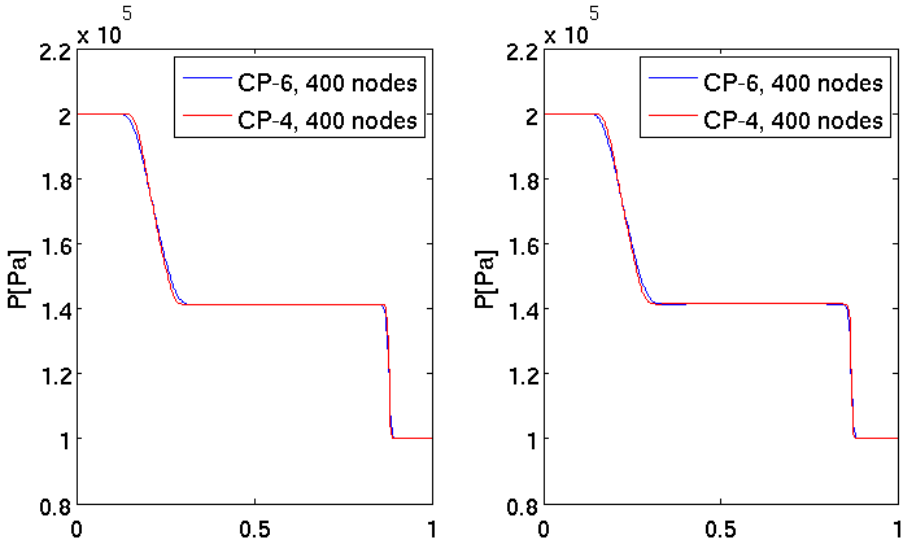


FIGURE 4.5 – Profil de la pression obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

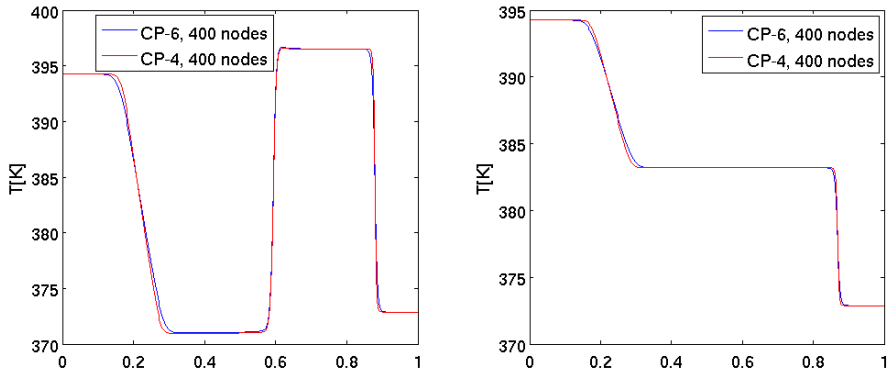


FIGURE 4.6 – Profil de la température obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

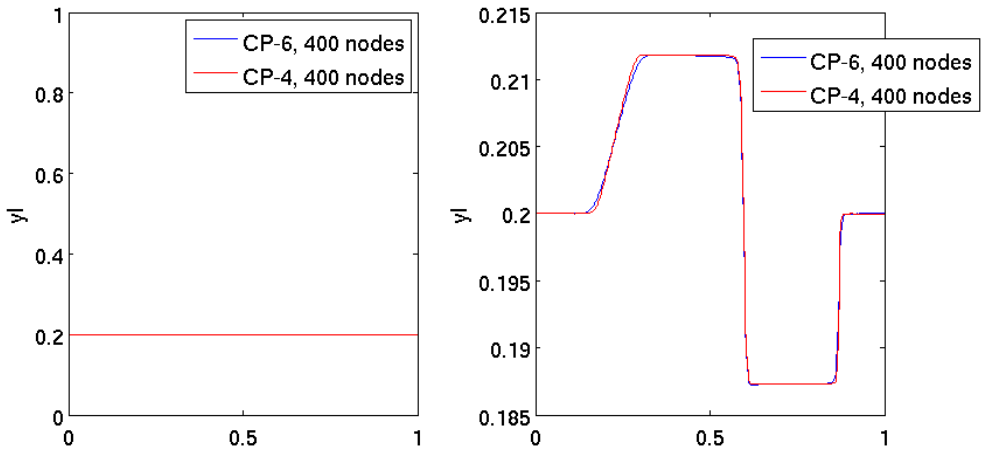


FIGURE 4.7 – Profil de la fraction massique de liquide obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

	état à gauche(0-0.5m)	état à droite (0.5-1m)
P(pa)	2e5	1e5
u	0	0
yl	0.2	0.2
T(k)	394.2489	372.8827

TABLE 4.1 – Paramètres initiaux d'un tube à choc eau-vapeur

	liquide	gaz
cv	1816	1040
γ	2.35	1.43
P_∞	10^9	0
q	-1167 10^3	2030 10^3
q'	0	-23.4 10^3

TABLE 4.2 – Paramètres de la loi d'état stiffened gas utilisés dans un tube à choc eau-vapeur

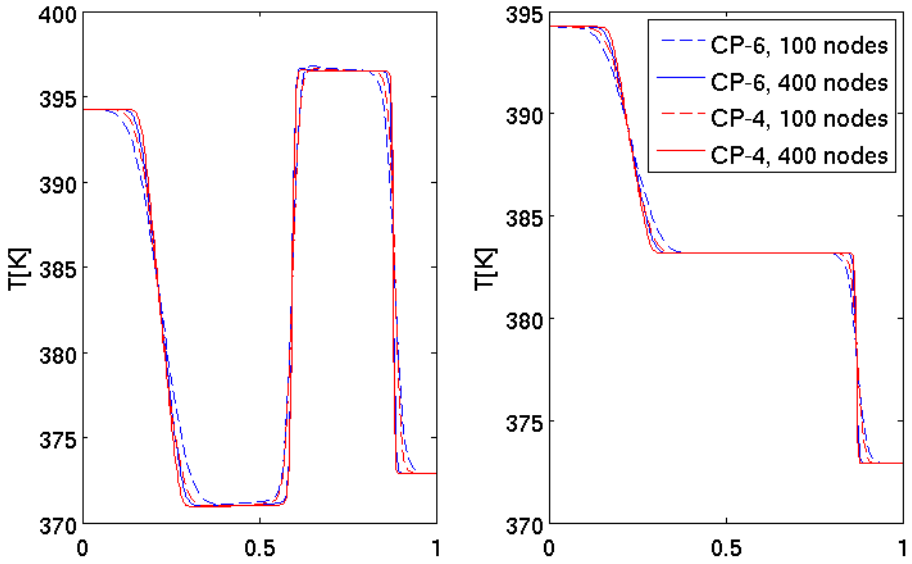


FIGURE 4.8 – Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la température obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur entre les modèles à quatre et 6 équations (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

mètres de l'équation d'état nous avons repris ceux de [98], ceux-ci étant formulés de manière un peu différente de l'écriture classique des paramètres stiffened gas. Nous avons utilisé ces paramètres pour déterminer les paramètres q et q' correspondants. On peut par ailleurs noter que la résolution du problème dans [77] utilise un processus de liquéfaction et d'évaporation non instantané pour la remise à l'équilibre des potentiels chimiques. Dans notre cas, nous avons utilisé un processus de remise à l'équilibre instantané alors que le processus de cavitation est beaucoup plus rapide que celui d'évaporation. Pour cette raison dans ce cas test nous avons utilisé seulement un processus de cavitation. Les résultats à t=80ms peuvent être vus sur les figures 4.9 à 4.14.

Une étude de convergence en maillage est tout d'abord présentée sur les figures 4.9 pour le calcul sans transfert de masse et la figure 4.10 avec transfert de masse. Les résultats pour un maillage de 4000 nœuds étant bien convergés nous utilisons par la suite ce maillage pour

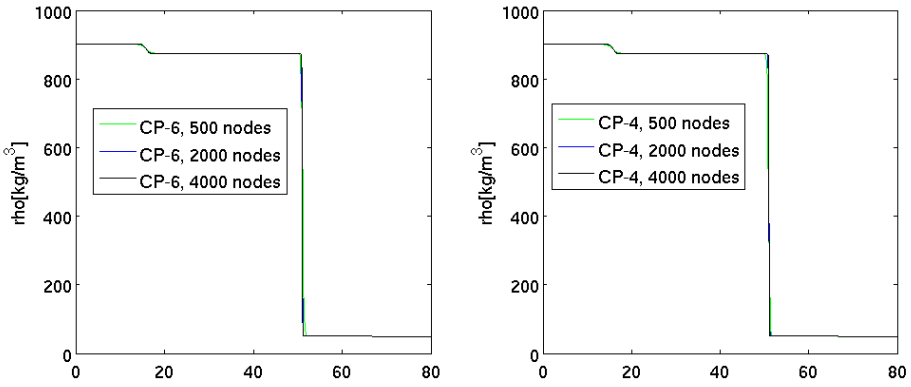


FIGURE 4.9 – Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

présenter la suite des résultats. Les figures suivantes comparent les résultats des modèles à six et quatre équations pour des résultats avec et sans transfert de masse. Les figures 4.11 et 4.12 présentent les profils de la densité et de la pression. Sans transfert de masse, comme attendu, le profil de la densité est délimité par deux ondes non-linéaires (une détente à x=18m, un choc à x=70 m) et la discontinuité de contact initiale (à x=50m). Le profil de la pression est délimité par les deux ondes non-linéaires. En activant les transferts de masse, la variation des températures due à l'évaporation produit une nouvelle onde entre la discontinuité initiale et la partie droite de la conduite (entre x=50m et x=55m). Cela est visible sur la figure 4.13 présentant les profils de la température.

Comme pour le cas précédant, nous retrouvons de même une cohérence vis-à-vis de la solution convergée des résultats avec toutefois des profils plus diffus avec le modèle à six équations. Cela est visible dans la figure 4.14 comparant l'évolution des profils de la température donnés par les modèles à quatre et six équations pour différents maillages.

	état à gauche (0-50m)	état à droite (50-80m)
P(pa)	60e5	10e5
u	0	0
ρ_1	9.007386e2	1.74436e2
ρ_2	8.6810e2	47.7761

TABLE 4.3 – Etats initiaux pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2

	liquide	gaz
cv	2.44e3	2.41e3
γ	1.23	1.06
P_∞	1.32e8	8.86e5
q	-6.23e5	-3.01e5
q'	-5.340928977e3	-1.039809485e4

TABLE 4.4 – Paramètres d'état stiffened gas du CO_2

4.3.3 Cavitation de l'eau à faible vitesse

Ce cas test modélise un cas de cavitation de l'eau soumis à un gradient de vitesse. Ce cas est repris de [17]. L'eau est modélisée avec les mêmes paramètres que pour le tube à choc liquide-vapeur (table 4.2). On considère un liquide au repos à 1 bar et 345.728 K dans

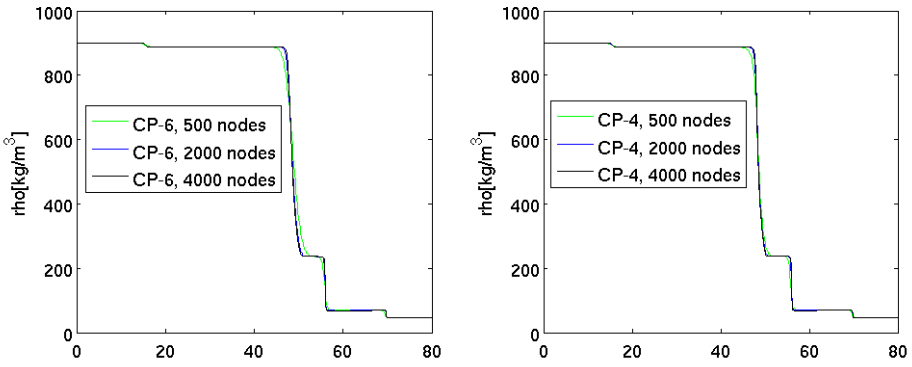


FIGURE 4.10 – Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

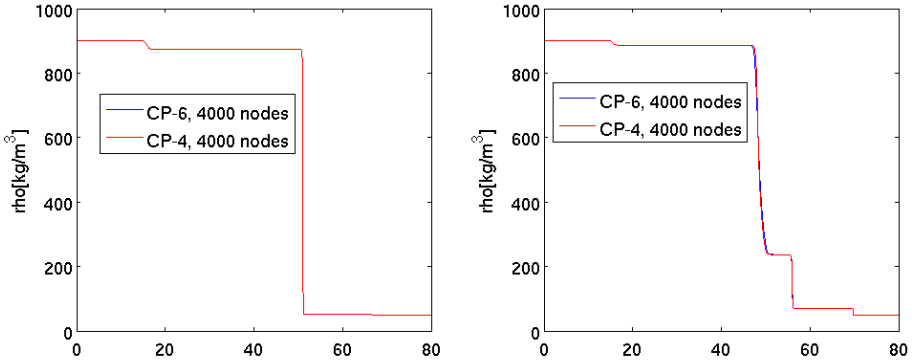


FIGURE 4.11 – Profil de la densité obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

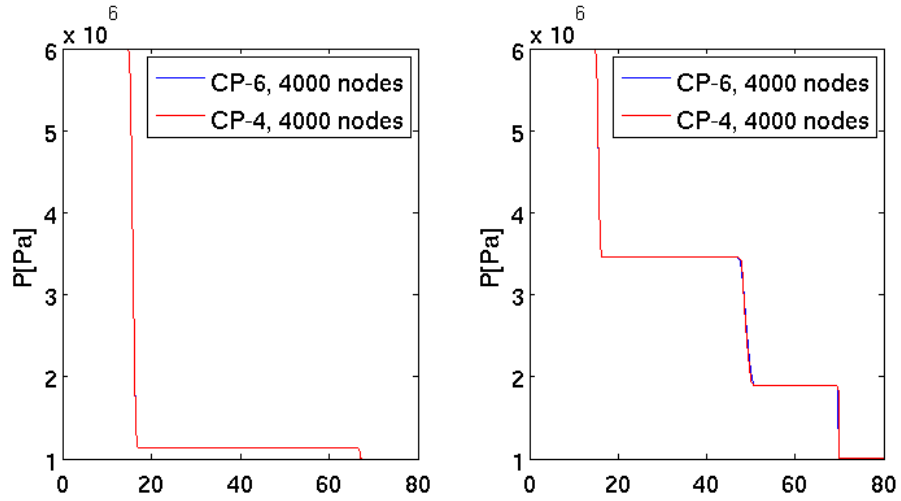


FIGURE 4.12 – Profil de la pression obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

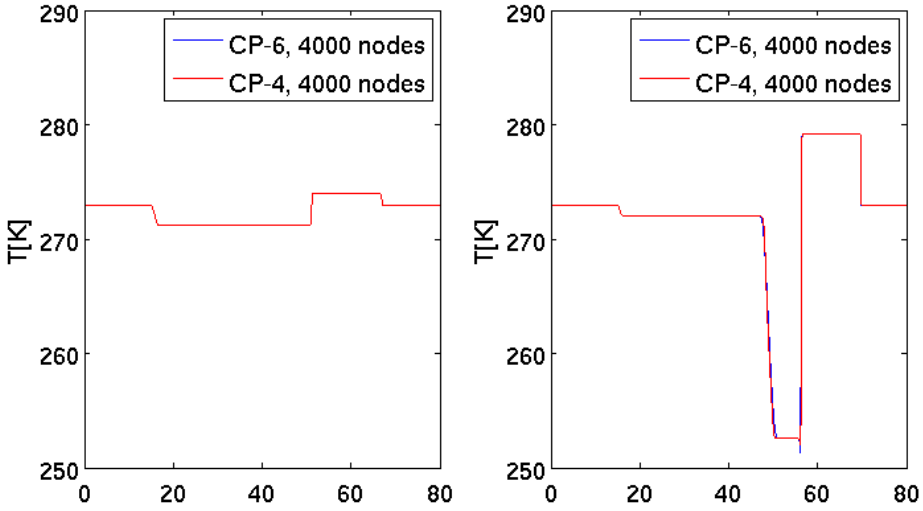


FIGURE 4.13 – Profil de la température obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

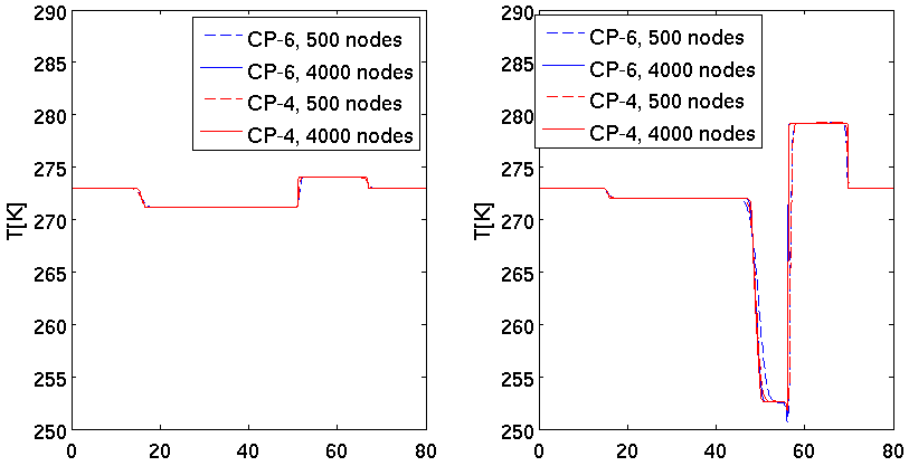


FIGURE 4.14 – Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la température obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

une conduite. A l'instant initial l'eau est drainée de chaque côté, cela entraîne une cavitation mécanique et chimique de l'eau (l'état initial du problème est référencé dans la table 4.5). Ce problème permet d'observer l'efficacité de nos modèles à capturer la croissance de phase spontanée due à de la cavitation mécanique et chimique. Les résultats après 3.2 ms pour différents maillages sont visibles sur les figures 4.15 à 4.22.

Une étude de convergence en maillage est tout d'abord présentée sur les figures 4.15 pour le calcul sans transfert de masse et la figure 4.16 avec transfert de masse. Les résultats pour un maillage de 5000 nœuds étant bien convergés nous utilisons par la suite ce maillage pour présenter la suite des résultats. Les figures suivantes comparent les résultats des modèles à six et quatre équations pour des résultats avec et sans transfert de masse. Les profils de la densité et de la pression sont présentés par les figures 4.17 et 4.18. Sans transfert de masse, les profils de la pression et de la densité évoluent par cavitation mécanique se propageant par deux détentes dues au gradient initial de vitesse (à x=0.5m). Contrairement au cas test précédant, le profil de la densité ne présente pas de discontinuité de contact puisque l'état intial de la densité était constant. En activant les transferts de masse, la cavitation chimique produit un pic très important dans le profil de la densité.

En ce qui concerne les profils de la température (4.19), de l'énergie interne spécifique (4.20) et de la vitesse (figure 4.21), on peut voir un pic non physique à x=0.5m dans les profils de la température et de l'énergie pour les résultats sans transfert de masse. Ce phénomène est expliqué dans [99], dans les zones de basses densités, la vitesse est mal approximée (on voit sur la figure 4.21 présentant le profil de la vitesse que la zone de contact entre les détentes n'est pas parfaitement constante), d'où une mauvaise approximation de l'énergie cinétique. Dans une méthode numérique conservative, puisque l'énergie interne est calculée en soustrayant l'énergie cinétique à l'énergie totale, l'énergie interne est donc mal approximée. De même la température étant calculée à partir de l'énergie interne par une loi d'état, la température est donc mal approximée. En revanche, ce phénomène n'est plus présent en activant les transferts de masse. En outre, en activant les transferts de masse, le profil de la vitesse présente une discontinuité de laquelle se propage à gauche et à droite le processus de cavitation chimique. On peut aussi noter que le pic visible dans le profil de la densité et aussi présent dans les profils de la température et de l'énergie interne.

Les résultats pour les deux modèles sont en parfaite cohérence entre eux. Comme illustré par la figure 4.22 comparant les profils de la densité pour différents maillages entre les modèles à quatre et à six équations, le modèle à six équations donne des résultats plus diffus que le modèle à quatre équations.

4.3.4 Cavitation de l'eau à haute vitesse

Notre dernier cas test 1D est un cas test de cavitation repris de [12]. Celui-ci présente la cavitation mécanique et chimique d'eau en raison d'un fort gradient de vitesse et est une version plus complexe du cas test précédent. L'état initial du domaine est décrit dans la table 4.6. En ce qui concerne les paramètres de l'équation d'état, nous utilisons les mêmes que pour le cas test 4.2. Les résultats sont visibles sur les figures 4.23 à 4.29 à t=1.5ms.

Une étude de convergence en maillage est tout d'abord présentée sur les figures 4.23 pour

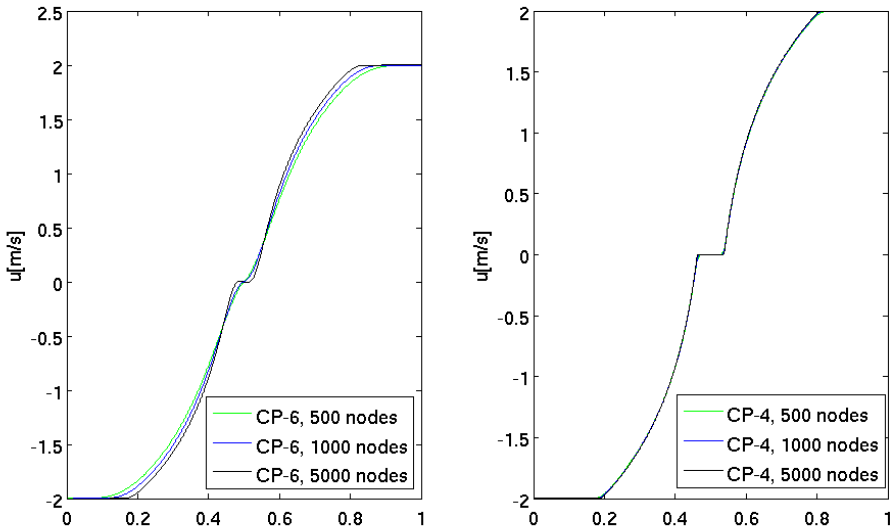


FIGURE 4.15 – Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

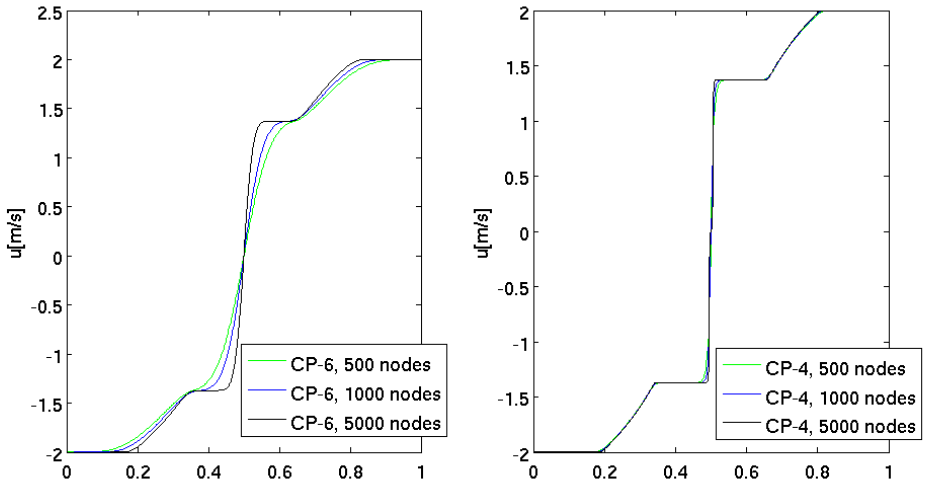


FIGURE 4.16 – Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

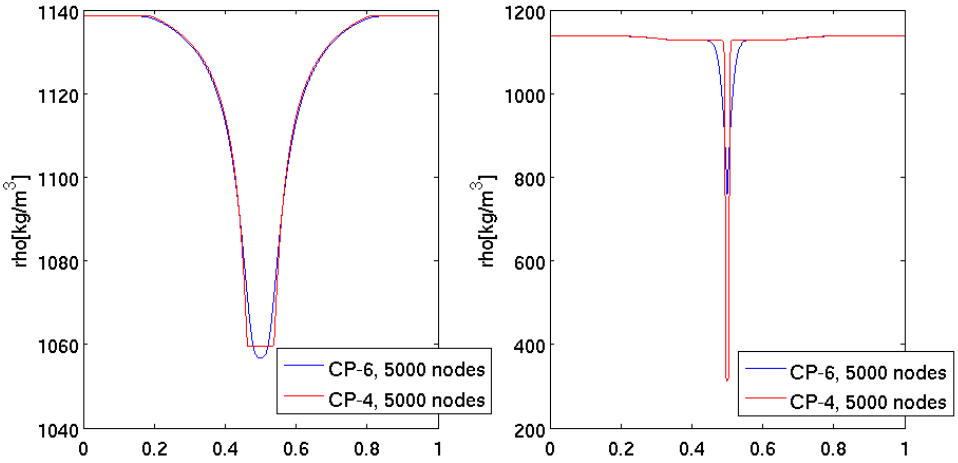


FIGURE 4.17 – Profil de la densité obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

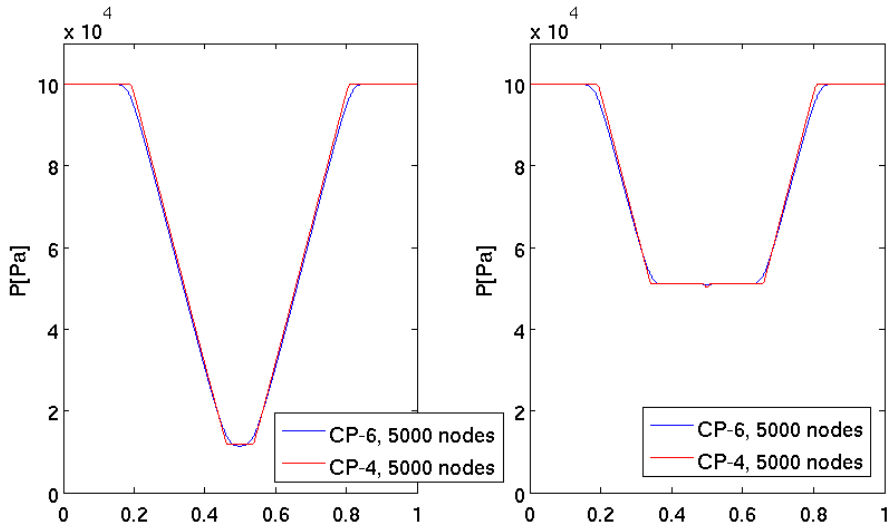


FIGURE 4.18 – Profil de la pression obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

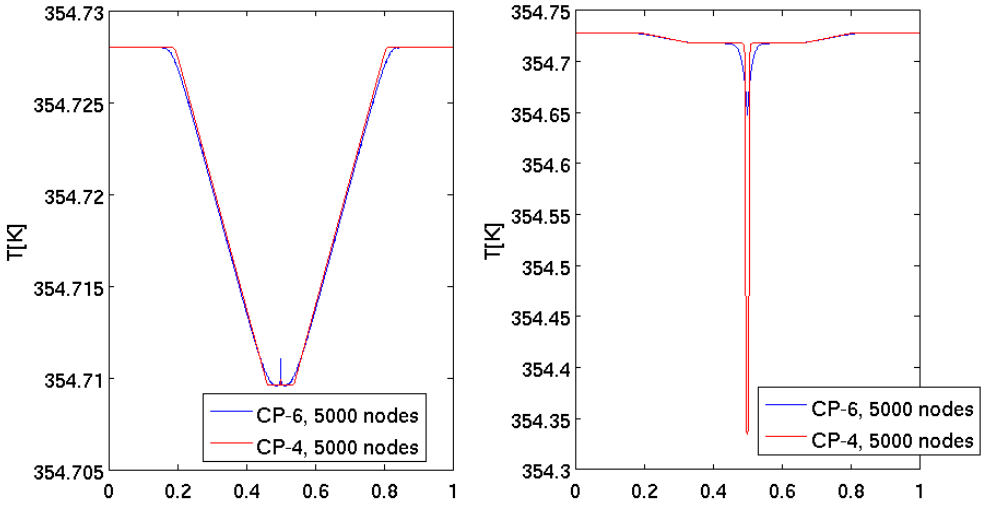


FIGURE 4.19 – Profil de la température obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

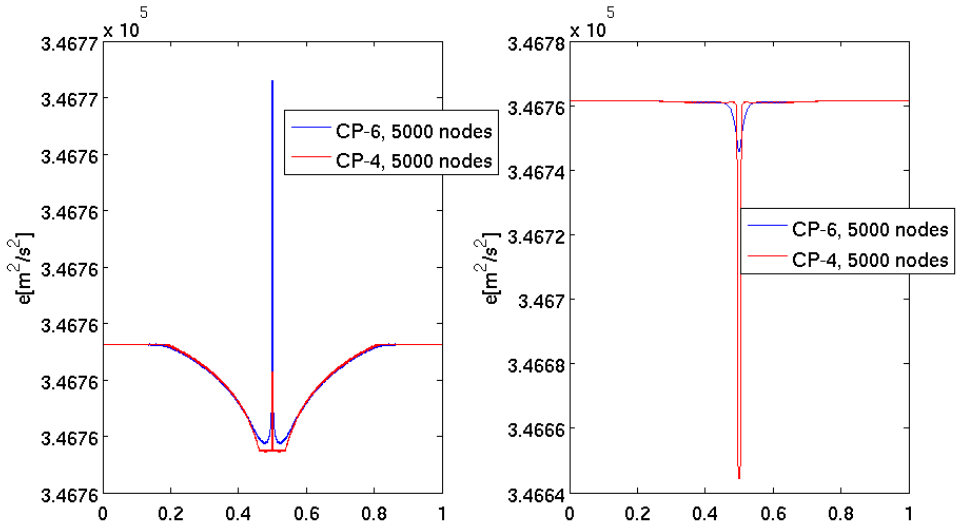


FIGURE 4.20 – Profil de l'énergie interne spécifique obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

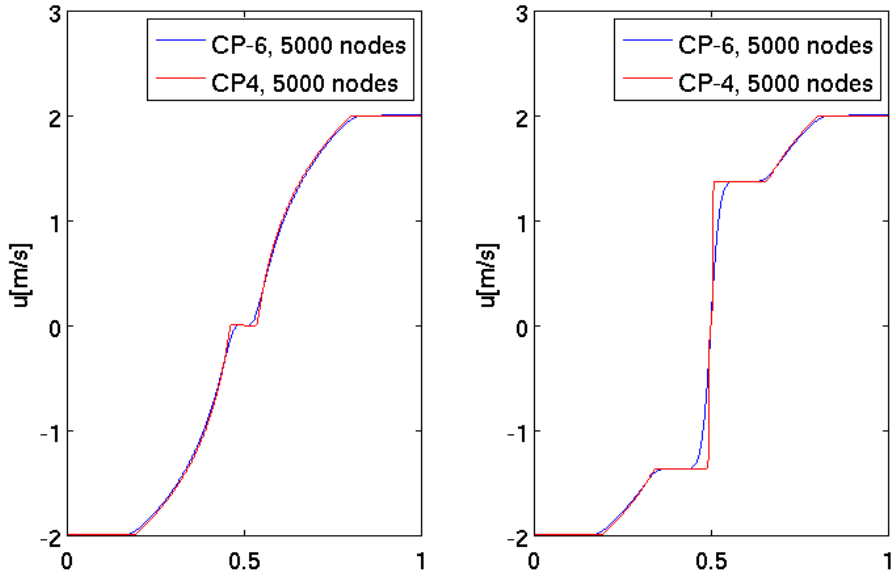


FIGURE 4.21 – Profil de la vitesse obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

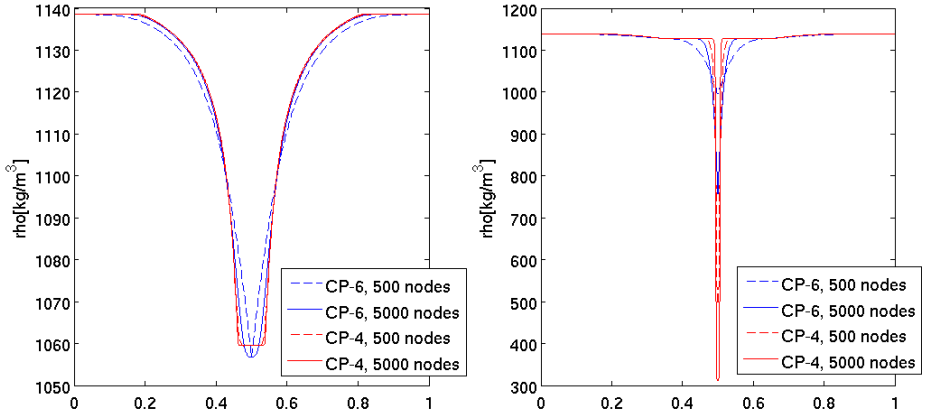


FIGURE 4.22 – Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la densité obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

	état à gauche $(0-0.5m)$	état à droite $(0.5-1m)$
P(pa)	1e5	1e5
u(m/s)	-2	2
α_l	0.99	0.99
T(K)	354.728	354.728
ρ_l	1150	1150
ρ_g	0.63	0.63

TABLE 4.5 – Paramètres initiaux utilisés pour la simulation d'une cavitation de l'eau à faible vitesse

le calcul sans transfert de masse et la figure 4.24 avec transfert de masse. Comme le montre la figure 4.23 pour ce cas test, dans le cas où nous n'activons pas de relaxation des potentiels chimiques, la résolution à l'ordre 2 du modèle à quatre équations n'est pas assez robuste pour résoudre le problème et nous avons dû réaliser alors la résolution à l'ordre 1. En revanche pour un maillage de 5000 nœuds le calcul a néanmoins autant convergé que le modèle à six équations comme le montre la figure 4.25. Cela vient du fait que la méthode des limiteurs tend à utiliser une méthode d'ordre 1 plus robuste pour capturer un choc ou une détente très forte. Les résultats pour un maillage de 5000 nœuds étant bien convergés nous utilisons par la suite ce maillage pour présenter la suite des résultats. Les figures suivantes comparent les résultats des modèles à six et quatre équations pour des résultats avec et sans transfert de masse.

En ce qui concerne les résultats sans transfert de masse, les profils de la densité (figure 4.26) et de la pression (figure 4.27) permettent de voir que la cavitation mécanique est propagée par deux détentes très fortes. Comme expliqué dans le cas test précédant (voir [99]), le profil de la température (figure 4.28) présente un pic non physique très important dû à des erreurs d'arrondi sur l'énergie interne. Cela provient d'erreurs d'arrondi sur le calcul de la vitesse. En effet, comme le montre la figure 4.25, contrairement à la figure 4.21 présentant le profil de la vitesse pour un problème de cavitation à faible vitesse, le profil de vitesse ne présente pas de zone de plateau constant entre les deux détentes.

En ce qui concerne les résultats avec transfert de masse, comme pour le cas de cavitation à faible vitesse les profils de la densité (figure 4.26), de la pression (figure 4.27) et de la température (figure 4.28) présentent un pic dû à la cavitation chimique mais cette fois beaucoup plus élevé. En revanche le profil de la vitesse (figure 4.25) est différent du profil du cas à faible vitesse (figure 4.21), en effet il n'y a pas de discontinuité à x=0.5m. Cela doit provenir de la cavitation chimique beaucoup plus intense, les deux plateaux séparés par la discontinuité à x=0.5m du cas à faible vitesse doivent se rejoindre dans le cas à haute vitesse.

Les deux résolutions avec les modèles à quatre et six équations convergent bien vers la même solution. La figure 4.29 compare les profils des vitesses obtenus avec les modèles à quatre et six équations pour différents maillages. Comme pour les cas tests précédants, le modèle à six équations donne des résultats plus diffus. Par contre pour ce cas test sans transfert de masse nous voyons que le modèle à six équations est plus robuste et peut donc converger plus vite pour des problèmes compliqués.

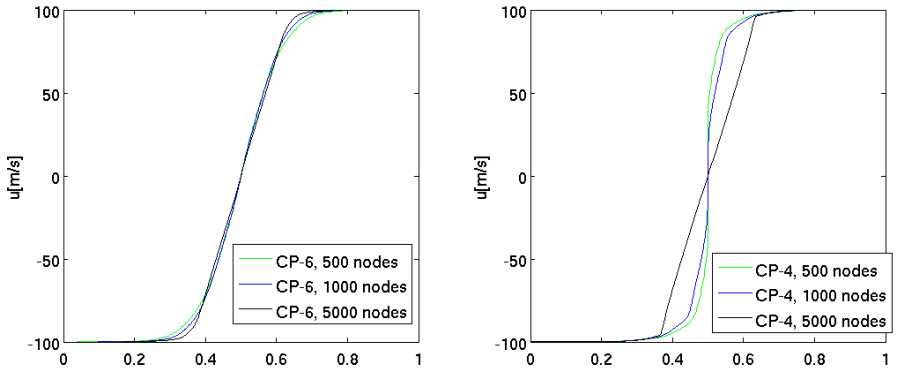


FIGURE 4.23 – Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

Remarque : Puisque la méthode d'ordre 2 des limiteurs passe à l'ordre 1 pour de fortes détentes, pour le maillage de 5000 nœuds les détentes sont capturées de manière proche entre le modèle à six équations et le modèle à quatre équations. En revanche, pour des zones continues puisque l'on peut utiliser la méthode des limiteurs le modèle à six équations donne alors des résultats à l'ordre 2 contrairement au modèle à quatre équations qui doit rester à l'ordre 1.

	état à gauche $(0-0.5m)$	état à droite $(0.5-1m)$
P(pa)	1e5	1e5
u(m/s)	-100	100
α_l	0.99	0.99
T(K)	354.728	354.728
ρ_l	1150	1150
ρ_g	0.63	0.63

TABLE 4.6 – Paramètres initiaux utilisés pour la simulation d'une cavitation de l'eau à haute vitesse

4.3.5 Bulle d'hélium heurtée par un choc

On considère ici un cas 2D : une bulle d'hélium heurtée par un choc (à Mach 1.5) dans l'air (le problème provient de [100]). La configuration du problème est illustrée dans la figure 4.30. Ce cas test ne comprend pas de transfert de masse et utilise une formulation de type gaz parfait facilement extensible à une loi d'état stiffened gas. Les paramètres stiffened gas utilisés sont présentés par la table 4.8 tandis que la configuration intiale du domaine est formulée dans la table 4.7. Aux parois droite et gauche on a imposé une condition de sortie, tandis que les parois hautes et basses sont considérées comme des murs avec une condition de non pénétration. Les résultats pour un maillage de 1200x360 mailles rectangulaires sont présentés pour différents temps par la figure 4.31 pour la densité ρ et sur la figure 4.32 pour la pression P à différents pas de temps. L'évolution de la densité permet d'observer les changements de formes de la bulle au

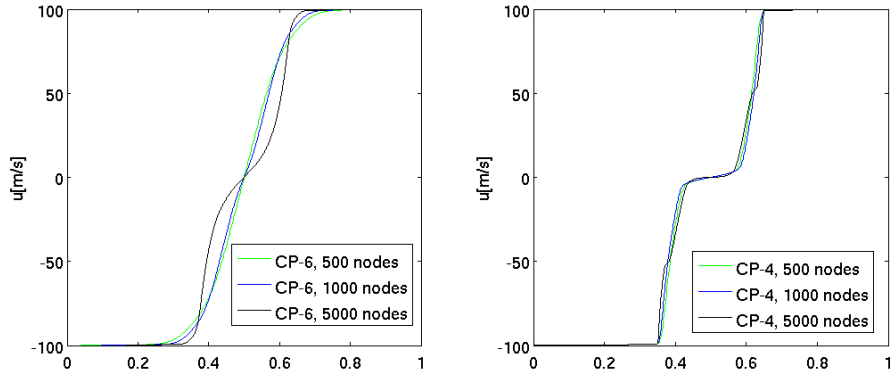


FIGURE 4.24 – Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations)

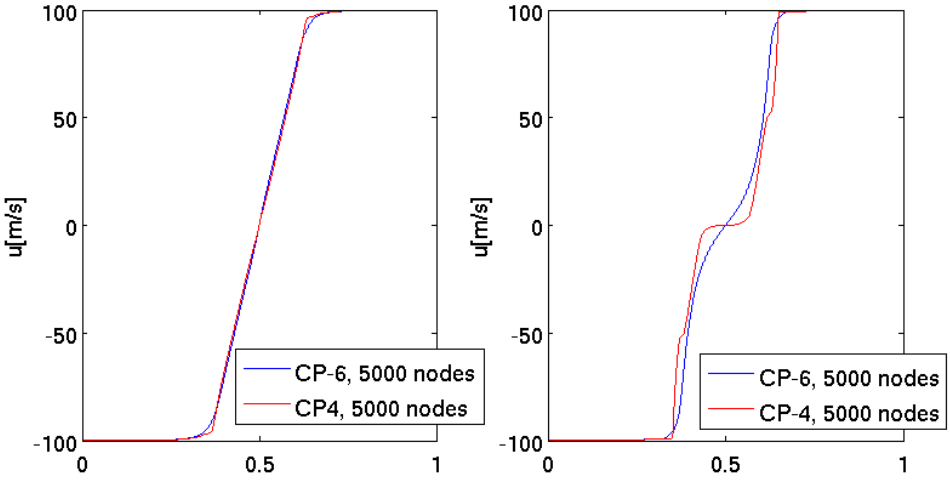


FIGURE 4.25 – Profil de la vitesse obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

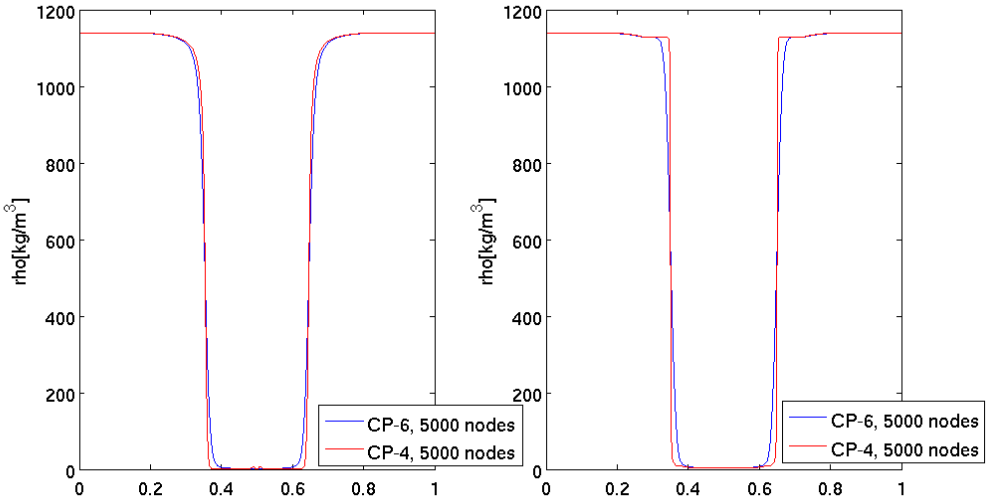


FIGURE 4.26 – Profil de la densité obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

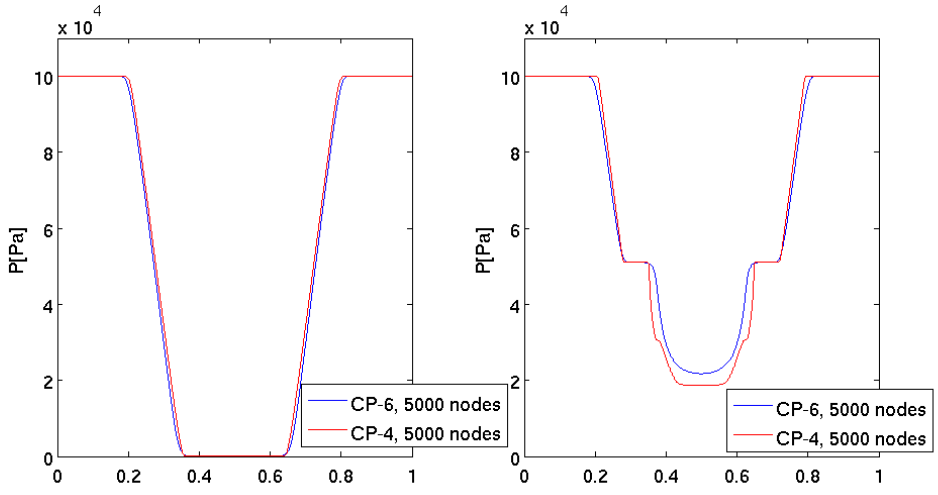


FIGURE 4.27 – Profil de la pression obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

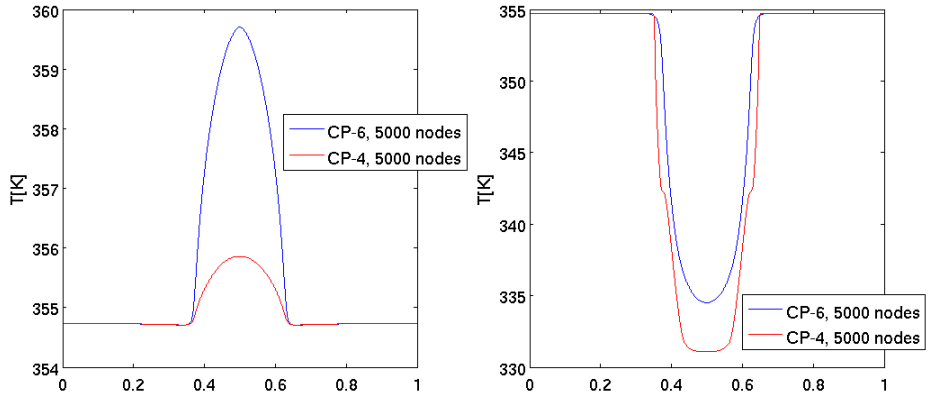


FIGURE 4.28 – Profil de la température obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

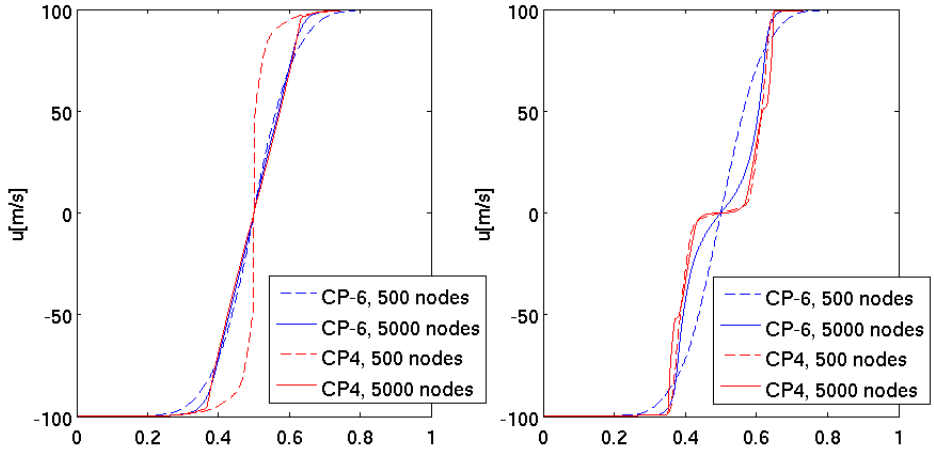


FIGURE 4.29 – Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la vitesse obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse)

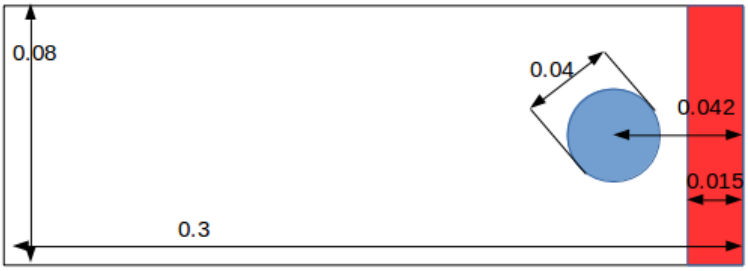


FIGURE 4.30 – Configuration du cas test 2D d'un choc heurtant une bulle d'hélium

cours du temps. En effet, tout d'abord la bulle se fragmente en deux bulles distinctes, puis un tourbillon se développe dans chacune des bulles. Pour ces figures, il n'y a pas de différences notables entre les résultats des modèles à quatre et à six équations.

	état à gauche (0-285m)	état à droite (0.285-0.3m)
P(pa)	1e5	2.4909e5
u	0	-230.285
ρ_{air}	1.29	2.4021
ρ_{he}	0.1667	0.286

TABLE 4.7 – Paramètres initiaux d'une bulle d'hélium heurtée par un choc

	air	hélium
cv	720.7	3102.24
γ	1.4	1.67
P_∞	0.	0.
q	0.	0.
q'	0.	0.

TABLE 4.8 – Paramètres d'état stiffened gas d'une bulle d'hélium heurtée par un choc

Afin de mieux comparer nos résultats entre les modèles à quatre et six équations nous nous concentrons sur les résultats finaux obtenus à t=577ms. Toujours pour un maillage de 1200x360 mailles, les figures 4.33 référencent les isolignes de la pression et de la densité, en outre les isolignes des deux modèles sont superposées afin de mieux les comparer. On voit bien que les isolignes sont presque identiques notamment pour la structure des bulles comme montré par les isolignes de la densité. En outre, on peut voir que les isolignes de la pression et la densité sont semblables. Il y a quelques différences puisque le calcul n'est pas totalement convergé.

En outre, nous avons tracé le profil de la densité de la bulle à x=0.125m pour des maillages de 1200x360, 900x270 et 600x180 mailles. Ces résultats sont visibles sur les figures 4.34 et sont adimensionnés. On voit bien sur ces figures la formation des tourbillons de la bulle, un tourbillon est totalement formé à y=0.38 et on voit se former un autre tourbillon à y=0.32 en raffinant le maillage. Finalement, la figure 4.35 compare les profils obtenus avec les modèles à quatre et six équations pour le maillage de 1200x360 rectangles. On voit que les résultats convergent bien vers la même solution. A y=0.38 les tourbillons se superposent, en revanche à y=0.32 on voit que pour le modèle à six équations le tourbillon se forme de manière plus diffusive.

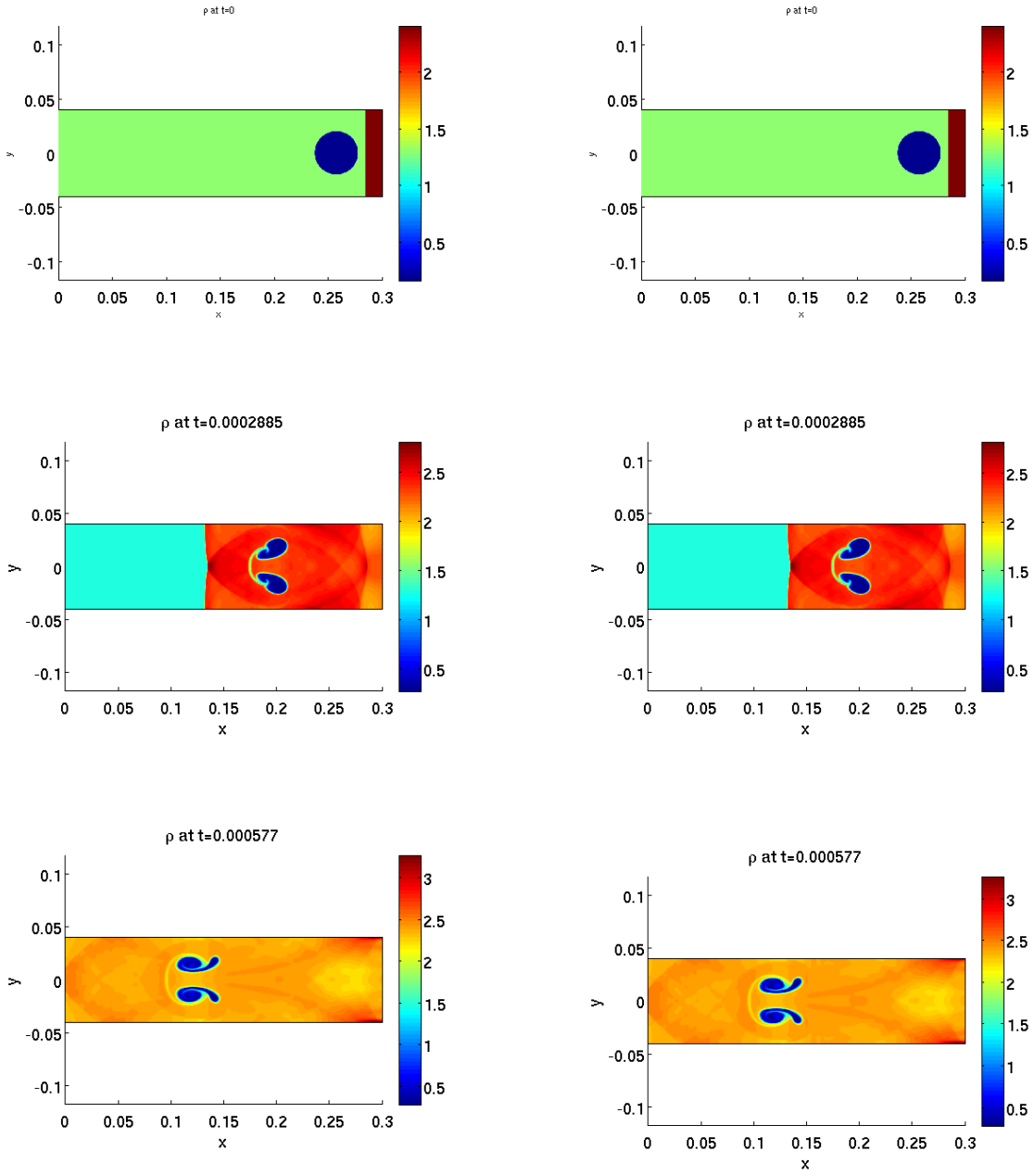


FIGURE 4.31 – Résultats de la densité ρ d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (quatre équations à gauche et six équations à droite)

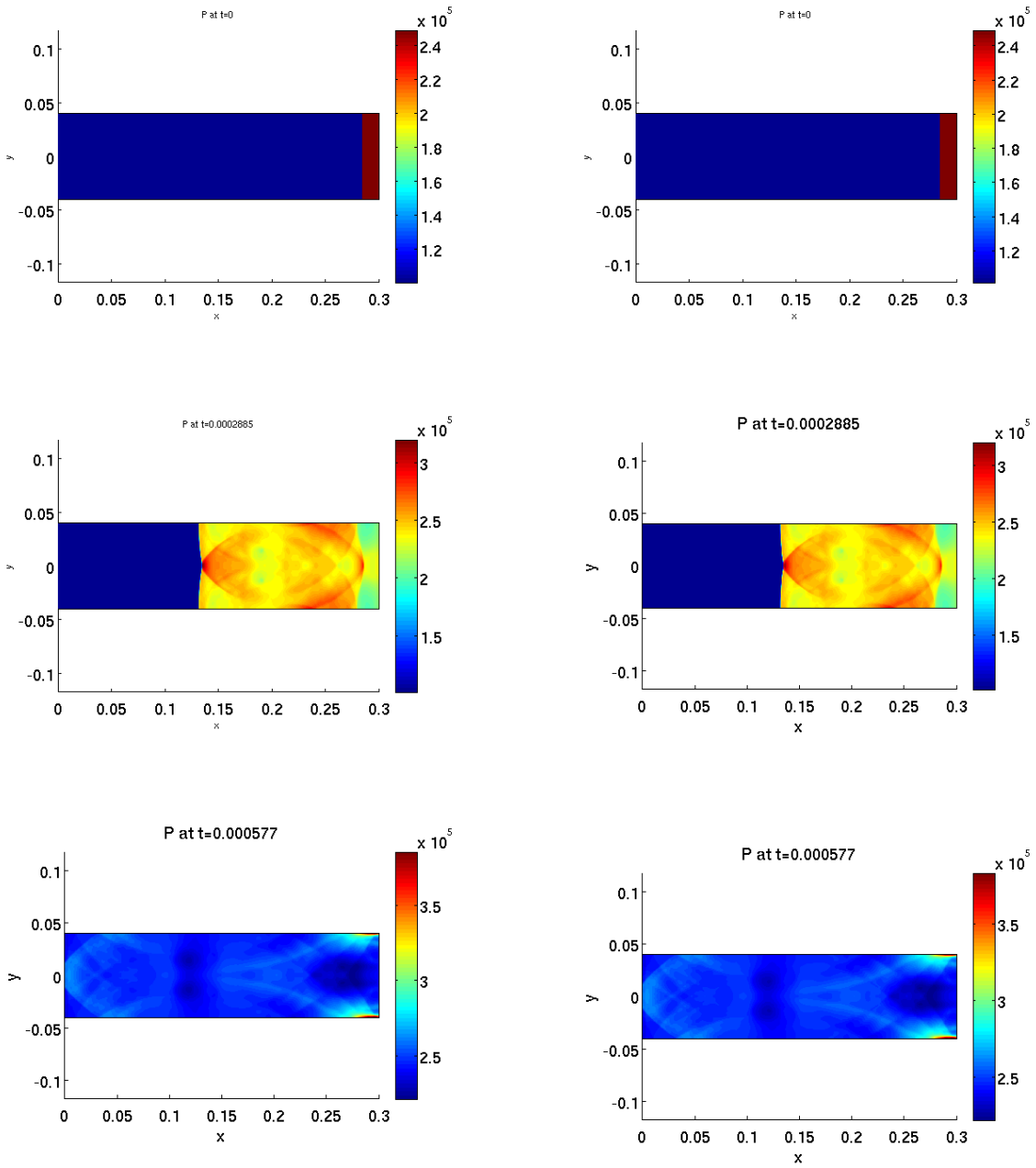
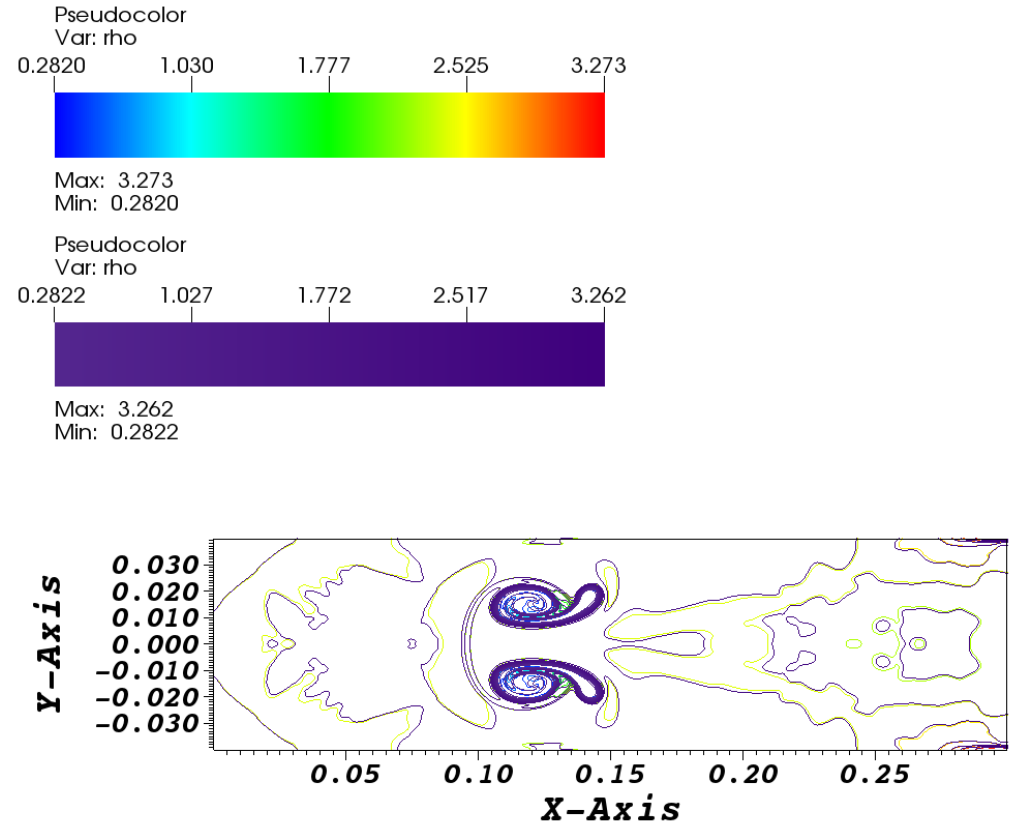


FIGURE 4.32 – Résultats de la pression P d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (quatre équations à gauche et six équations à droite)



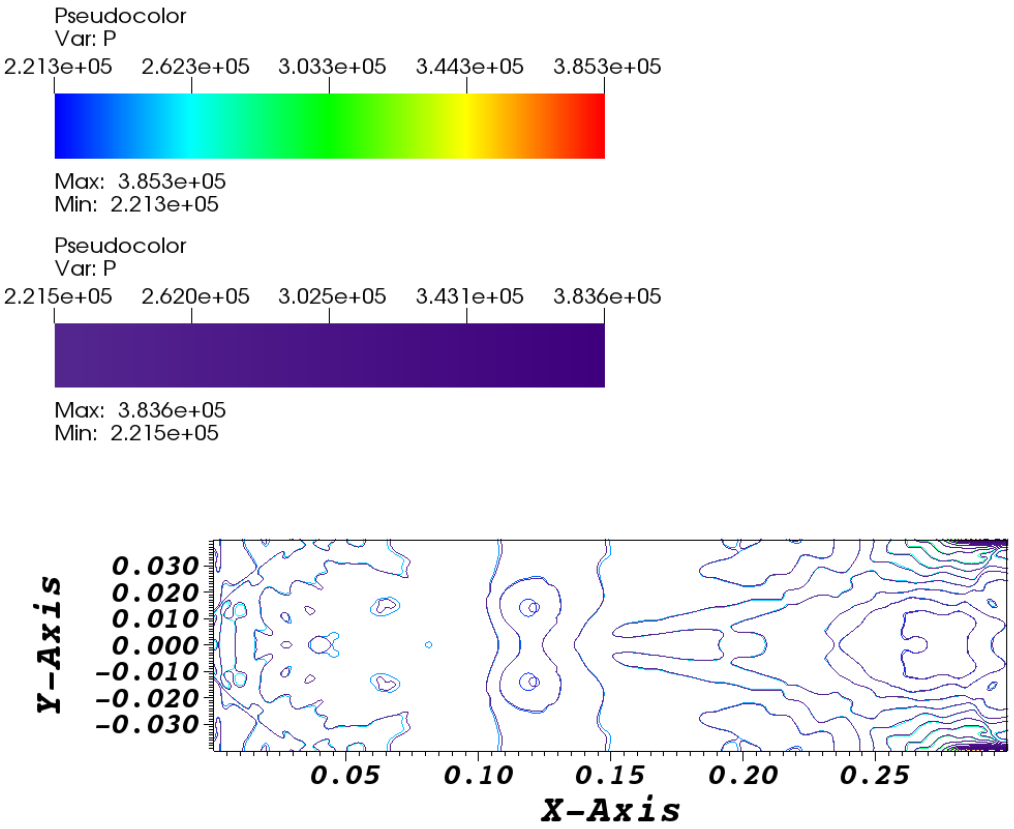


FIGURE 4.33 – Comparaison des isolignes (en haut : densité, en bas : pression) (isolignes violettes : 6 équations, isolignes multicolores : 4 équations)

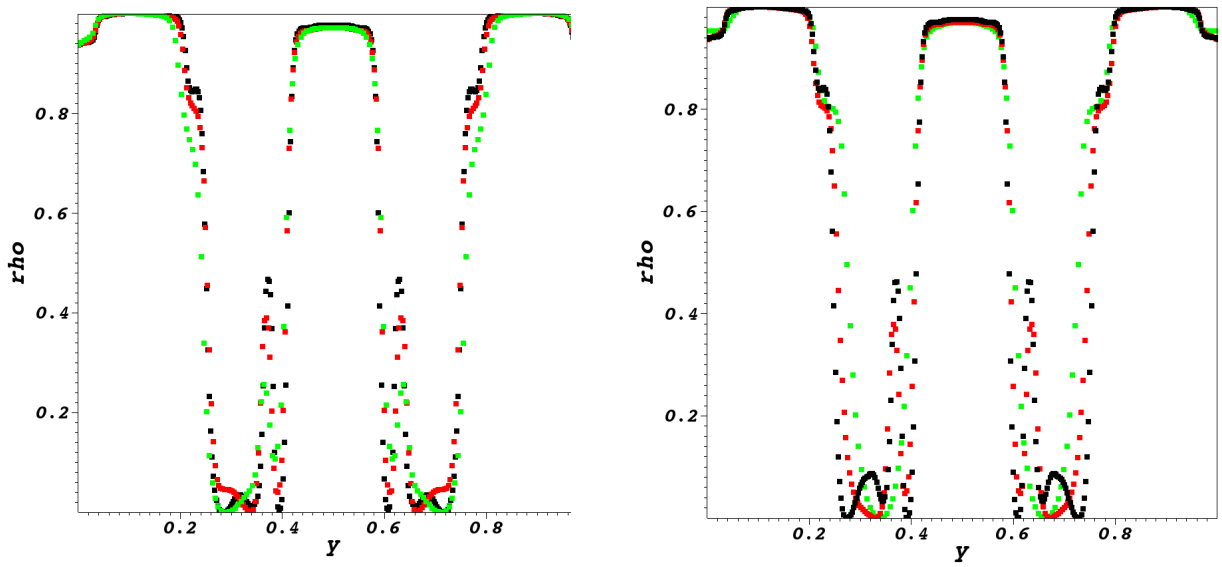


FIGURE 4.34 – Comparaison du profil de la densité à t=0.577ms et x=0.125m (gauche : quatre équations, droite : six équations)(noir : 1200x360,rouge : 900x270, vert : 600x180)

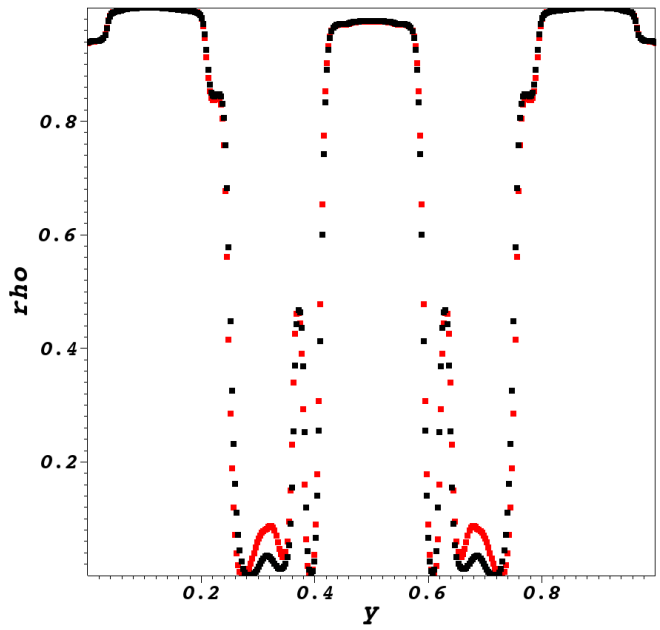


FIGURE 4.35 – Comparaison des profils de la densité à t=0.577ms et x=0.125m pour un maillage de 1200x3600 mailles (noir : quatre équations, rouge : six équations)

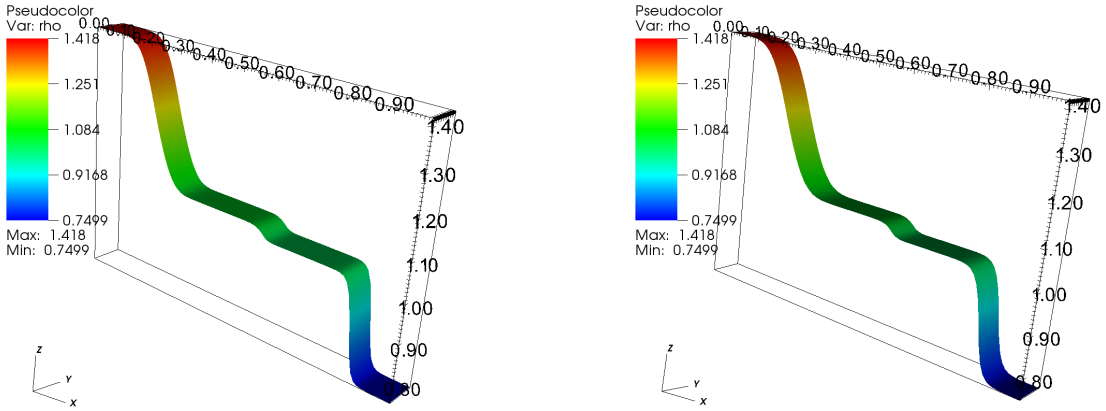


FIGURE 4.36 – Résultats de la densité ρ d'un tube à choc eau-vapeur en 2D (quatre équations à gauche et six équations à droite)

4.3.6 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel

Nous avons effectué un second cas test bidimensionnel, en reprenant le cas d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel mais avec une invariance selon l'axe y. Les conditions initiales et les paramètres de l'équation d'état sont les mêmes que celles décritent dans les tables 4.1 et 4.2. On impose sur toutes les frontières une condition de sortie. Le maillage utilisé est de 100 mailles sur l'axe x par 10 mailles sur l'axe y. Les résultats sont présentés par les figures 4.36 pour les contours de la densité pour les modèles à quatre et à six équations. Nous avons utilisé un maillage très grossier, afin d'observer les différences de résultats entre les modèles à quatre et six équations. En effet ce test est similaire au test 4.3.1 avec une invariance des variables selon l'axe y. On utilise par conséquent ce cas test afin de vérifier qu'il n'y a pas d'oscillations parasites selon l'axe y et observer si les résultats du modèle à six équations sont aussi plus diffus que ceux du modèle à quatre équations pour des problèmes en 2D. La figure 4.37 quant à elle présente une comparaison des profils de pression, de la densité et de la fraction massique de liquide et permet de voir nettement que le modèle à quatre équations est moins diffusif que le système à six équations. On peut rajouter que ces profils ne sont pas des coupes et reprennent donc tous les points selon l'axe y pour une valeur x, il n'y a donc pas d'oscillations intempestives selon y.

4.3.7 Commentaires sur les résultats

Comme déjà mentionné, le modèle à quatre équations est obtenu par une convergence asymptotique du modèle à six équations en considérant une relaxation des pressions et des températures instantanée. Cela a été vérifié numériquement par différents cas tests présentés dans cette étude qui ont montré que pour des cas tests comprenant une égalité initiale des pressions et des températures ainsi qu'une relaxation instantanée de ces quantités les résultats des modèles coïncident.

En outre, les résultats numériques obtenus avec le modèle à quatre équations donnent une meilleure représentation des chocs et des détentes à maillage égal. En revanche le modèle nu-

mérique à six équations est plus diffusif, par conséquent la résolution est donc plus robuste.

Globalement pour des problèmes demandant beaucoup de robustesse, le modèle à six équations semble plus adapté. Pour des problèmes demandant moins de robustesse, utiliser le modèle à quatre équations permet d'obtenir des résultats plus rapidement puisque moins complexe et moins diffusif. Le compromis est alors d'essayer d'utiliser le modèle avec le meilleur rapport robustesse/temps de calcul.

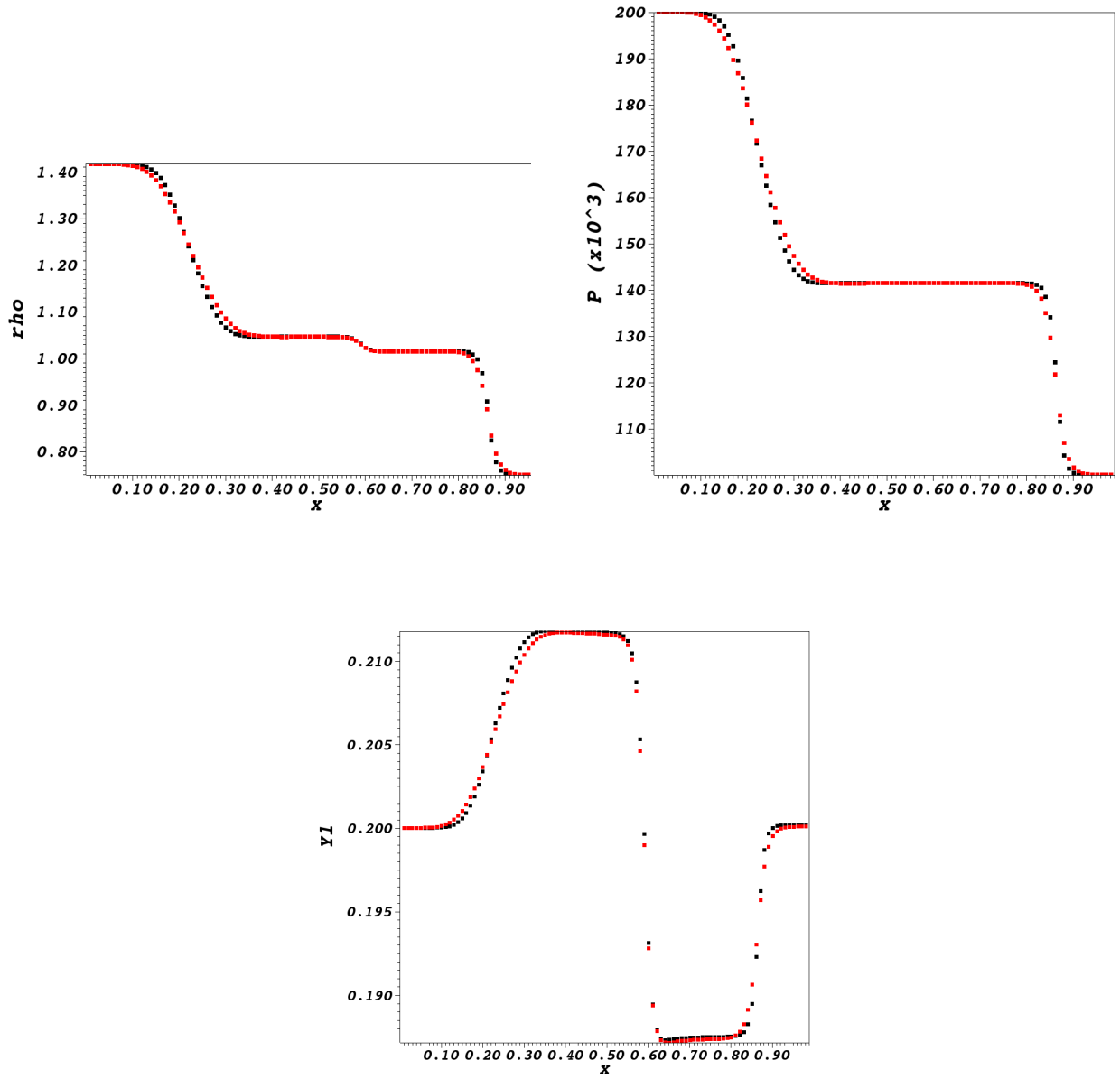


FIGURE 4.37 – Profil de la densité ρ, de la pression P et de la fraction massique de liquide Y_l d'un tube à choc eau-vapeur en 2D (quatre équations en noir et six équations en rouge)

Chapitre 5

Extension des méthodes aux résidus distribués aux écoulements diphasiques

5.1 Intérêts et objectifs

Dans ce chapitre, nous traitons l'extension des méthodes aux résidus distribués au modèle diphasique à quatre équations. Cela est un travail qui a été developpé en collaboration avec l'université de Zurich (le professeur Rémi Abgrall et le docteur Paola Bacigaluppi).

Au lieu d'opter pour une approche conservative, nous avons opté pour résoudre le problème sous forme non-conservative. Evidemment, comme bien connu depuis [62] l'utilisation d'une discrétisation non-conservative ne permet pas à un schéma de converger vers la bonne solution du problème. Cela vient du fait, que la solution converge vers une solution faible prenant en compte la viscosité numérique du schéma au lieu de la viscosité physique des équations. Une méthode très connue pour essayer de contourner ce problème est l'utilisation des schémas path-conservatifs développés par Parés [63]. Ceux-ci s'inspirent de la théorie des chemins développée par Dal Maso [101]. Malheureusement, il n'est pas possible même en partant de la formulation conservative de construire une méthode path-conservative permettant d'obtenir la solution recherchée (voir [64]).

Malgré les difficultés, utiliser une formulation non-conservative peut avoir de nombreux avantages. Par exemple si une équation d'état très complexe est utilisée, les variables telles que la pression ou l'énergie interne peuvent être mal approximées lors de la résolution avec une formulation conservative. En outre, d'un point de vue industriel, ce ne sont généralement pas les variables conservatives comme l'énergie totale ou la quantité de mouvement que l'on cherche à connaître mais les variables primitives comme la pression. Dans ce but, dans ce travail nous utilisons une approche innovante utilisant les travaux de Abgrall [68]. Ceux-ci présentent une approche simple se servant de la forme conservative du système. Celle-ci permet alors d'imposer la conservation des variables non-conservatives en utilisant une étape intermédiaire de calcul. Dans [68], l'approche a été utilisée pour résoudre des problèmes monodimensionnels avec les équations d'Euler. Dans ce travail cette approche est utilisée pour résoudre le modèle diphasique à quatre équations pour des problèmes monodimensionnels et bidimensionnels.

Ainsi le système que nous résolverons avec les méthodes aux résidus distribués n'est pas le système (1.7), mais le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial(\alpha_1\rho_1)}{\partial t} + \text{div}\,(\alpha_1\rho_1\overrightarrow{u}) = \Gamma, \\ \frac{\partial(\alpha_2\rho_2)}{\partial t} + \text{div}\,(\alpha_2\rho_2\overrightarrow{u}) = -\Gamma, \\ \frac{\partial(\rho\overrightarrow{u})}{\partial t} + \text{div}\,(\rho\overrightarrow{u}\otimes\overrightarrow{u} + PId) = 0, \\ \frac{\partial\varepsilon}{\partial t} + \overrightarrow{u}\cdot\nabla\varepsilon + (\varepsilon+P)\,\text{div}\,\overrightarrow{u} = 0, \end{cases} \tag{5.1}$$

réécrit sous forme non-conservative avec ε l'énergie interne totale volumique du mélange.

Afin de vérifier la bonne convergence des résultats, les calculs ont été effectués et comparés en parallèle avec le logiciel Clawpack afin de vérifier la validité des résultats.

Ainsi, pour débuter ce chapitre, nous commençons par présenter la méthode aux résidus distribués telle qu'elle a été appliquée dans ce travail. Pour cela, dans un premier temps nous présentons les schémas spatiaux et temporels utilisés, puis nous verrons comment la conservation est assurée lors de la résolution du système. Il s'en suivra la présentation de la méthode d'optimisation à postériori que nous avons utilisée. En effet, nous avons choisi d'utiliser la méthode d'optimisation "a posteriori" de [69] dérivée de l'algorithme d'optimisation de MOOD (voir [102], [72]) afin d'optimiser nos résultats. En effet, l'algorithme de MOOD permet d'appliquer le schéma optimal à chaque cellule du maillage. Dans un second temps, notre nouvelle méthode est comparée à la méthode de propagation des ondes pour de nombreux cas tests de la littérature validant la robustesse de la méthode. Enfin, après la validation de notre modèle nous appliquons celui-ci pour résoudre des problèmes dans des géométries complexes nécessitant une méthode de calcul en maillages non-structurés.

5.2 Résolution numérique avec la méthode aux résidus distribués

5.2.1 Schémas spatiaux

Il existe de nombreuses méthodes pour distribuer la fluctuation dans le cadre des méthodes aux résidus distribués. Comme pour la résolution effectuée avec la méthode de propagation des ondes nous utilisons une méthodologie de splitting (partie 4.2.1). Ainsi les présentations qui vont suivre concernent uniquement la résolution du système convectif, et les transferts de masse sont résolus de la même manière que dans la section 4.2.3.3. Nous allons présenter ici les schémas utilisés dans ce travail.

On commence par introduire le schéma de Galerkin formulé de la façon suivante :

$$\phi_i^{K,gal} = \int_{\partial K} \varphi_i F(\overrightarrow{q}).\overrightarrow{n}\, d\partial K - \int_K \nabla\varphi_i.F(\overrightarrow{q})dK. \tag{5.2}$$

L'inconvénient est que ce schéma est instable et afin d'obtenir un schéma stable il est nécessaire d'ajouter un terme de stabilisation. On peut par exemple nommer le terme de stabilisation permettant d'obtenir le schéma SUPG [103]. Dans notre cas, comme dans [59], nous utilisons le schéma de Galerkin avec le terme de stabilisation de saut utilisé dans [104]. Le schéma obtenu a donc la forme suivante :

$$\phi_i^{K,gal} = \int_{\partial K} \varphi_i F(\overrightarrow{q}).\overrightarrow{n}\, d\partial K - \int_K \nabla\varphi_i.F(\overrightarrow{q})dK + \sum_{e|i\in e} \theta_{jump} h_e^2 \int_e [\nabla \overrightarrow{q}_i].[\nabla\varphi_i] d\partial K, \tag{5.3}$$

où h_e est la longueur de l'arrête considérée et θ_{jump} est un paramètre à définir. La somme des termes de saut pour toutes les arrêtes d'un élément est nulle, ce qui permet de garder la conservation du problème. Le terme de saut s'applique à chaque arrête entre deux éléments (l'élément K et l'élément adjacent K^+). En outre les termes $[\nabla\psi]$ représentent le saut entre les variables entre les deux éléments et se calculent tels que $[\nabla\psi] = \nabla\psi|_K - \nabla\psi|_{K^+}$. Ce schéma est d'ordre élevé mais n'est pas monotone et traite mal les chocs.

Le second schéma considéré est le schéma de Lax-Friedrichs. En repartant du schéma de Galerkin (5.2), une autre méthode pour le rendre stable est d'ajouter un terme de diffusion $\alpha_K = max_{i\in K}(\rho_s(A(\overrightarrow{q}^i_K)))$, avec ρ_s le rayon spectral du nœud i dans l'élément K. On obtient alors le schéma de LxF :

$$\begin{cases} \phi_i^{K,lxf} = \int_{\partial K} \varphi_i F(\overrightarrow{q}).\overrightarrow{n}\, d\partial K - \int_K \nabla\varphi_i.F(\overrightarrow{q})dK + \alpha_K(\overrightarrow{q}_i - \overline{q}_i^K), \\ \overline{q}_i^K = \frac{1}{N_K}\sum_{i\in K} \overrightarrow{q}_i. \end{cases} \tag{5.4}$$

Ce schéma est monotone mais seulement d'ordre 1.

Maintenant que la fluctuation est calculée nous pouvons calculer le résidu de l'élément K Φ_i^K. Par la suite nous travaillons avec cette quantité.

Le dernier schéma que nous considérons est un schéma non-linéaire monotone et d'ordre élevé utilisant les techniques présentées dans la partie 3.1.3. Pour cela, suivant ce qui est fait dans [68], [48] et [59], nous définissons la matrice jacobienne dans la direction normale des

vitesses : $A_n = A(\overline{q})n_x + B(\overline{q})n_y$ en deux dimensions ($\overline{q}$ est la moyenne des variables $\overrightarrow{q}$ de l'élément K). Les jacobiens A et B sont respectivement les matrices jacobiennes en x et y des flux et le vecteur $\overrightarrow{n}$ est la normale unitaire dans la direction du champ des vitesses de l'écoulement.

En définissant les vecteurs propres de la matrice A_n à gauche l_ξ et à droite r_ξ, on projette alors le résidu de LxF dans ce nouvel espace soit :

$$\begin{cases} \Phi_i^{K,lxf,*} = \sum_\xi l_\xi \Phi_i^{K,lxf}, \\ \Phi^{K,*} = \sum_\xi l_\xi \Phi^K. \end{cases} \tag{5.5}$$

On cherche alors les fluctuations $\Phi_i^{K,l,*}$ telles que $\Phi_i^{K,l,*} = \beta_i^{K,l,*}\Phi^{K,*}$. Les coefficients $\beta_i^{K,l,*}$ sont alors calculés en utilisant la formule (3.15) soit :

$$\begin{gathered} \beta_i^{K,l,*} = \frac{max(0, \frac{\Phi_i^{K,lxf,*}}{\Phi^{K,*}})}{\sum_{j\in K} max(0, \frac{\Phi_j^{K,lxf,*}}{\Phi^{K,*}})}, \\ \Phi_i^{K,l,*} = \beta_i^{K,l,*}\Phi^{K,*}. \end{gathered} \tag{5.6}$$

En théorie ce schéma est monotone et d'ordre élevé. Néanmoins en présence de chocs des problèmes peuvent subvenir. Il est alors plus prudent d'appliquer le schéma combiné (3.14). On définit alors le paramètre de continuité θ_s selon l'équation suivante :

$$\theta_s = \frac{|\Phi^{K,*}|}{\sum_{j\in K} |\Phi_j^{K,lxf,*}|}. \tag{5.7}$$

On peut alors déterminer le résidu projeté donné par l'équation suivante :

$$\Phi_i^{K,psi_g,*} = (1-\theta_s)\Phi_i^{K,l,*} + \theta_s \Phi_i^{K,lxf,*}. \tag{5.8}$$

Finalement, il reste à projeter ce nouveau résidu dans l'espace discrétisé initial. On obtient alors le résidu $psi - galerkin$ défini par l'équation suivante :

$$\Phi_i^{K,psi_g} = \sum_\xi r_\xi \Phi_i^{K,psi_g,*}. \tag{5.9}$$

Ce schéma est monotone et d'ordre élevé.

Remarque : afin de calculer le résidu de l'énergie interne nous ne pouvons pas directement appliquer ces formulations. Ainsi pour le schéma de Galerkin nous utilisons comme dans [68], la formulation suivante :

$$\phi_i^K(\varepsilon) = \int_K \varphi_i(\overline{u}.\nabla\varepsilon + \overline{(\varepsilon+P)}\nabla.\overrightarrow{u})d\Omega_h. \tag{5.10}$$

Les termes d'advection u et $\varepsilon + P$ sont approximés en prenant leurs valeurs moyennes sur l'élément K : $\overline{u}$ et $\overline{\varepsilon+P}$.

Remarque : Les flux $F(\overrightarrow{q})$ sont approximés par la relation $F(\overrightarrow{q}) = \sum_{i\in K} F(\overrightarrow{q}_i)\varphi_i$

Les autres schémas suivent en ajoutant les termes de saut et de diffusion. Nous présentons un peu plus tard la manière dont la conservation du système a été assurée.

5.2.2 Schéma temporel

En ce qui concerne la discrétisation temporelle du problème nous avons utilisé la méthode présentée dans le chapitre 3.2.2. Dans le cas des calculs qui vont être présentés nous avons utilisé la formulation appelée Runge-Kutta 2 dans [57]. Comme présenté dans cet article celle-ci permet d'obtenir une convergence en temps à l'ordre 2 en utilisant des polynômes de Lagrange de degré 1 et un schéma spatial préservant la linéarité. Nous rappelons rapidement cette méthode.

Cela est présenté par l'algorithme (1). On applique alors les actions suivantes pour tous les nœuds i du domaine :

Algorithm 2 Calculate q_i^{n+1}

Require: $q_i^0 = q_i^n, r = 0$

while $r < 2$ **do**

$q_i^{r+1} = q_i^r - \frac{dt}{|C_i|}\left(\sum_{K|i\in K}(\frac{q_i^r - q_i^n}{dt} + \phi_i^K(\frac{q_i^n+q_i^r}{2}))\right) = q_i^r - \frac{dt}{|C_i|}\left(\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\frac{q_i^n+q_i^r}{2})\right)$

$r = r+1$

end while

return $q_i^{n+1} = q_i^2$

Pour calculer les fluctuations ϕ_i^K on utilise les schémas spatiaux que nous avons présentés dans la partie précédente.

5.2.3 Comment assurer la conservation

Cette section illustre comment l'équation non-conservative sur l'énergie interne du système (5.1) a été traitée. En effet, tel quel, en appliquant directement ces méthodes, la solution convergerait vers une mauvaise solution faible [62]. Pour contourner cela nous avons utilisé une méthode originale introduite dans [68] pour les équations d'Euler se servant de la forme conservative (1.7) afin d'imposer la conservation des variables non-conservatives. Cette section est donc consacrée à la présentation de cette méthode et son application à nos problèmes.

Pour commencer nous rappelons que notre schéma s'écrit sous la forme (en omettant pour l'instant le terme de saut et les termes de conditions aux limites) :

$$\begin{cases} (\alpha_1\rho_1)^{n+1} - (\alpha_1\rho_1)^n = \Delta(\alpha_1\rho_1) = \frac{dt}{|C_i|}\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\alpha_1\rho_1), \\ (\alpha_2\rho_2)^{n+1} - (\alpha_2\rho_2)^n = \Delta(\alpha_2\rho_2) = \frac{dt}{|C_i|}\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\alpha_2\rho_2), \\ (\rho\overrightarrow{u})^{n+1} - (\rho\overrightarrow{u})^n = \Delta(\rho\overrightarrow{u}) = \frac{dt}{|C_i|}\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\rho\overrightarrow{u}), \\ (\varepsilon)^{n+1} - (\varepsilon)^n = \Delta(\varepsilon) = \frac{dt}{|C_i|}\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\varepsilon). \end{cases} \tag{5.11}$$

En outre, comme introduit dans [68], on peut facilement trouver la relation suivante :

$$\Delta(E) = \Delta(\varepsilon) + \frac{\overrightarrow{u}^{n+1} + \overrightarrow{u}^n}{2}.\Delta(\rho\overrightarrow{u}) - \frac{\overrightarrow{u}^{n+1}.\overrightarrow{u}^n}{2}(\Delta(\alpha_1\rho_1) + \Delta(\alpha_2\rho_2)), \tag{5.12}$$

reliant les variations temporelles entre les temps t^n et t^{n+1} de ces différentes variables avec la variation de l'énergie totale.

En utilisant le système (5.11), on trouve alors la relation entre les résidus :

$$\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(E)=\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\varepsilon)+\sum_{K|i\in K}\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}+\overrightarrow{u}_i^n}{2}.\Phi_i^K(\rho\overrightarrow{u})-\sum_{K|i\in K}(\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}.\overrightarrow{u}_i^n}{2}(\Phi_i^K(\alpha_1\rho_1)+\Phi_i^K(\alpha_2\rho_2))). \tag{5.13}$$

Puisque le terme de somme est commun à chacun des termes, on peut choisir d'imposer l'égalité à chacun des nœuds i soit :

$$\Phi_i^K(E)=\Phi_i^K(\varepsilon)+\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}+\overrightarrow{u}_i^n}{2}.\Phi_i^K(\rho\overrightarrow{u})-(\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}.\overrightarrow{u}_i^n}{2}(\Phi_i^K(\alpha_1\rho_1)+\Phi_i^K(\alpha_2\rho_2))). \tag{5.14}$$

Finalement, on somme alors ces égalités sur les éléments K afin d'obtenir l'égalité :

$$\Phi^K(E)=\Phi^K(\varepsilon)+\sum_{i\in K}\{\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}+\overrightarrow{u}_i^n}{2}.\Phi_i^K(\rho\overrightarrow{u})-(\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}.\overrightarrow{u}_i^n}{2}(\Phi_i^K(\alpha_1\rho_1)+\Phi_i^K(\alpha_2\rho_2)))\}, \tag{5.15}$$

reliant les résidus des énergies internes aux résidus des énergies totales. L'idée est alors d'utiliser cette relation pour imposer la conservation de l'énergie totale en résolvant le système sous forme conservative.

En calculant alors le résidu total sur l'énergie totale : $\Phi^E=(\int_K\varphi_i\frac{E^{n+1}-E^n}{dt}+\int_K\varphi_i\nabla f(E^n))$, il est alors possible d'appliquer un terme de correction permettant d'assurer la conservation de l'énergie totale. Pour ce faire on introduit le résidu corrigé $\widetilde{\Phi^K}(\varepsilon)=\Phi^K(\varepsilon)+r_t$ avec r_t le terme de correction que nous voulons déterminer et $\Phi^K(\varepsilon)$ le résidu discrétisé de l'énergie totale. En introduisant ce nouveau terme dans (5.15) on obtient alors le terme de correction suivant :

$$r_t=\Phi^K(E)-[\Phi^K(\varepsilon)+\sum_{i\in K}\{\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}+\overrightarrow{u}_i^n}{2}.\Phi_i^K(\rho\overrightarrow{u})-(\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}.\overrightarrow{u}_i^n}{2}(\Phi_i^K(\alpha_1\rho_1)+\Phi_i^K(\alpha_2\rho_2)))\}]. \tag{5.16}$$

Finalement, nous décidons arbitrairement de redistribuer le terme de manière égale à chaque nœud :

$$r_i=\frac{r_t}{N_K}\ N_K \text{ est le nombre de sommets de l'élément.} \tag{5.17}$$

On obtient alors les résidus distribués :

$$\widetilde{\Phi_i^K}(\varepsilon)=\Phi_i^K(\varepsilon)+r_i. \tag{5.18}$$

Remarque : ici nous n'avons pas considéré le terme de saut et les conditions aux limites dans ce développement. Il suffit en fait de réécrire la relation (5.13) en remplaçant les $\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K$ par $\sum_{K|i\in K}\Phi_i^K(\text{schéma})+\sum_{e|i\in e}\Phi_i^e(\text{saut})+\sum_{e\in\partial K|i\in\Gamma}\Phi_i^e(\text{CL})$. De la même manière ces termes peuvent être traités comme pour l'étape (5.14), et donc être égalisés un par un. Puis en sommant les termes du schéma sur l'élément K on obtient l'expression (5.15). En sommant les termes de saut sur un élément (sachant que la somme des sauts de l'énergie totale vaut 0) on obtient la relation :

$$0 = \sum_{e\in K}\sum_{i\in e}\Phi_i^e(\varepsilon)(\text{saut}) + \sum_{e\in K}\sum_{i\in e}\{\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}+\overrightarrow{u}_i^n}{2}.\Phi_i^e(\rho\overrightarrow{u})(\text{saut}) - (\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}.\overrightarrow{u}_i^n}{2}\Phi_i^e((\alpha_1\rho_1)(\text{saut})+\Phi_i^e(\alpha_2\rho_2))(\text{saut}))\}. \tag{5.19}$$

Pour les conditions aux limites, on somme sur les nœuds de la paroi et on obtient alors la relation (5.20) (Pour ce dernier terme plusieurs approches ont été testées, nous avons choisi de poser $\overbrace{\Phi_i^e}(\varepsilon)(\text{CL}) = r_i$ qui donne alors les meilleurs résultats) :

$$\Phi^e(E)(\text{CL}) = \Phi^e(\varepsilon)(\text{CL}) + \sum_{i\in e\in\Gamma\cap\partial K}\{\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}+\overrightarrow{u}_i^n}{2}.\Phi_i^e(\rho\overrightarrow{u})(\text{CL}) - (\frac{\overrightarrow{u}_i^{n+1}.\overrightarrow{u}_i^n}{2}\Phi_i^e((\alpha_1\rho_1)(\text{CL})+\Phi_i^e(\alpha_2\rho_2))(\text{CL}))\}. \tag{5.20}$$

Remarque 2 : pour calculer les résidus aux temps t^{n+1}, on applique dans un premier temps la résolution aux variables conservatives, puis on calcule ensuite le résidu de l'énergie interne et la correction. La vitesse u^{n+1} utilisée est obtenue après avoir appliqué les termes du schéma, de saut et de la condition aux limites. Ainsi comme dans [105], les conditions aux limites sont appliquées à chaque pas de temps et correction ce qui ne dégrade pas la convergence du problème.

5.2.4 Algorithme d'optimisation à postériori

5.2.4.1 Principe de l'algorithme

Comme déjà annoncé, dans ce travail nous avons réutilisé la méthode de [69]. Celle-ci est dérivée de la méthode d'optimisation de MOOD ([102], [72]). Ainsi dans cette section nous allons présenter le principe et l'intérêt de cet algorithme.

Le schéma de Galerkin est d'ordre élevé et est très précis pour les solutions continues mais est peu robuste et performant pour capturer les solutions présentant des chocs. Le schéma de Lax-Friedrichs quant à lui est peu précis pour les solutions continues mais est très robuste et permet de bien capturer les chocs. En raison du théorème de Godunov il n'est pas possible de construire un schéma à la fois d'ordre élevé et monotone qui soit linéaire. Pour contourner cette restriction, il est courant d'avoir recours à des schémas combinant un schéma monotone et un schéma d'ordre élevé avec un paramètre qui mesure la continuité du problème permettant d'ajuster la contribution des schémas selon que la solution locale est continue ou présente un choc (cette méthode est utilisée pour construire les schémas (2.13) et (3.14)). Le schéma ainsi construit est alors efficace sur toutes les zones du problème, en revanche le schéma ne peut jamais être optimal.

L'idée derrière l'algorithme de MOOD est de considérer plusieurs schémas, certains d'ordre élevé mais peu robustes et d'autres monotones et plus robustes mais d'ordre faible. On cherche alors à utiliser le schéma optimal selon la situation.

Pour ce faire on suit alors la procédure suivante :

— On considère les 3 schémas suivants : Galerkin, psi-Galerkin, Lax-Friedrichs

— On calcule les résultats au temps suivant en utilisant le schéma de Galerkin

— Pour chaque cellule du problème :
— On soumet la solution obtenue à une série de critères permettant de vérifier la viabilité de la solution
— Si la solution est validée on garde la solution, en revanche si la solution ne valide pas les critères :
— On repart de la solution au temps initial puis on refait le calcul avec le schéma psi-Galerkin moins précis mais plus robuste
— On soumet une nouvelle fois la solution aux critères de détection, si la solution est validée on garde la solution, si la solution n'est pas validée on utilise alors le schéma de Lax-Friedrichs afin d'assurer assez de robustesse pour que la résolution se déroule sans encombre

Le schéma de Lax-Friedrichs est un schéma parachute que l'on considère assez robuste pour assurer le bon déroulement du calcul. Les méthodes utilisant un paramètre de continuité pour combiner deux schémas sont des méthodes à priori utilisant les résultats aux temps déjà connus. Il est alors nécessaire que le schéma soit assez diffusif pour fonctionner en toutes circonstances d'où une perte de précision. La méthode de MOOD quant à elle est une méthode utilisant les résultats à postériori utilisant les résultats après la résolution numérique. On utilise alors un schéma très précis sans se soucier de la robustesse. Puis des critères de détection permettent de vérifier la bonne convergence de la résolution. En cas de problème, on utilise une méthode plus robuste. Cela permet alors d'utiliser le meilleur schéma à chaque cellule du maillage.

5.2.4.2 Critères de détection

L'efficacité de l'algorithme de MOOD provient notamment des critères de détection utilisés pour déterminer les cellules déficientes. Ceux-ci sont basés sur des conditions physiques et numériques. Si ces conditions ne sont pas respectées alors on utilise un schéma plus robuste. Cela se traduit par l'espace $\mathscr{B}$ (5.21) :

$$\mathscr{B} = \{K \in \Omega_h, \text{ s.t. } (\mathrm{PAD}_K \mathrm{CAD}_K \mathrm{NAD}_K = 1) \setminus (\mathrm{P}_K = 1)\}. \tag{5.21}$$

Nous allons définir chacun de ces critères. Mais tout d'abord citons les variables sur lesquelles les procédures de détection sont appliquées (nous invitons le lecteur à consulter [69] pour une meilleure compréhension des critères). Nous avons choisi les densités partielles $\alpha_1\rho_1$ et $\alpha_2\rho_2$ (dans [69] la variable considérée était la densité ρ, dans notre cas diphasique cela s'étend naturellement aux densités partielles).

— Le premier critère est le critère d'admissibilité physique PAD_K vérifiant que la solution respecte la physique, dans le cas des densités partielles et de l'énergie interne celles-ci doivent être supérieures à 0 (sinon on utilise directement le schéma parachute) :

$$\mathrm{PAD}_K = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \forall i \in K \cap k = 1,2, \ (\alpha_k\rho_k)_i^{n+1} < 0 \text{ ou } (\varepsilon)_i^{n+1} < 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{5.22}$$

— Le second est le critère d'admissibilité numérique, on vérifie que la résolution n'explose pas et ne donne pas de NaN (Not a Number) ou de valeur infinie (sinon on utilise

directement le schéma parachute) :

$$\mathrm{CAD}_K = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \exists i \in K \cap k = 1,2, \ ((\alpha_k\rho_k)_i^{n+1}, (\rho u)_i^{n+1}, (\varepsilon)_i^{n+1}) = \mathrm{NaN} \\ & \text{ou} \quad ((\alpha_k\rho_k)_i^{n+1}, (\rho u)_i^{n+1}, (\varepsilon)_i^{n+1}) = \mathrm{Inf}, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{5.23}$$

Avant de passer aux autres critères nous introduisons les quantités M^n et m^n (5.24) représentant les quantités maxima et minima des nœuds des cellules entourant la cellule K :

$$M^n = \max_{K' \in \mathscr{V}(K), i \in K'} ((\alpha_k\rho_k)_i^n), \qquad m^n = \min_{K' \in \mathscr{V}(K), i \in K'} ((\alpha_k\rho_k)_i^n). \tag{5.24}$$

— Le troisième critère est la détection des plateaux, en effet si la solution est constante on considère qu'il ne peut pas se produire d'oscillations intempestives et on économise le coût de calcul des tests en validant immédiatement les résultats :

$$\mathrm{P}_K = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad \exists i \in K, \quad |M^n - m^n| \geq |K|^3, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{5.25}$$

— Finalement il nous reste le critère de détection numérique, ce dernier vérifie qu'il n'y a pas d'oscillations intempestives durant le calcul, et il nécessite de déterminer deux critères :

$$\mathrm{NAD}_K = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad \mathrm{DMP}_K = 1 \text{ et } \mathrm{SE}_K = 1 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \tag{5.26}$$

1. Le principe du maximum discret, au cours de la résolution d'un pas de temps, la valeur d'un nœud ne peut pas dépasser les valeurs des nœuds l'entourant. Si cela n'est pas le cas une oscillation intempestive se développe et on utilise alors un schéma plus robuste :

$$\mathrm{DMP}_K = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad m^n < (\alpha_k\rho_k)_i^{n+1} < M^n \\ 1 & \text{sinon,} \end{cases} \tag{5.27}$$

2. Malheureusement, ce critère s'avère aussi vrai pour des extrema physiques, dans ce cas nous ne devons pas ajouter de diffusion sous peine de dégrader les extrema. On utilise pour cela le critère de régularité d'extrema SE. Dans [69] deux approches sont comparées, l'approche CSE ([72]) et l'approche LSE ([106]), la seconde étant la plus efficace nous réutilisons celle-ci.

Tout d'abord nous introduisons les dérivées spatiales moyennes sur l'élément K :

$$\overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_K^{n+1} = \frac{1}{N_K} \sum_{i \in K} \partial_x(\alpha_k\rho_k)_i^{n+1}, \qquad \overline{\partial_{xx}(\alpha_k\rho_k)}_K^{n+1} = \frac{1}{N_K} \sum_{i \in K} \partial_{xx}(\alpha_k\rho_k)_i^{n+1}. \tag{5.28}$$

On définit la variation de $\alpha_k\rho_k$ par un développement de Taylor d'ordre 2 sur l'arête e_j :

$$\overline{\delta(\alpha_k\rho_k)}_{e,j}^{n+1} = \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_K^{n+1} + (x_j - x_0)\overline{\partial_{xx}(\alpha_k\rho_k)}_K^{n+1}. \tag{5.29}$$

x_0 est le centre de gravité de l'élément K et x_j est le centre de l'arête e_j. En outre on définit les valeurs min et max $(\alpha_k\rho_k)_{min,e_j} = min(\overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_{K'}^{n+1}, \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_K^{n+1})$ et $(\alpha_k\rho_k)_{max,e_j} = max(\overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_{K'}^{n+1}, \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_K^{n+1})$ entre l'élément K et l'élément adjacent partageant l'arête e_j.

Le critère de régularité linéarisé (LSE) est alors défini par la relation (5.30) :

$$\mathrm{LSE}_K = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad min_{K' \in \mathscr{V}(K), i \in K'}(\hat{\alpha}_{e_j}) = 1 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases}, \tag{5.30}$$

avec $\hat{\alpha}_i$ défini par la relation (5.31) :

$$\hat{\alpha}_{e_j} = \begin{cases} min(1, \frac{(\alpha_k\rho_k)_{max,e_j} - \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_i^{n+1}}{\overline{\delta(\alpha_k\rho_k)}_{e,j}^{n+1} - \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_i^{n+1}}), \text{ si } \overline{\delta(\alpha_k\rho_k)}_{e_j}^{n+1} > \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_i^{n+1} \\ min(1, \frac{(\alpha_k\rho_k)_{min,e_j} - \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_i^{n+1}}{\overline{\delta(\alpha_k\rho_k)}_{e,j}^{n+1} - \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_i^{n+1}}), \text{ si } \overline{\delta(\alpha_k\rho_k)}_{e_j}^{n+1} < \overline{\partial_x(\alpha_k\rho_k)}_i^{n+1} \\ 1 \text{ sinon} \end{cases}. \tag{5.31}$$

5.3 Validation croisée de la méthode sur des maillages structurés

Dans cette partie nous présentons des résultats en une et deux dimensions obtenus avec la méthode aux résidus distribués sur des maillages structurés. En une dimension, le domaine est découpé en segments égaux tandis qu'en deux dimensions le domaine est découpé en rectangles ayant des pas spatiaux dx et dy constants. Tous les tests numériques ont aussi été effectués avec la méthode de propagation des ondes (chapitre 4) appliquée au système à quatre équations sous forme conservative (1.7). Les résultats des deux méthodes ont été alors comparés afin de valider les résultats de la méthode aux résidus distribués non-conservative présentée et de démontrer sa capacité à converger vers la bonne solution faible. Ces cas tests sont les mêmes que ceux présentés dans le chapitre 4.

En outre, nous précisons que dans le cas unidimensionnel, les résultats sont obtenus en mettant à zéro le terme $\theta_{jump} = 0$ et l'algorithme de MOOD est simplifié en utilisant dans un premier temps le schéma psi-Galerkin avant d'utiliser le schéma de Lax-Friedrichs. Le CFL est fixé à 0.2. Tandis que pour les résultats bidimensionnels, l'algorithme de MOOD est tel que nous l'avons présenté et nous utilisons le schéma de Galerkin, le schéma psi-Galerkin puis le schéma de Lax-Friedrichs. Le terme de saut est fixé à $\theta_{jump} = 0.1$ et le CFL à 0.1 comme suggéré dans [69]. Finalement nous précisons que puisque Clawpack est conçu pour résoudre des maillages structurés alors que notre code aux résidus distribués est conçu pour résoudre des maillages non-structurés, les traitements des tables de connectivité de notre code rd rend donc le calcul beaucoup plus lent qu'avec Clawpack.

5.3.1 Résultats 1D

5.3.1.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur

Le premier cas test est le tube à choc d'un écoulement liquide-vapeur de [97]. Nous renvoyons à la section 4.3.1 pour la définition du problème : les paramètres de l'équation d'état stiffened gas (table 4.2) et l'état initial (table 4.1).

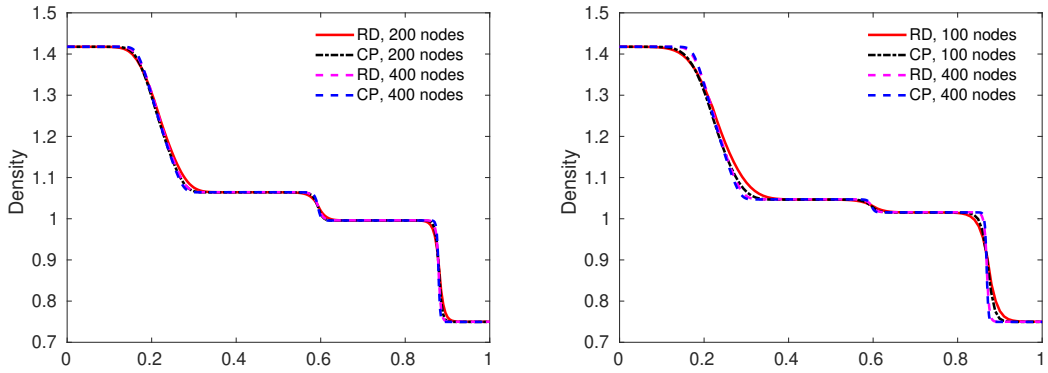


FIGURE 5.1 – Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la densité pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

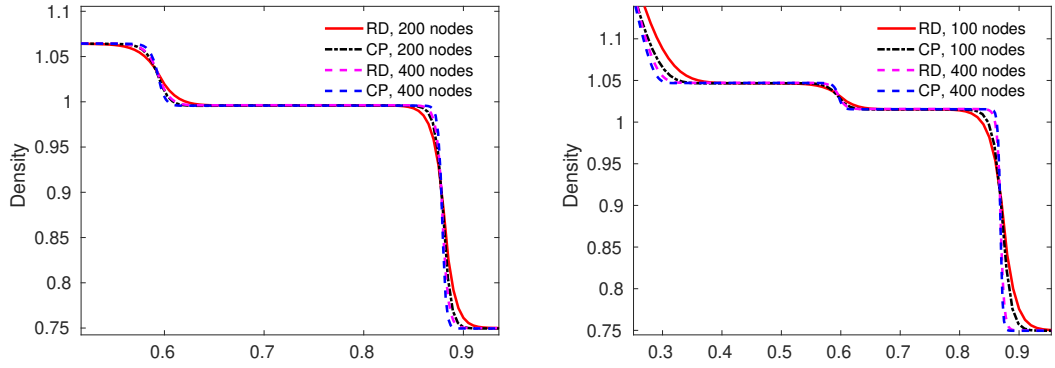


FIGURE 5.2 – Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Détails du profil de la densité de la figure 5.1 pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

Les résultats sont donnés par les figures 5.1 à 5.7. Chaque figure compare les résultats obtenus avec la méthode de propagation des ondes et la méthode aux résidus distribués en utilisant et en désactivant les transferts de masse. Les figures 5.1 et 5.3 présentent les profils de la densité et de la vitesse. Les zooms fournis par les figures 5.2 et 5.4 permettent de vérifier que les chocs et les détentes sont parfaitement capturés. Les figures 5.5, 5.6 et 5.7 présentent quant à elles les profils de la pression, de la température et de la fraction de masse liquide. Les résultats sont excellents et parfaitement cohérents entre-eux ce qui valide notre approche non-conservative.

On peut rajouter qu'à maillage équivalent notre méthode RD est plus diffusive puisque l'algorithme de MOOD applique le schéma de Lax-Friedrichs au niveau des chocs. Par contre en raffinant le maillage l'utilisation du schéma de Lax-Friedrichs par l'algorithme de MOOD se concentre de plus en plus au niveau des chocs et donne des résultats de moins en moins diffusifs.

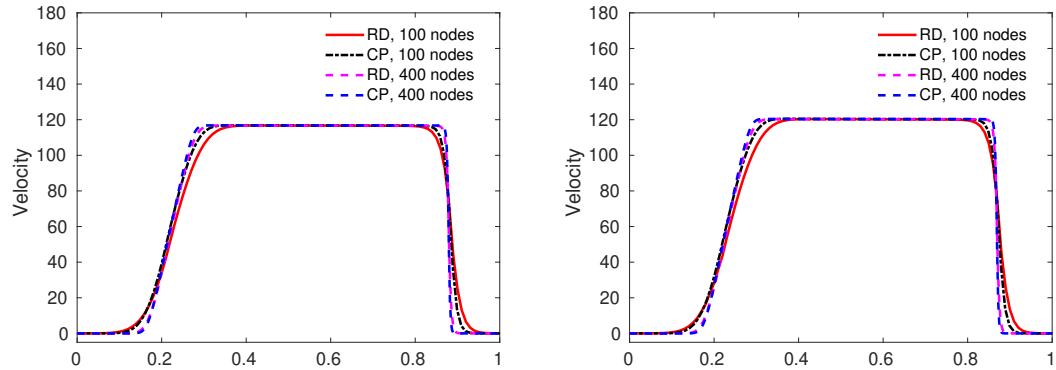


FIGURE 5.3 – Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la vitesse pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

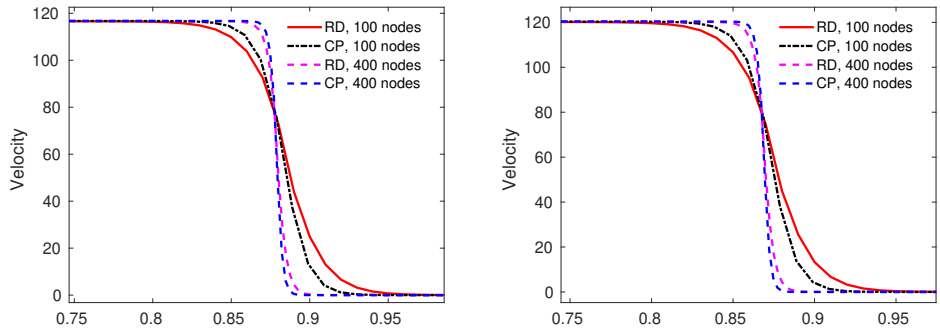


FIGURE 5.4 – Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Détails des profils de vitesse des figures 5.3 pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

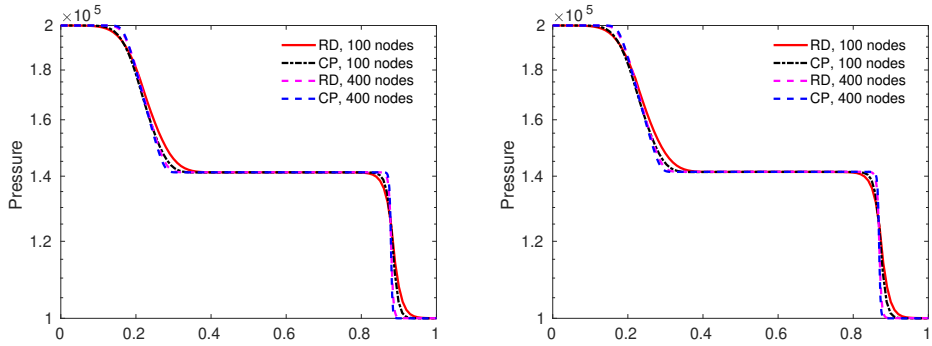


FIGURE 5.5 – Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la pression pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

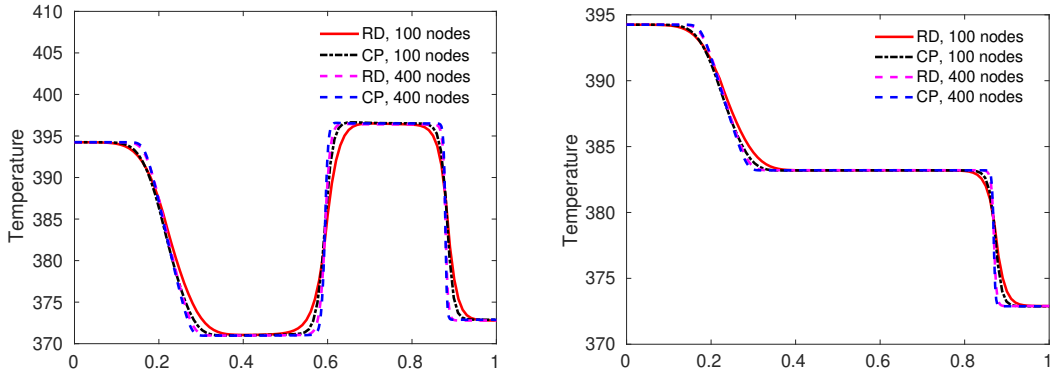


FIGURE 5.6 – Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la température pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

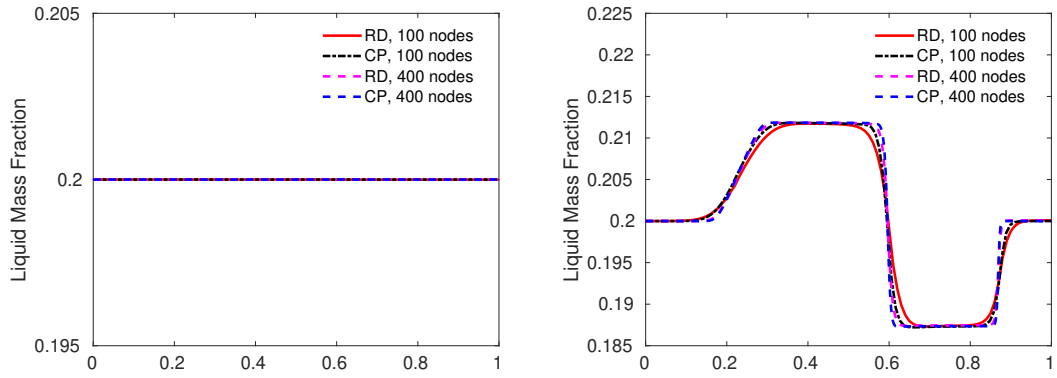


FIGURE 5.7 – Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la fraction de masse liquide pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAW-PACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

5.3.1.2 Dépression d'une conduite de CO_2

En deuxième cas test nous reprenons la dépression d'une conduite de CO_2 [98] et nous renvoyons à la section 4.3.2 pour la définition du problème.

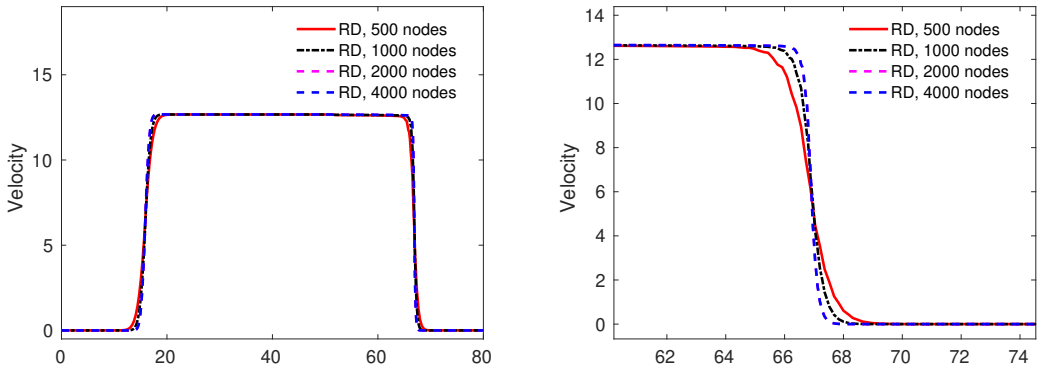


FIGURE 5.8 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Etude de convergence en maillage pour l'approche non-conservative RD *sans* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom (à droite).

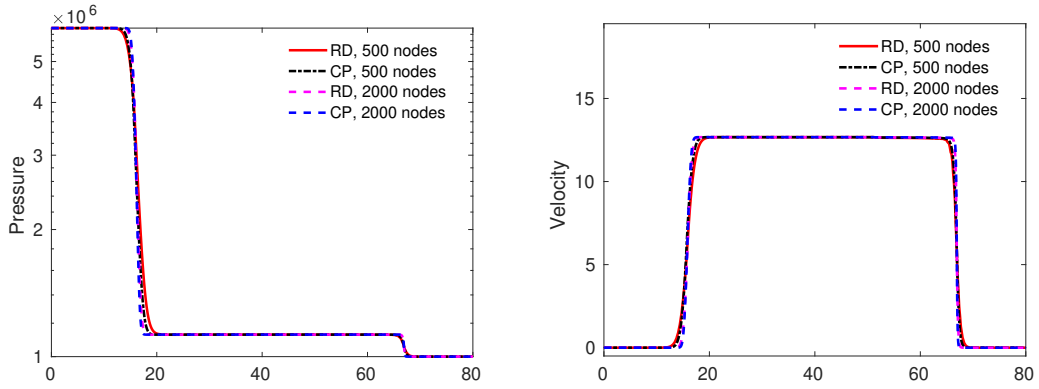


FIGURE 5.9 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative pour différents maillages *sans* transfert de masse - pression (à gauche) et vélocité (à droite).

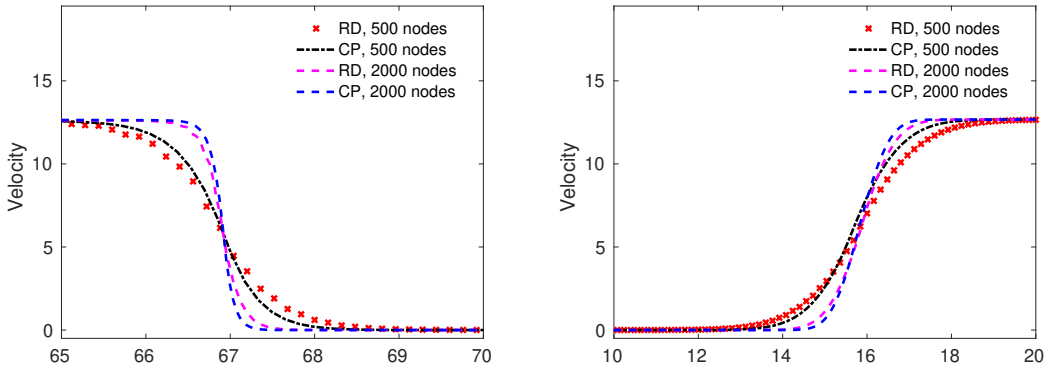


FIGURE 5.10 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative pour différents maillages pour le système *sans* transfert de masse - zooms de la vitesse.

Premièrement, on montre les résultats obtenus sans tranfert de masse : figures 5.8 à 5.12. La première, la figure 5.8 présente une convergence en maillage avec la méthode aux résidus distribués pour la vitesse, on voit alors que pour un maillage de 2000 nœuds les résultats sont parfaitement convergés. Ainsi les résultats suivants ne présenteront pas plus de 2000 nœuds pour plus de visibilité dans les comparaisons. La figure 5.9 présente les profils de la pression et de la vitesse. Des zooms des vitesses sont donnés dans les figures 5.10. La densité est présentée par la figure 5.11. Finalement la figure 5.12 présente les profils de la température et de la fraction de masse liquide. Les résultats sont parfaitement en adéquation.

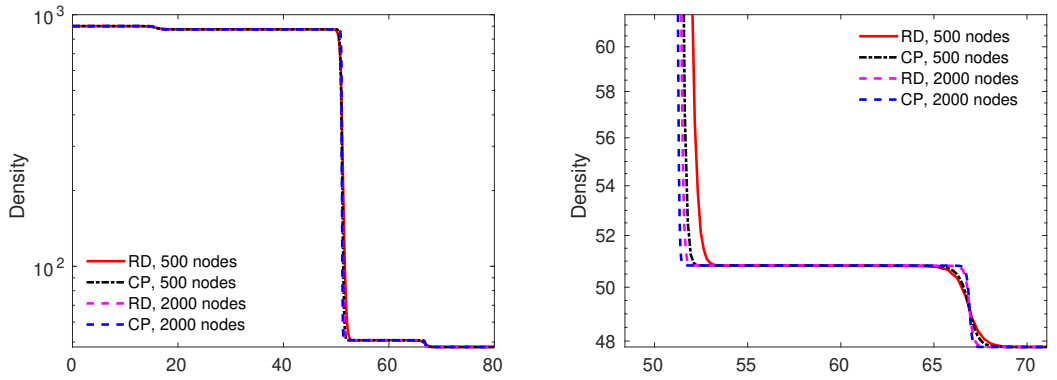


FIGURE 5.11 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative pour différents maillages *sans* transfert de masse - densité (à gauche) et zoom de la densité (à droite).

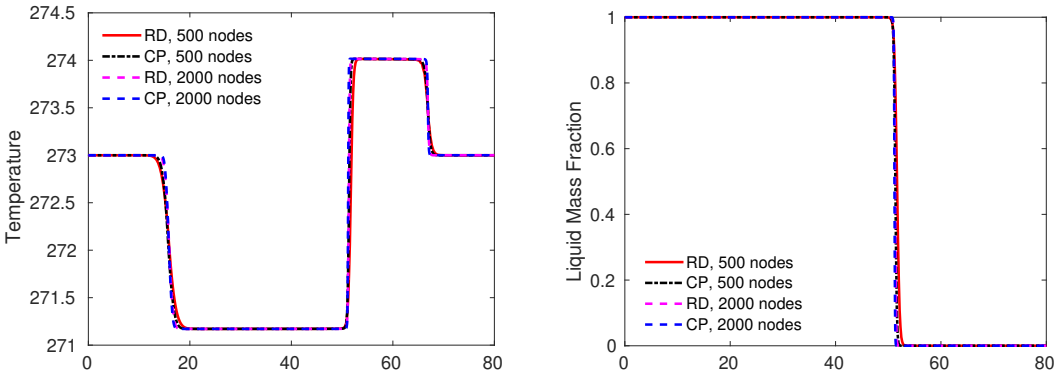


FIGURE 5.12 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *sans* transfert de masse - température (à gauche) et fraction massique de liquide (à droite).

Les résultats avec transfert de masse sont donnés par les figures 5.13 à 5.18. la figure 5.13 présente une convergence en maillage avec la méthode aux résidus distribués pour la vitesse, on voit alors que pour un maillage de 2000 nœuds les résultats sont parfaitement convergés. Ainsi les résultats suivants ne présenteront pas plus de 2000 nœuds pour plus de visibilité dans les comparaisons. La figure 5.14 présente les profils des pressions et vitesses. les figures 5.15 et 5.16 donnent des zooms des profils des pressions et des vitesses. Le zoom des pressions permet de voir un léger pic des pressions disparaissant en raffinant le maillage. Contrairement aux résultats sans transfert de masse, on voit la propagation d'un front d'évaporation entre x=0.50m et x=0.55m au temps final se propageant vers la droite. La densité est présentée par la figure 5.17. Finalement la figure 5.18 présente les profils de la température et de la fraction de masse liquide, on voit alors bien la propagation du front d'évaporation. De même les résultats sont en parfaites cohérences et se superposent. Par contre la méthode de propagation des ondes est un peu moins diffuse. Néanmoins la méthode aux résidus distribués semble devenir moins diffuse en raffinant le maillage, cela provient sûrement du fait que l'on détecte moins de cellules parasites avec l'algorithme de MOOD avec un maillage plus fin.

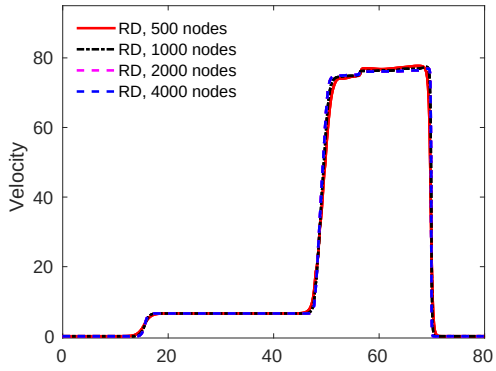


FIGURE 5.13 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Etude de convergence en maillage pour l'approche non-conservative RD *avec* transfert de masse - vitesse.

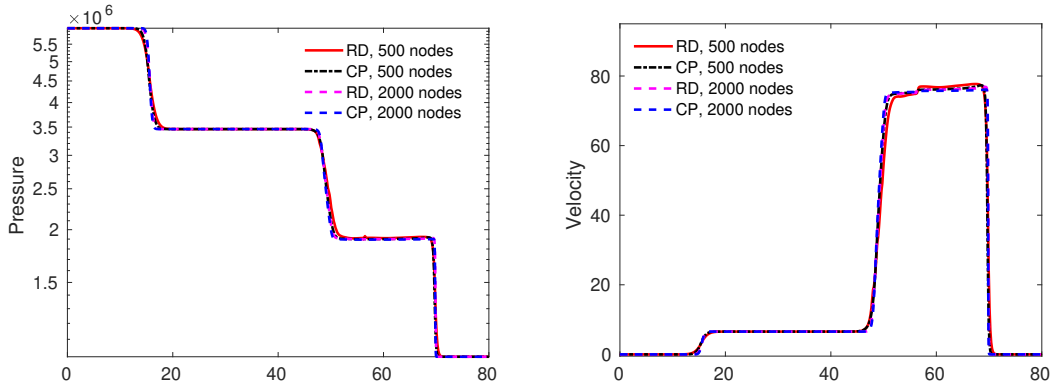


FIGURE 5.14 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - pression (à gauche) et vitesse (à droite).

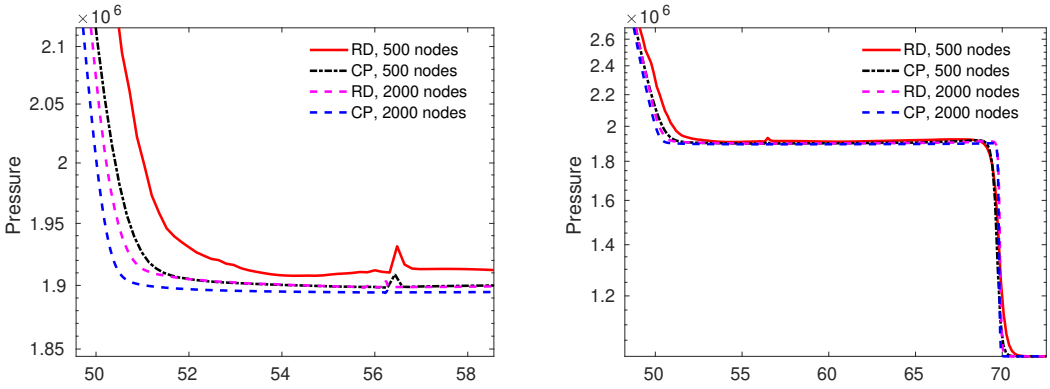


FIGURE 5.15 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - zooms des pressions.

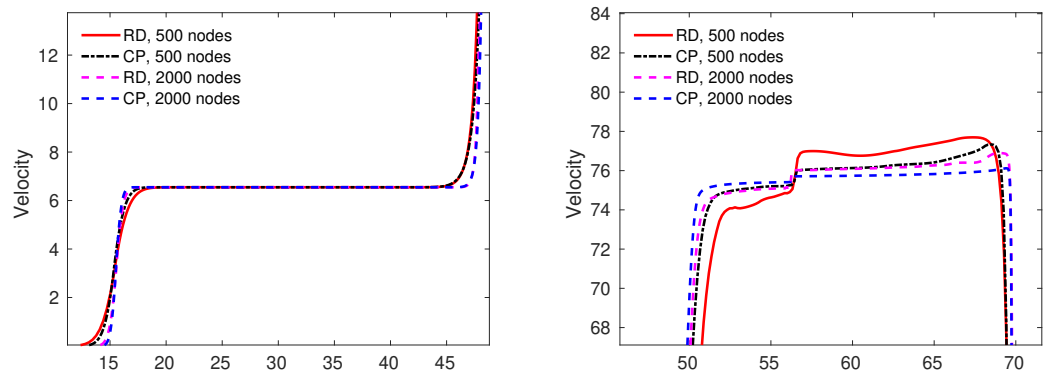


FIGURE 5.16 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - zooms de la vitesse.

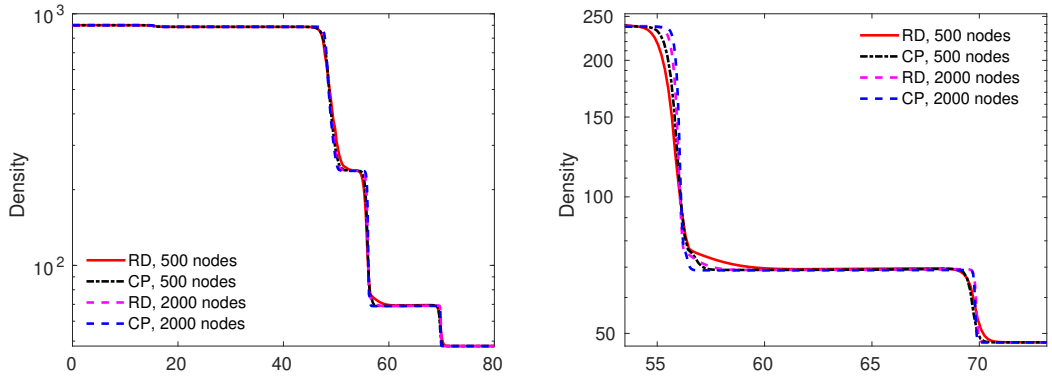


FIGURE 5.17 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - densité (à gauche) et zoom de la densité (à droite).

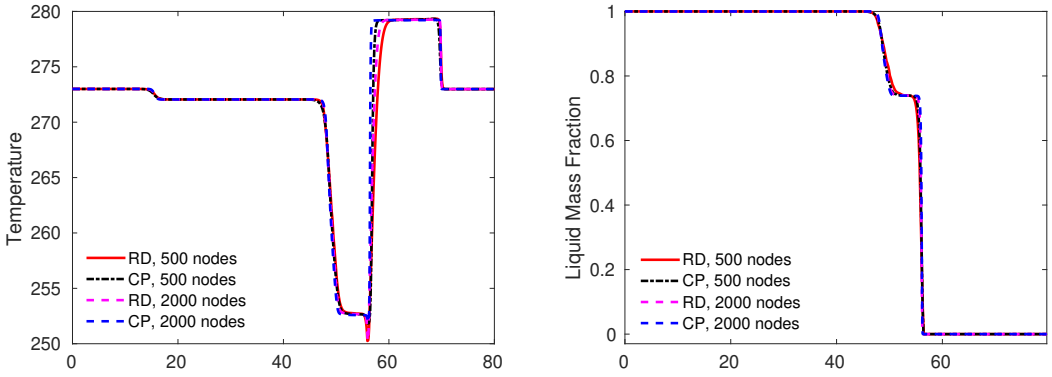


FIGURE 5.18 – Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - température (à gauche) et fraction de masse liquide (à droite).

5.3.1.3 Cavitation de l'eau à faible vitesse

Pour ce cas test nous avons repris la cas de cavitation provenant de [17] et nous renvoyons à la section 4.3.3 pour la définition du problème.

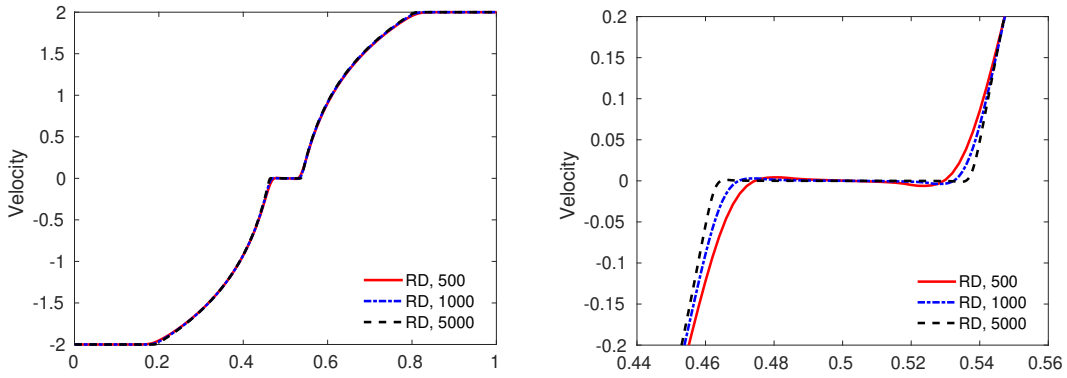


FIGURE 5.19 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Convergence en maillage de la formulation RD *sans* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom de la vitesse (à droite).

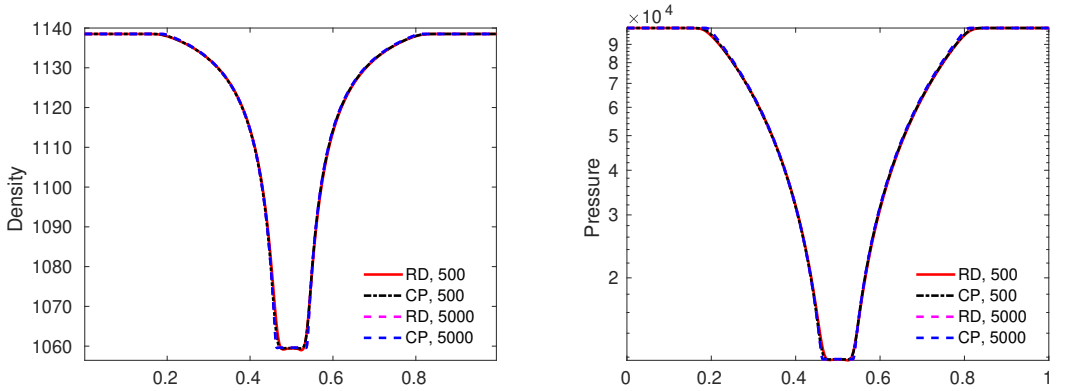


FIGURE 5.20 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *sans* transfert de masse pour la densité (à gauche) et la pression (à droite).

Les résultats sans tranfert de masse et avec donc uniquement de la cavitation mécanique sont présentés dans les figures 5.19 à 5.22. La figure 5.19 présente une convergence en maillage avec la méthode aux résidus distribués de la vitesse. On voit que pour un maillage de 5000 nœuds le profil n'évolue plus, ainsi les prochains résultats utilisent par conséquent un maillage grossier de 500 nœuds et un maillage fin de 5000 nœuds. La figure 5.20 présente le profil de la pression et de la densité. Les figures 5.21 et 5.22 présentent les profils de la vitesse et de la température avec un zoom. Pour la température comme pour la méthode de propagation des ondes on voit un léger pic non physique. Ce phénomène est expliqué dans [99], dans les zones de basses densités, la vitesse est mal approximée, d'où une mauvaise approximation de l'énergie cinétique. Dans une méthode conservative, l'énergie interne est obtenue en soustrayant l'énergie cinétique à l'énergie totale. L'énergie interne est donc mal approximée. Puisque la température est calculée

en utilisant l'énergie interne celle-ci présente un pic non physique en raison de ces erreurs. Même en utilisant une méthode non-conservative le pic est toujours présent, cela provient du fait que nous corrigeons l'énergie interne avec la valeur de l'énergie totale. En revanche avec la méthode aux résidus distribués non-conservative on voit le pic devenir plus faible en raffinant le maillage.

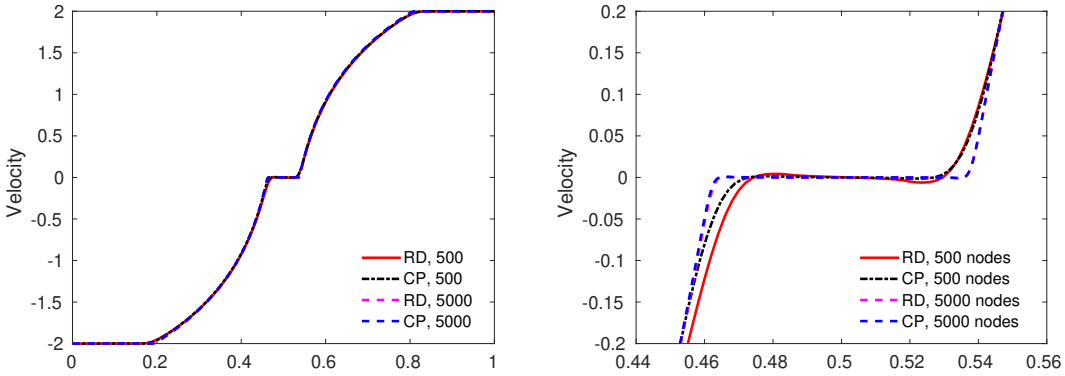


FIGURE 5.21 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *sans* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom de la vitesse (à droite).

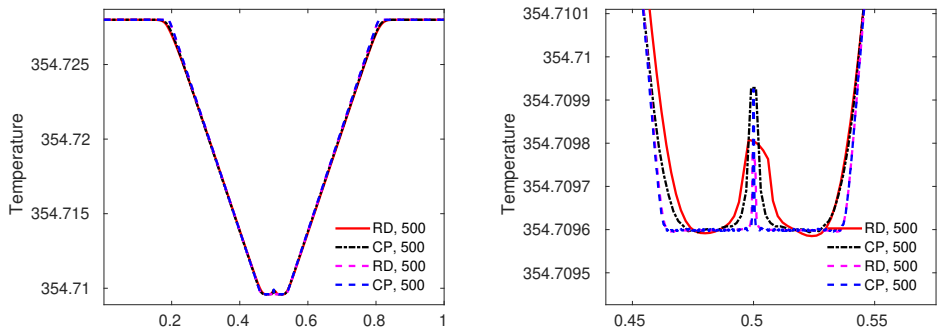


FIGURE 5.22 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *sans* transfert de masse - température (à gauche) et zoom de la température (à droite).

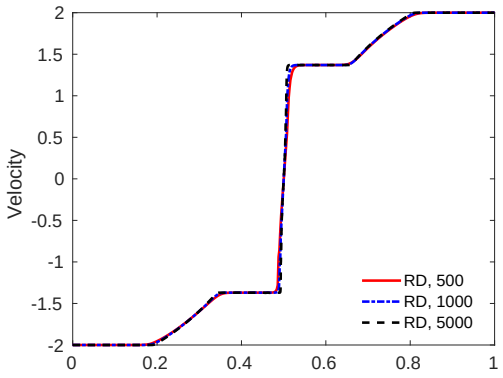


FIGURE 5.23 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Convergence en maillage de la formulation RD *avec* transfert de masse - vitesse.

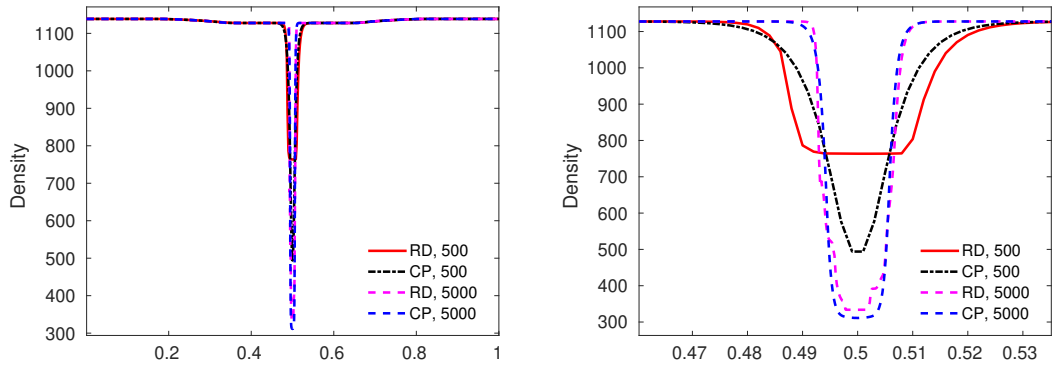


FIGURE 5.24 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - densité (à gauche) et zoom de la densité (à droite).

Les résultats en prenant en compte les transferts de masse sont visibles sur les figures 5.23 à 5.27. La figure 5.23 présente une convergence en maillage avec la méthode aux résidus distribués de la vitesse. On voit que pour un maillage de 5000 nœuds le profil n'évolue plus, ainsi les prochains résultats utilisent par conséquent un maillage grossier de 500 nœuds et un maillage fin de 5000 nœuds. La figure 5.24 présente les profils de la densité. La figure 5.25 présente les profils de la vitesse. La figure 5.26 présente les profils de la fraction massique de liquide et la figure 5.27 les profils de l'énergie interne. Les résultats sont parfaitement cohérents entre eux.

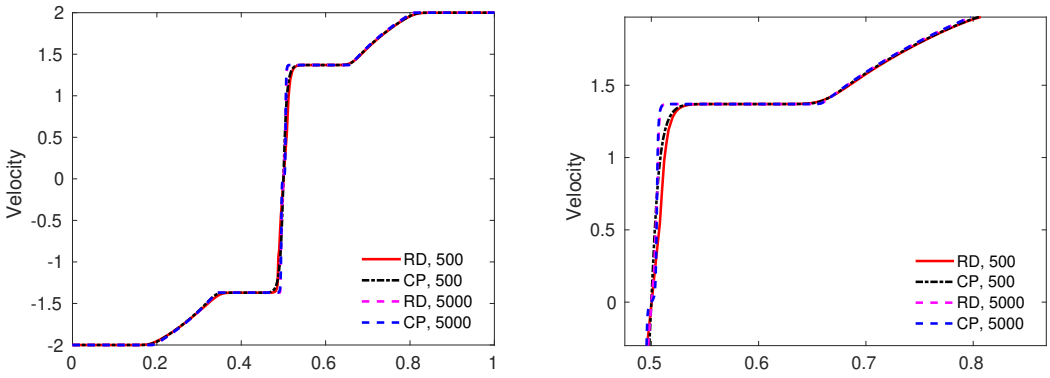


FIGURE 5.25 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom de la vitesse (à droite).

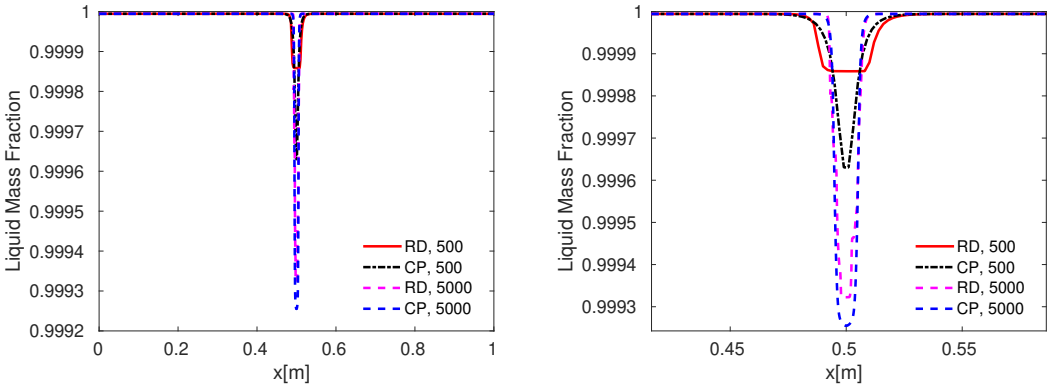


FIGURE 5.26 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - fraction de masse liquide (à gauche) et zoom de la fraction de masse liquide (à droite).

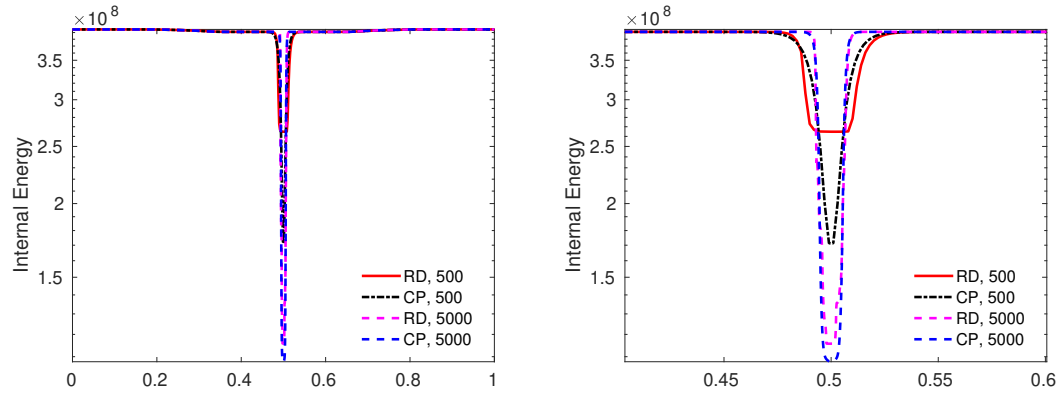


FIGURE 5.27 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - énergie interne (à gauche) et zoom de l'énergie interne (à droite).

5.3.1.4 Cavitation de l'eau à haute vitesse

Le dernier cas test 1D reprend le cas de cavitation provenant de [12] et nous renvoyons à la section 4.3.4 pour la définition du problème. Ce cas test est très important. En effet le terme non-convervatif que nous résolvons dépend de la divergence de la vitesse. Par conséquent, puisque ce problème comprend une forte divergence des vitesses, la bonne résolution de celui-ci permet de valider la robustesse et la conformité de notre approche non-conservative.

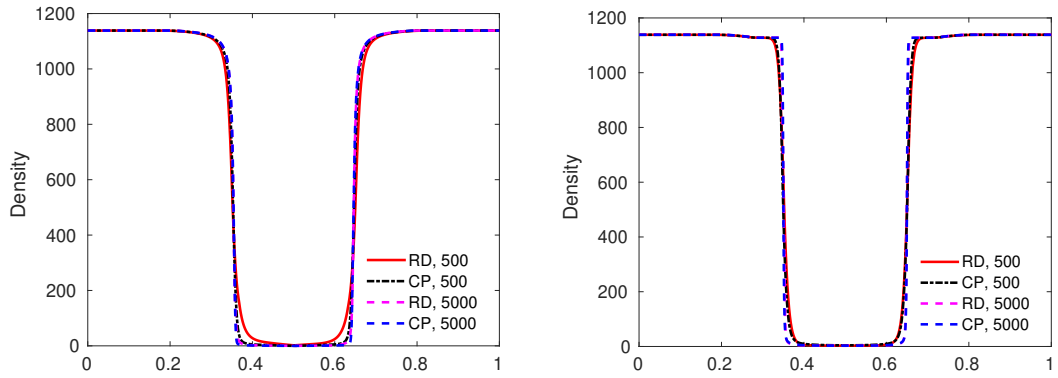


FIGURE 5.28 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Densité : Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite).

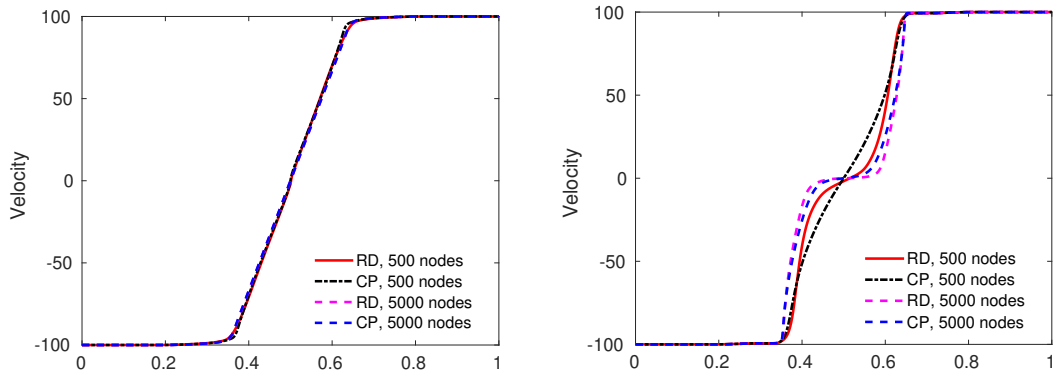


FIGURE 5.29 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Vitesse : Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite)

Les résultats sont présentés sur les figures 5.28 à 5.31. Les figures 5.28, 5.29 et 5.30 comparent, entre les deux codes, les profils de la densité, de la vitesse et de la pression avec et sans transfert de masse. On peut noter qu'il n'y a pas de difficulté pour faire le calcul avec une méthode à l'ordre 2 avec la méthode aux résidus distribués (dans la section 4.3.4, pour le modèle à 4 équations avec Clawpack, nous avions utilisé la méthode de Godunov à l'ordre 1 en raison d'un problème de robustesse). En revanche, un CFL très petit a dû être utilisé pour faire le calcul avec la méthode de propagation des ondes. La figure 5.31 présente uniquement les résultats avec des transferts de masse de la fraction massique de liquide et de la température.

Les résultats sont en parfait agrément. Cela valide la robustesse et la propriété de converger vers la bonne solution faible de notre approche.

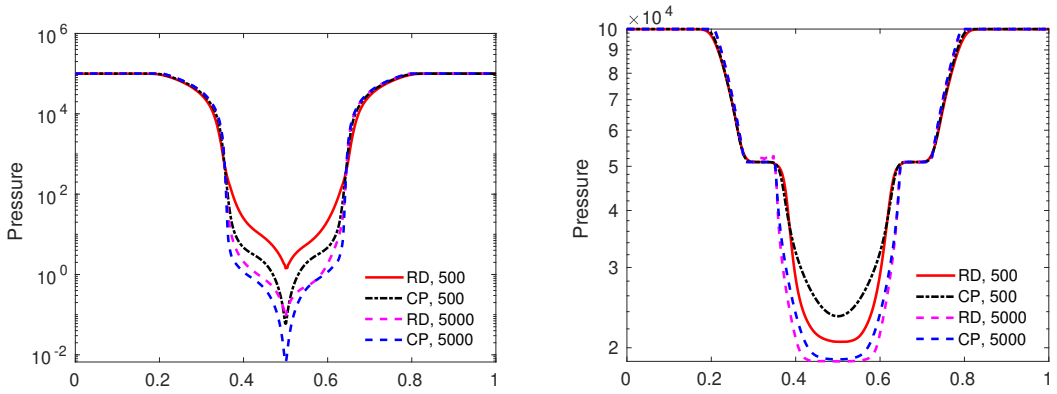


FIGURE 5.30 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Pression : Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite)

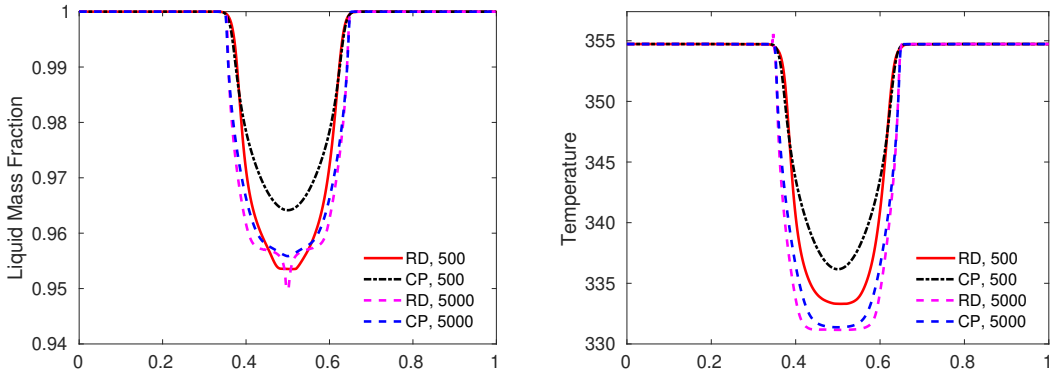


FIGURE 5.31 – Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK pour différents maillages avec transfert de masse - fraction de masse liquide (à gauche) température (à droite).

5.3.2 Résultats 2D

5.3.2.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel

Comme premier cas test bidimensionnel, nous reprenons le tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel présenté dans la section 4.3.6. Nous précisons que nous avons choisi pour cette comparaison d'imposer des conditions aux limites de murs impénétrables aux bords en haut et en bas du domaine contrairement au cas présenté dans le chapitre précédent.

Nous avons considéré deux maillages, tous les deux constitués de quadrangles uniformes : un de 100x10 mailles et un de 200x20 mailles. Les résultats sont visibles sur les figures 5.32. Il y a une bonne concordance entre les résultats avec la méthode aux résidus distribués et Clawpack, en outre nous précisons qu'il ne s'agit pas d'une coupe, en effet le profil présente tous les points selon l'axe y pour chaque x, il n'y a donc pas d'oscillations parasites le long de l'axe y. On peut

néanmoins noter quelques défauts au niveau de la discontinuité de contact. Nous rajoutons que la résolution en utilisant la méthode aux résidus distribués capture les chocs plus rapidement notamment grâce à notre algorithme à postériori.

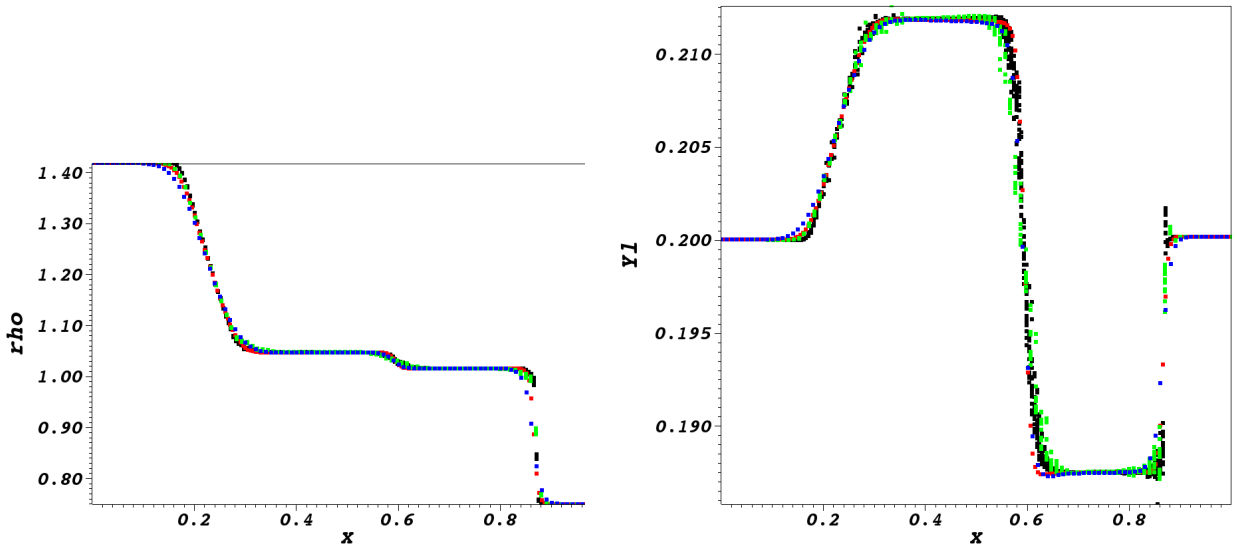


FIGURE 5.32 – Profil de la densité ρ (à gauche) et de la fraction massique de liquide Y_l (à droite) d'un tube à choc eau-vapeur en 2D (noir : 200x20 nœuds rd, rouge : 200x20 nœuds Clawpack, vert : 100x10 nœuds rd, bleu : 100x10 nœuds Clawpack)

5.3.2.2 Bulle d'hélium heurtée par un choc

Pour notre second cas test bidimensionnel, nous avons repris le cas test présenté dans la section 4.3.5. Ce problème correspond à une bulle d'hélium dans l'air ambiant heurtée par un choc à Mach 1.5.

Nous considérons deux maillages structurés constitués de quadrangles uniformes. Le premier comprend 300x80 nœuds et le deuxième 450x120 nœuds. Bien que le maillage ne soit pas suffisant pour avoir un résultat totalement convergé, en raison du coût de calcul nous n'avons pas jugé nécessaire d'utiliser de maillages plus fins. Les résultats obtenus avec la méthode aux résidus distribués sont donnés par les isocontours présentés sur la figure 5.33 pour la densité et sur la figure 5.34 pour la pression pour différents temps. Bien que la bulle ait une très bonne résolution, au temps final le problème présente une légère asymétrie des résultats. Pour cela nous nous intéressons aussi aux résultats au milieu du temps de calcul à t=0.2885ms pour comparer les résultats avec ceux obtenus avec la méthode de propagation des ondes.

Les figures 5.35 et 5.36 présentent la comparaison des isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes et avec la méthode aux résidus distribués au temps t=0.2885ms. Les figures 5.37 et 5.38 présentent la comparaison des isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes et avec la méthode aux résidus distribués au temps t=0.577ms.

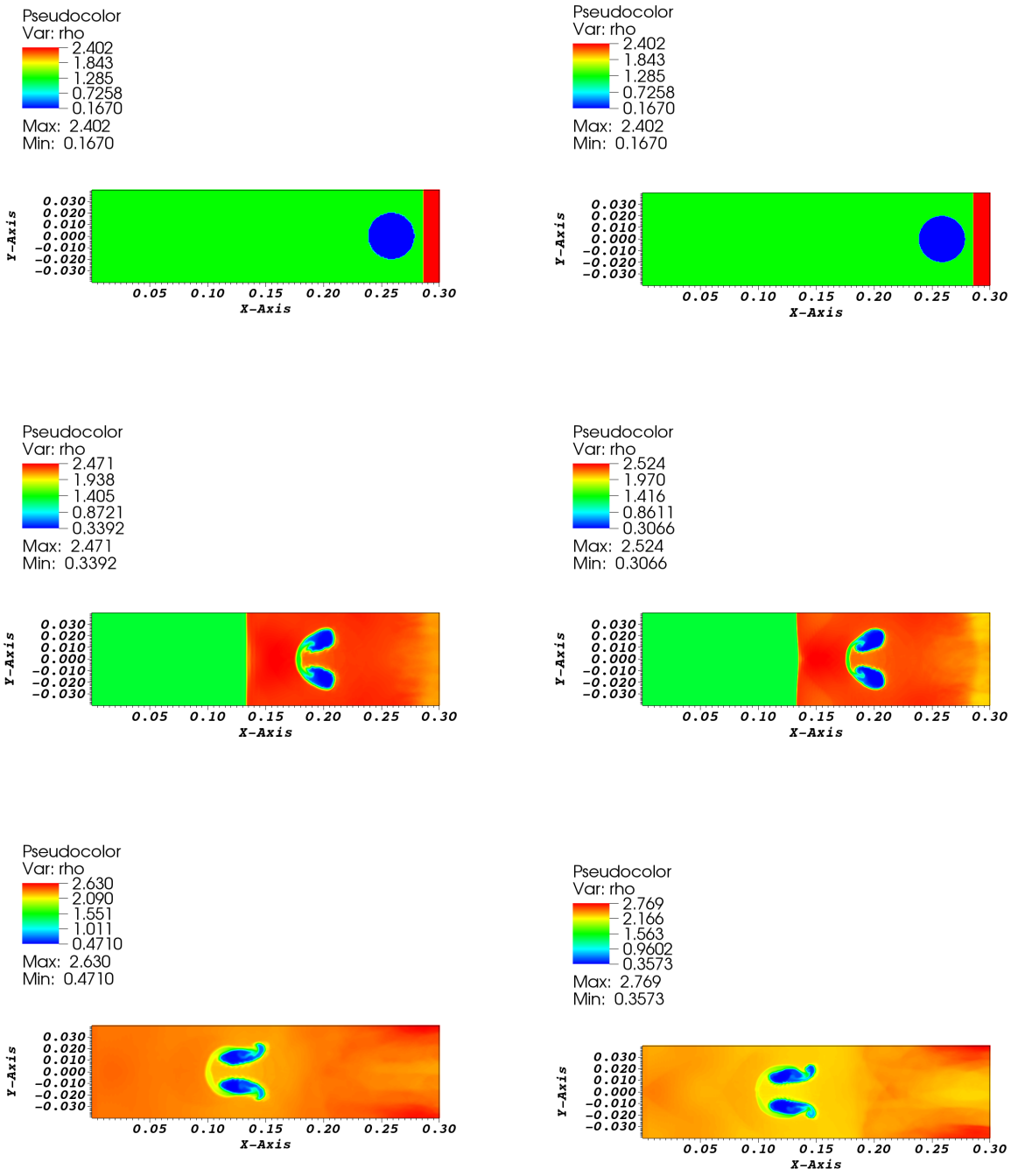


FIGURE 5.33 – Résultats de la densité ρ d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (300x80 nœuds à gauche, 450x120 nœuds à droite)

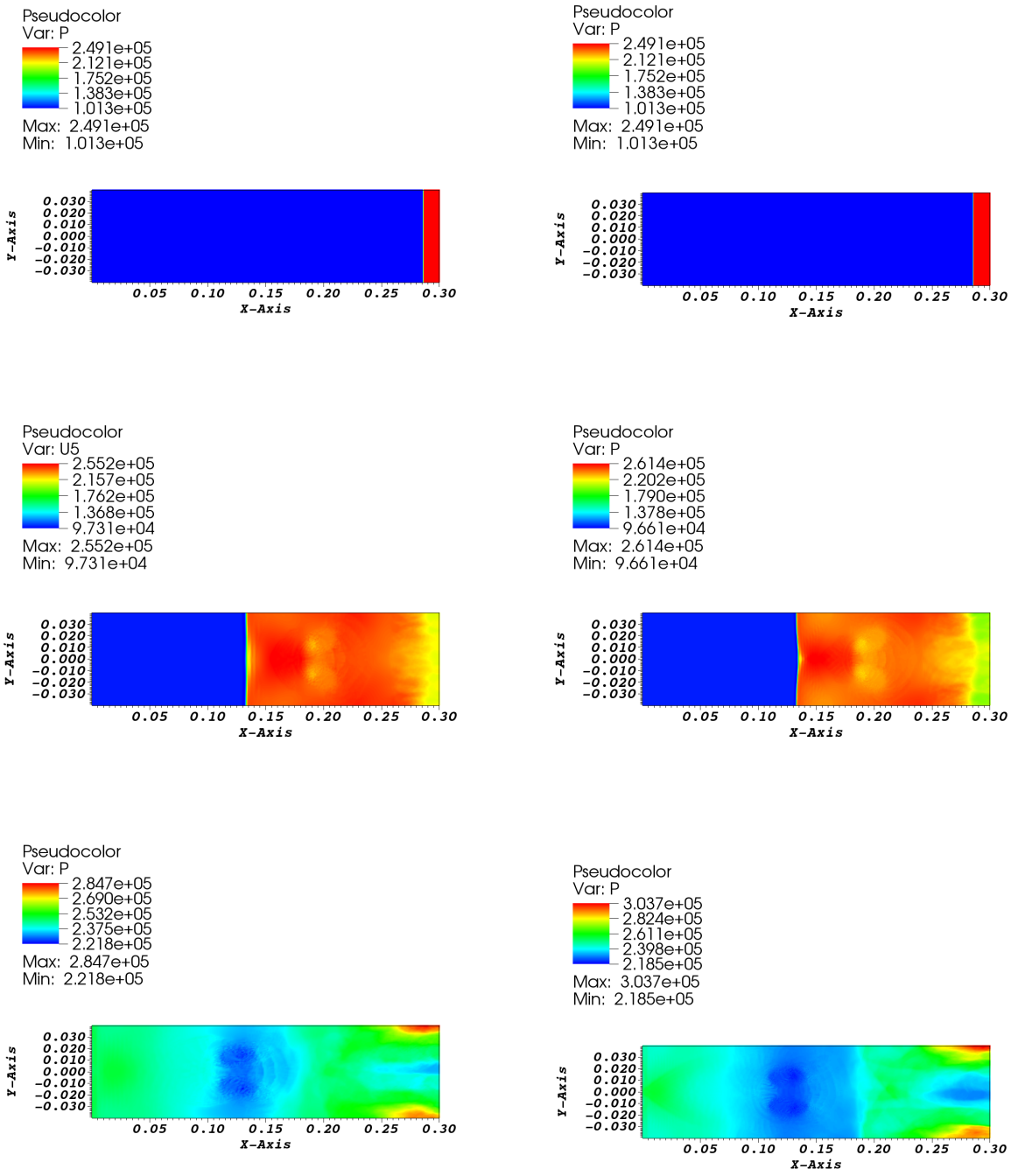


FIGURE 5.34 – Résultats de la pression P d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (300x80 nœuds à gauche, 450x120 nœuds à droite)

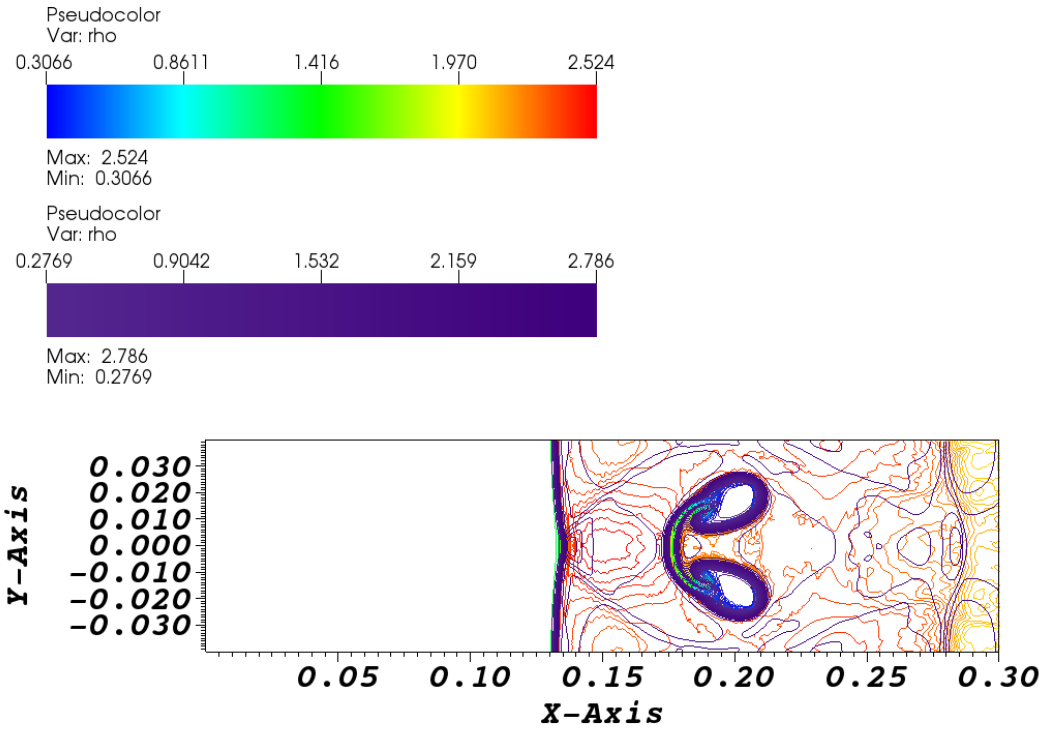


FIGURE 5.35 – Isolignes de la densité à t=288.5e-6 s (450x120 nœuds) (les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent)

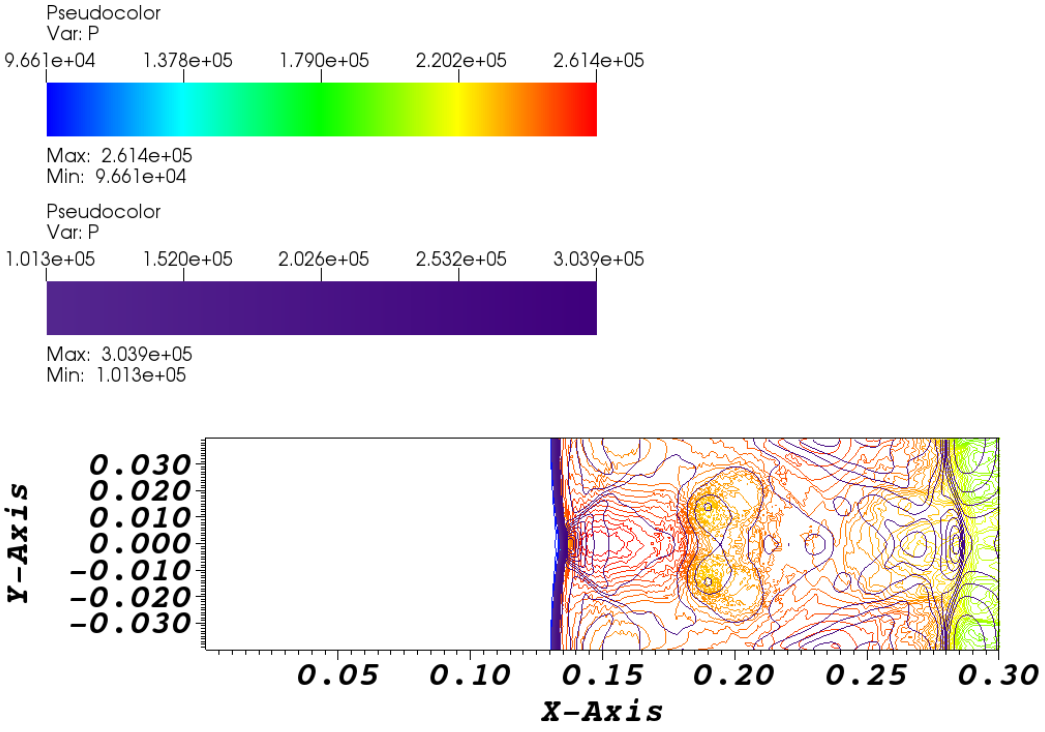


FIGURE 5.36 – Isolignes de la pression à t=288.5e-6 s (450x120 nœuds) (les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent)

En ce qui concerne les isolignes au temps t=0.2885ms, pour la densité (figure 5.35), il y a une bonne cohérence au niveau des isolignes de la bulle en comparant les résultats obtenus avec notre méthode aux résidus distribués et les résultats de Clawpack. Il y a tout de même quelques disparités : les valeurs extrema sont différentes. On retrouve néanmoins globalement la même structure des isolignes. Les isolignes de la pression 5.36 sont aussi cohérentes dans la répartition des structures délimitées par les isolignes. En revanche, comme pour la densité les valeurs extrema sont différentes de celles obtenues avec Clawpack. Nous rappellons que les résultats ne sont pas totalement convergés avec ce maillage, il est donc normal d'observer ces différences. En outre la figure 5.39 présente le profil de la densité selon l'axe y en coupant la bulle à x=0.2m pour nos deux maillages. Le profil reprend aussi les résultats d'un maillage de 1200x360 nœuds avec la méthode de propagation des ondes. Les résultats obtenus avec la méthode aux résidus distribués sont plus proches de cette solution très convergée que ceux obtenus avec la méthode de propagation des ondes.

En ce qui concerne les résultats au temps final t=0.577ms, les résultats avec la méthode aux résidus distribués présentent une légère asymétrie provenant d'une erreur de programmation qui n'a pas été trouvée pour l'instant. En ce qui concerne les isolignes de la densité 5.37 et la pression 5.38, une première remarque est que, contrairement à t=0.2885ms, les valeurs extrema sont très proches entre les résultats de Clawpack et notre méthode aux résidus distribués. Les structures délimitées par les isolignes sont assez proches mais il y a tout de même quelques différences. En outre le profil des bulles donné par les isolignes de la densité sont différentes. Cela peut provenir que l'algorithme de MOOD a utilisé différentes méthodes autour des cellules des bulles. Puisque les résultats ne sont pas totalement convergés, les bulles prennent une forme différente de celle de Clawpack qui utilise uniquement la méthode des limiteurs. La figure 5.40 présente le profil selon y de la densité à x=0.125m en coupant la bulle. Les profils avec la méthode aux résidus distribués paraissent plus proches du profil du maillage de 1200x360 nœuds obtenu avec la méthode de propagation des ondes. Par contre, les tourbillons dans la bulle ont quelques difficultés à se former.

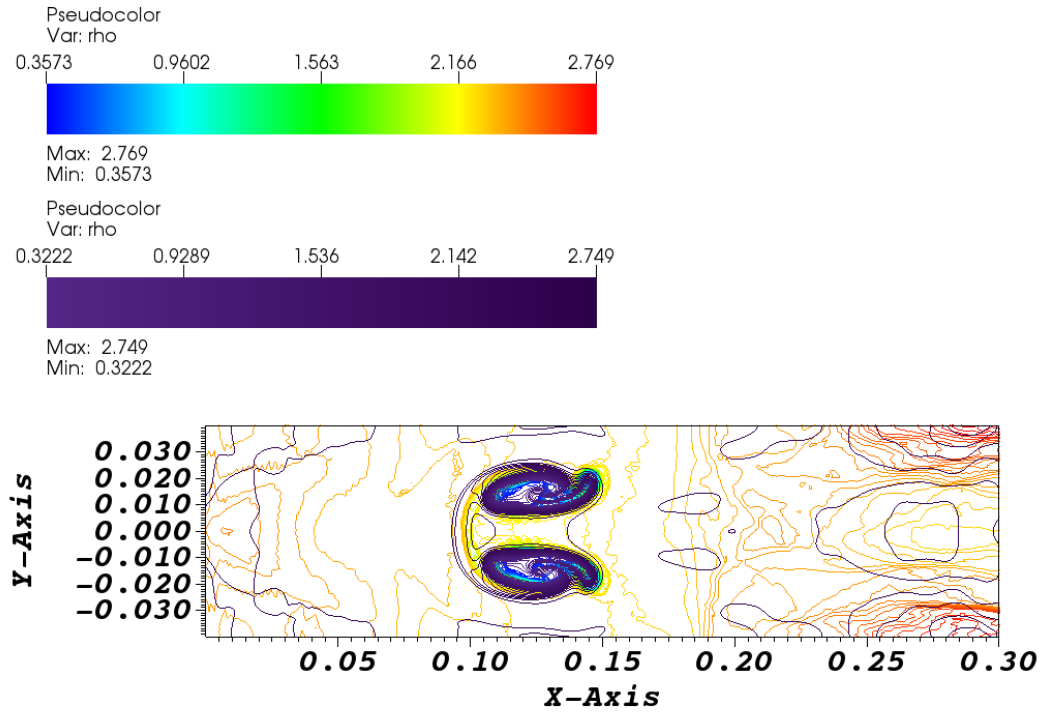


FIGURE 5.37 – Isolignes de la densité à t=577.e-6 s (450x120 nœuds)(les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent)

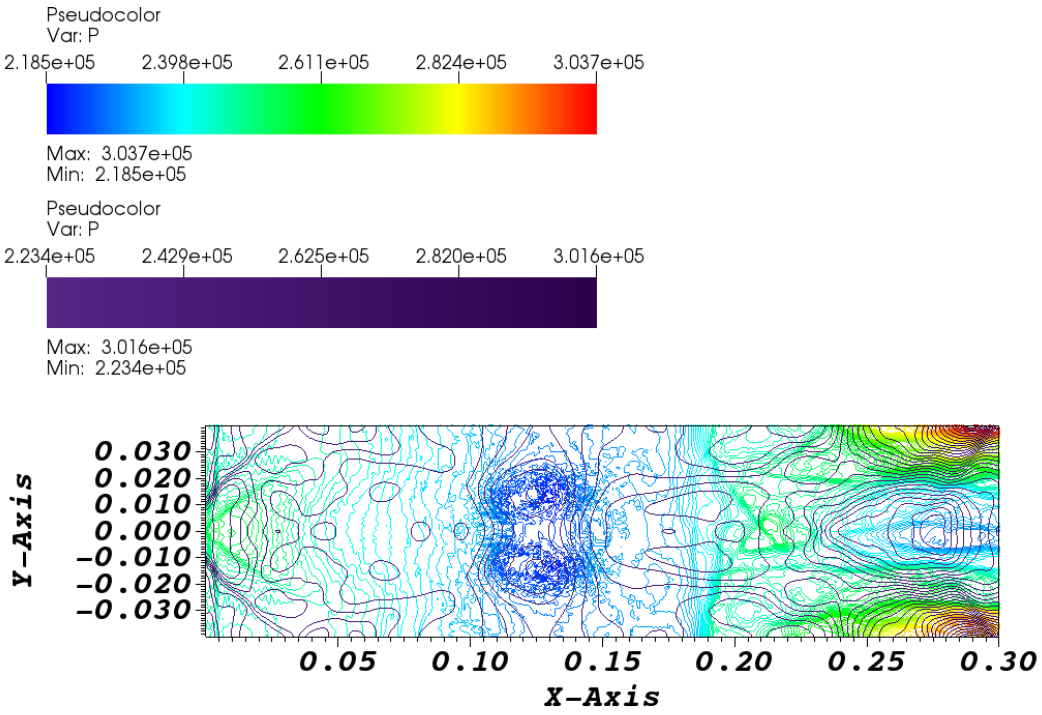


FIGURE 5.38 – Isolignes de la pression à t=577.e-6 s (450x120 nœuds)(les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent)

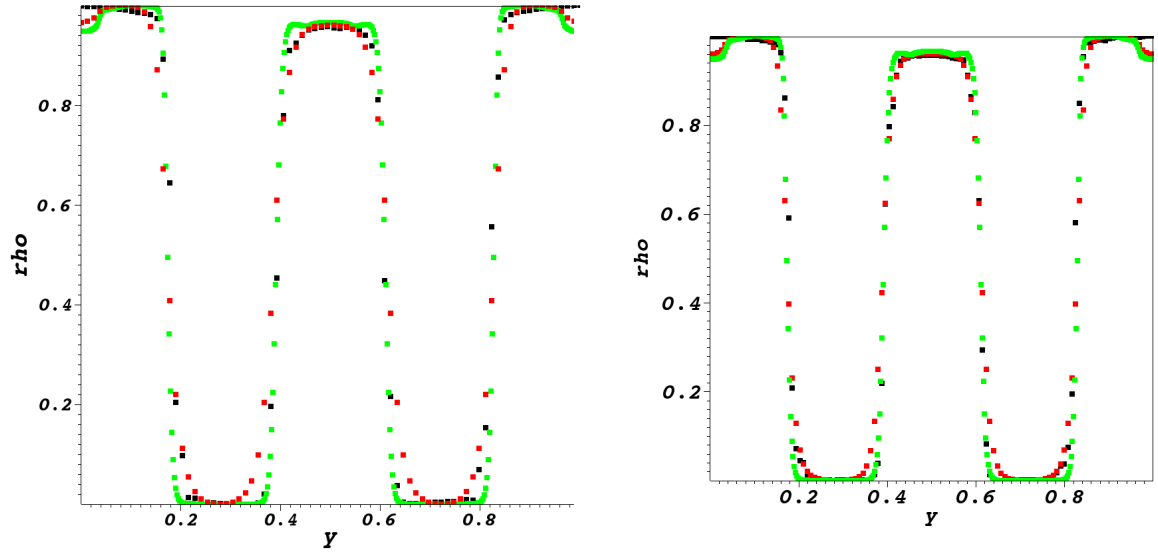


FIGURE 5.39 – Comparaison du profil de la densité à t=0.2885ms et x=0.2m (à gauche : noir : 300x80 rd, rouge : 300x80 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (à droite : noir : 450x120 rd, rouge : 450x120 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (les profils sont adimensionnés)

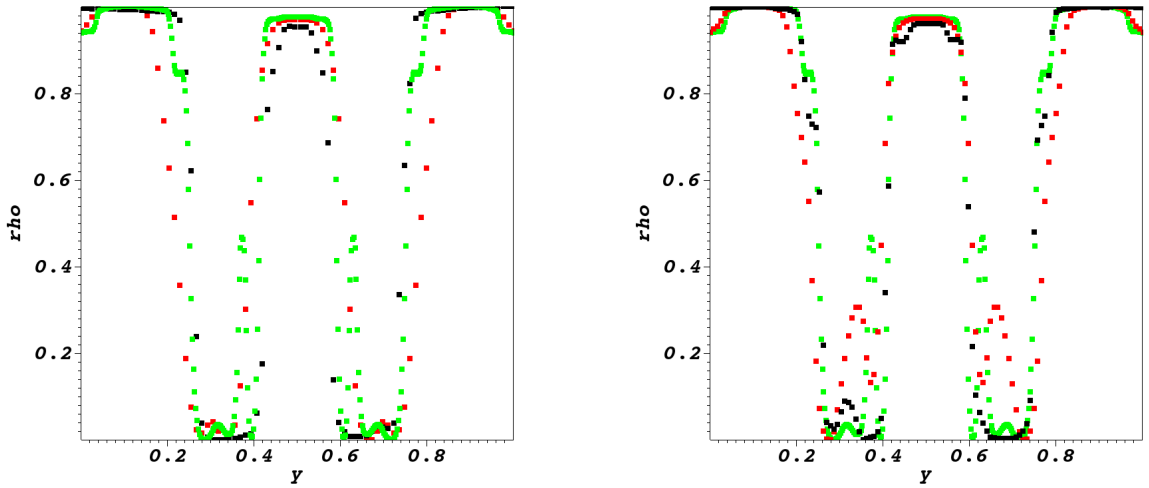


FIGURE 5.40 – Comparaison du profil de la densité à t=0.577ms et x=0.125m (à gauche : noir : 300x80 rd, rouge : 300x80 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (à droite : noir : 450x120 rd, rouge : 450x120 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (les profils sont adimensionnés)

5.4 Résultats avec des maillages non structurés

5.4.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel

Finalement, nous avons utilisé la méthode aux résidus distribués pour résoudre des problèmes utilisant des maillages non structurés, dans notre cas des triangles. Ainsi, dans un premier temps, nous avons vérifié l'efficacité de la résolution pour un cas simple. Nous avons donc repris le cas du tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel en utilisant des maillages utilisant des mailles triangulaires. De la même manière que dans la section 5.3.2.1 résolvant le problème avec des maillages quadrangulaires, nous avons conçu deux maillages triangulaires. Un maillage comprenant 1000 nœuds et un maillage constitué de 4000 nœuds. Le maillage de 1000 nœuds est donné sur la figure 5.41 pour les quadrangles et par la figure 5.42 pour les triangles.

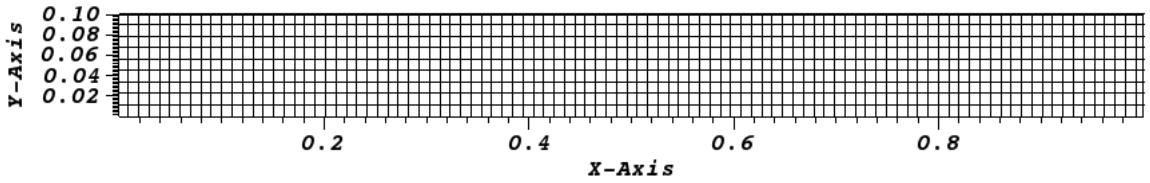


FIGURE 5.41 – Maillage de quadrangles pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel (1000 nœuds)

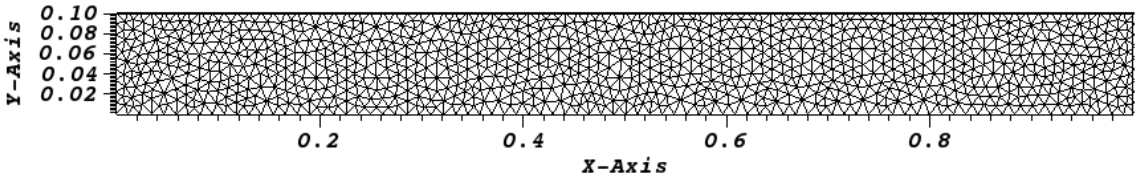


FIGURE 5.42 – Maillage de triangles pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel (1000 nœuds)

Les résultats sont visibles sur la figure 5.43 pour 1000 nœuds et sur la figure 5.44 pour 4000 nœuds (tous les nœuds selon y sont représentés). Une première observation est que nous avons peu de triangles selon l'axe y et la taille selon y est relativement mince, ainsi de nombreuses instabilités selon y peuvent subvenir le long de l'axe y. Malgré tout, les profils obtenus avec les maillages triangulaires présentent peu d'instabilités grâce à notre méthode d'optimisation à postériori. Une deuxième remarque est bien que les résultats soient plus diffusifs en utilisant les maillages triangulaires, cette diffusion semble diminuer en raffinant le maillage (les résultats des maillages à 4000 nœuds sont plus proches que ceux utilisant les maillages de 1000 nœuds). Cela provient sûrement de l'algorithme de MOOD, en raffinant le maillage on détecte moins de cellules défectueuses et on utilise donc plus souvent les méthodes d'ordre élevé.

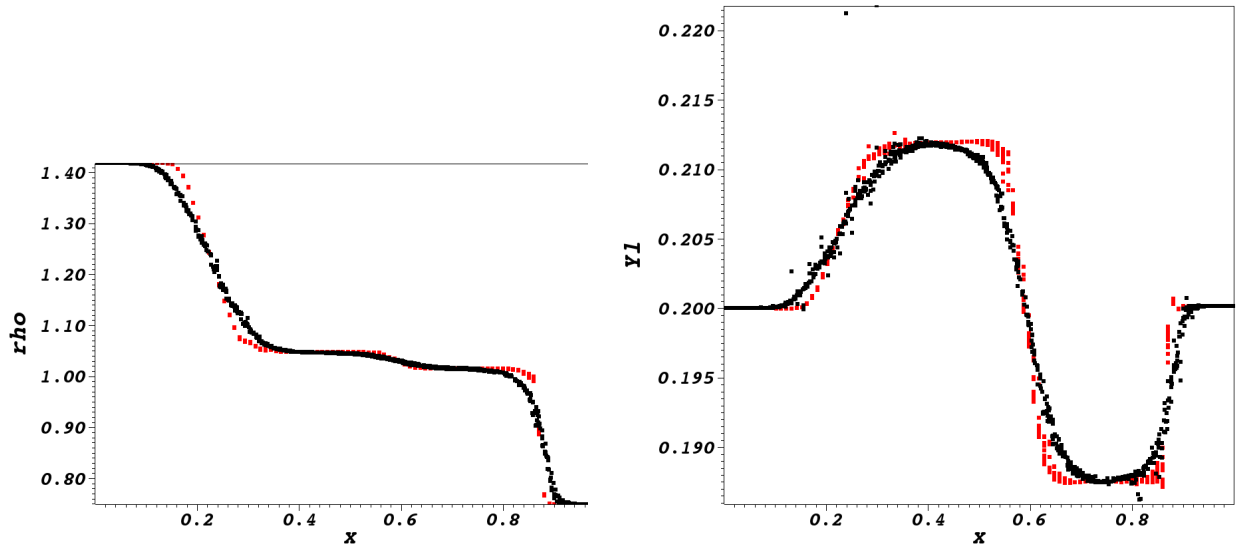


FIGURE 5.43 – Comparaison du profil de la densité (à gauche) et de la fraction massique de liquide (à droite) pour un maillage de 1000 nœuds (noir : triangle, rouge : quadrangle)

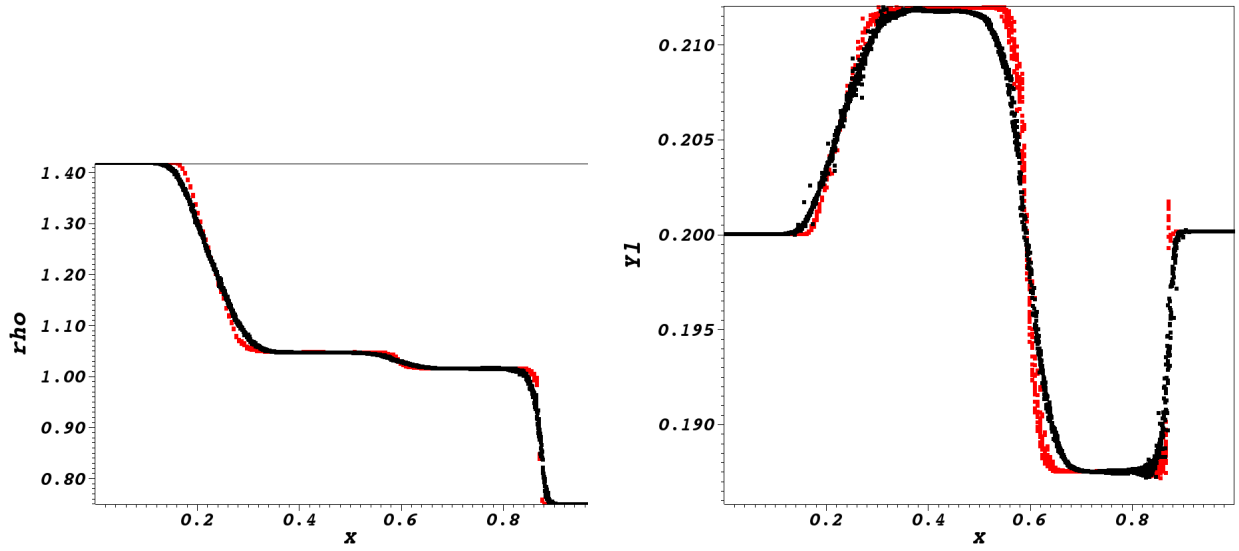


FIGURE 5.44 – Comparaison du profil de la densité (à gauche) et de la fraction massique de liquide (à droite) pour un maillage de 4000 nœuds (noir : triangle, rouge : quadrangle)

5.4.2 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe

Maintenant que nous avons vérifié la robustesse de notre méthode pour des maillages triangulaires, nous montrons ici un autre test plus complexe. Nous utilisons toujours les conditions initiales et les paramètres d'état stiffened gas du tube à choc d'un mélange liquide-vapeur (se référer aux tables 4.2 et 4.1). En revanche nous utilisons une géométrie plus complexe. Celle-ci est présentée sur la figure 5.45 avec un des maillages que nous avons utilisé. A droite et à gauche, nous imposons une condition de sortie. Les cylindres et les bords haut et bas sont

considérés comme des murs impénétrables. Ce problème peut notamment être comparé à des problèmes industriels utilisant des échangeurs de chaleur. On regarde alors l'effet d'un gradient de pression soudain provoquant des changements de phases dans l'écoulement pouvant être très dommageables pour les cylindres. Le problème est résolu avec quatre maillages, un de 5000 nœuds, un deuxième de 10000 nœuds, le troisième est constitué de 20000 nœuds et le dernier de 40000 nœuds.

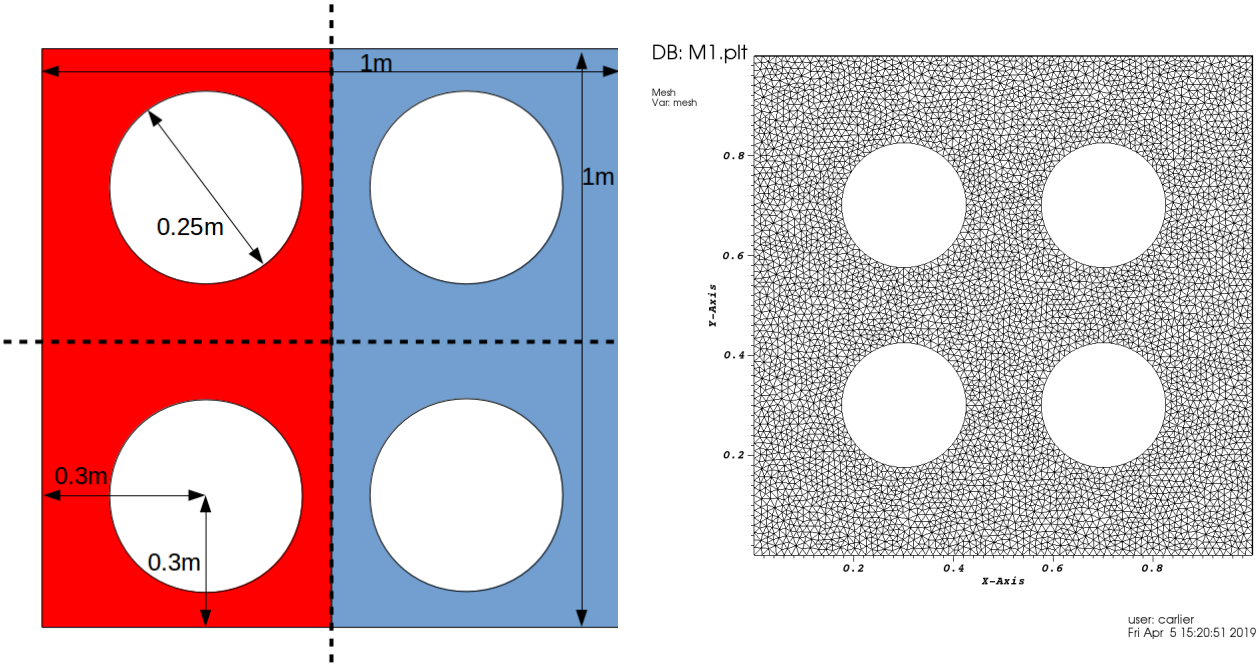


FIGURE 5.45 – Configuration (à gauche) et maillage (5000 nœuds, à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe

Les résultats sont donnés par les figures 5.46 à 5.51. Les figures 5.46, 5.47 et 5.48 présentent les résultats utilisant le maillage de 40000 nœuds. La première (figure 5.46) donne les isocontours en trois dimensions et les isolignes de la densité, on voit que contrairement au cas sans cylindre (figure 5.44), l'impact des détentes avec les cylindres augmente l'intensité des détentes. En effet, sur les cylindres à gauche, la densité est plus élevée que le cas sans cylindres alors qu'à l'impact des cylindres à droite la densité est moins élevée. Ces concentrations en pertes et en gains d'énergie sont compensées par des zones de basses et hautes densités lorsque les détentes contournent les cylindres. La figure 5.47 présente les isolignes de la pression et de la fraction massique de liquide. On peut voir que les augmentations et les baisses des isolignes de la pression correspondent à celles de la densité, en effet l'impact augmente la pression ce qui a pour effet de modifier les valeurs de la densité. En ce qui concerne les valeurs de la fraction massique de liquide on retrouve des valeurs proches du problème sans cylindre (figure 5.44) accrochées sur des couches limites contournant les cylindres. La figure 5.51 donne le champ vectoriel et les isocontours de la vitesse, cette figure permet de vérifier que les conditions de mur sont bien imposées sur les cylindres grâce aux vecteurs vitesses contournant les cylindres. En outre, on peut voir que les vitesses les plus importantes sont dans la zone de contournement des cylindres en raison du changement d'aire dans la direction de l'écoulement.

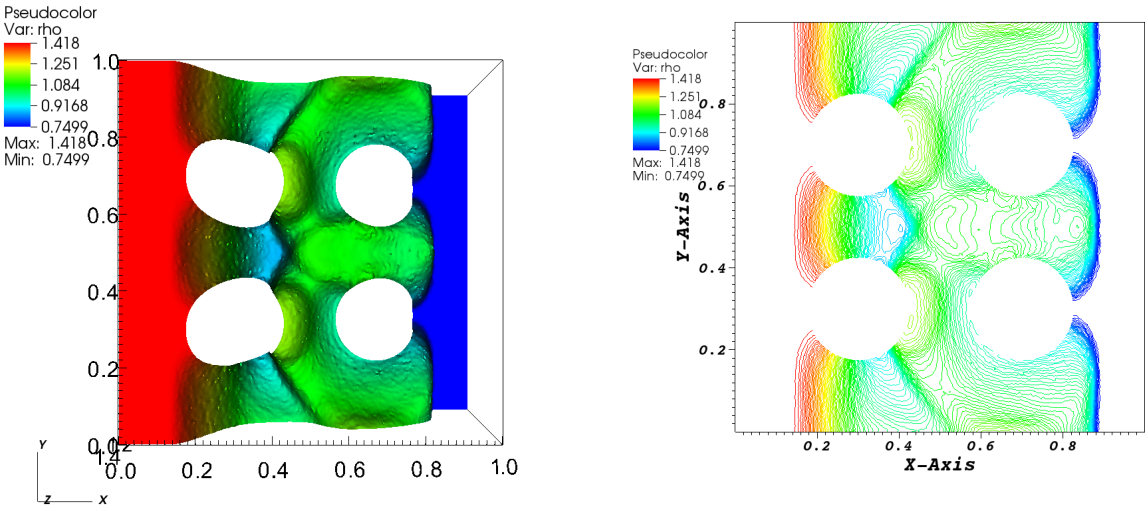


FIGURE 5.46 – Profil de la densité pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (40000 nœuds) (à gauche : isocontours 3D, à droite : isolignes)

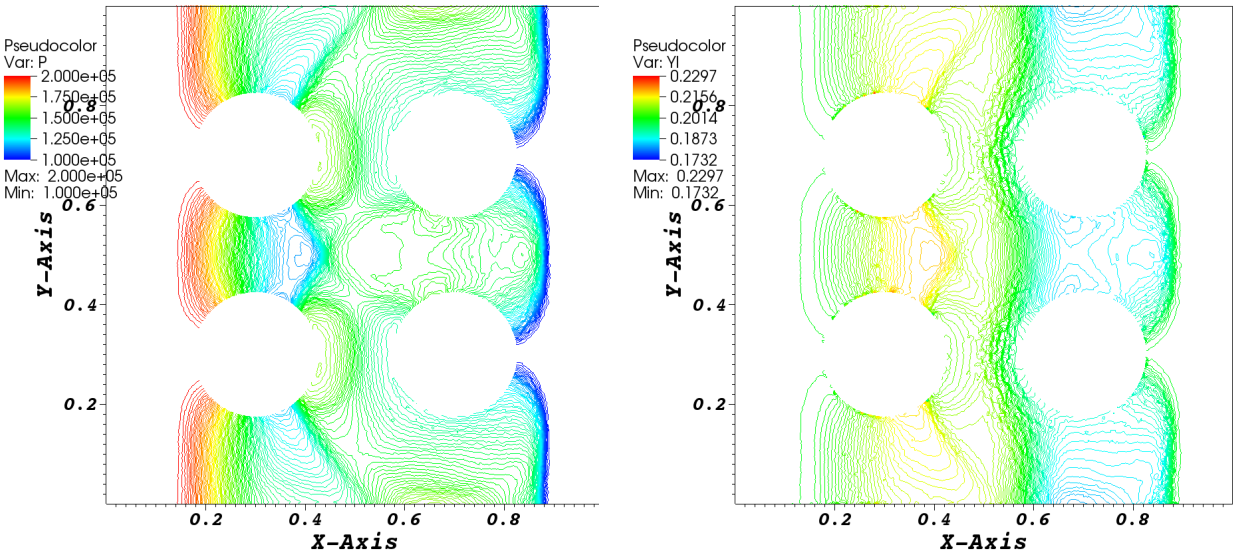


FIGURE 5.47 – Isolignes de la pression (à gauche) et de la fraction massique de liquide (à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (40000 nœuds)

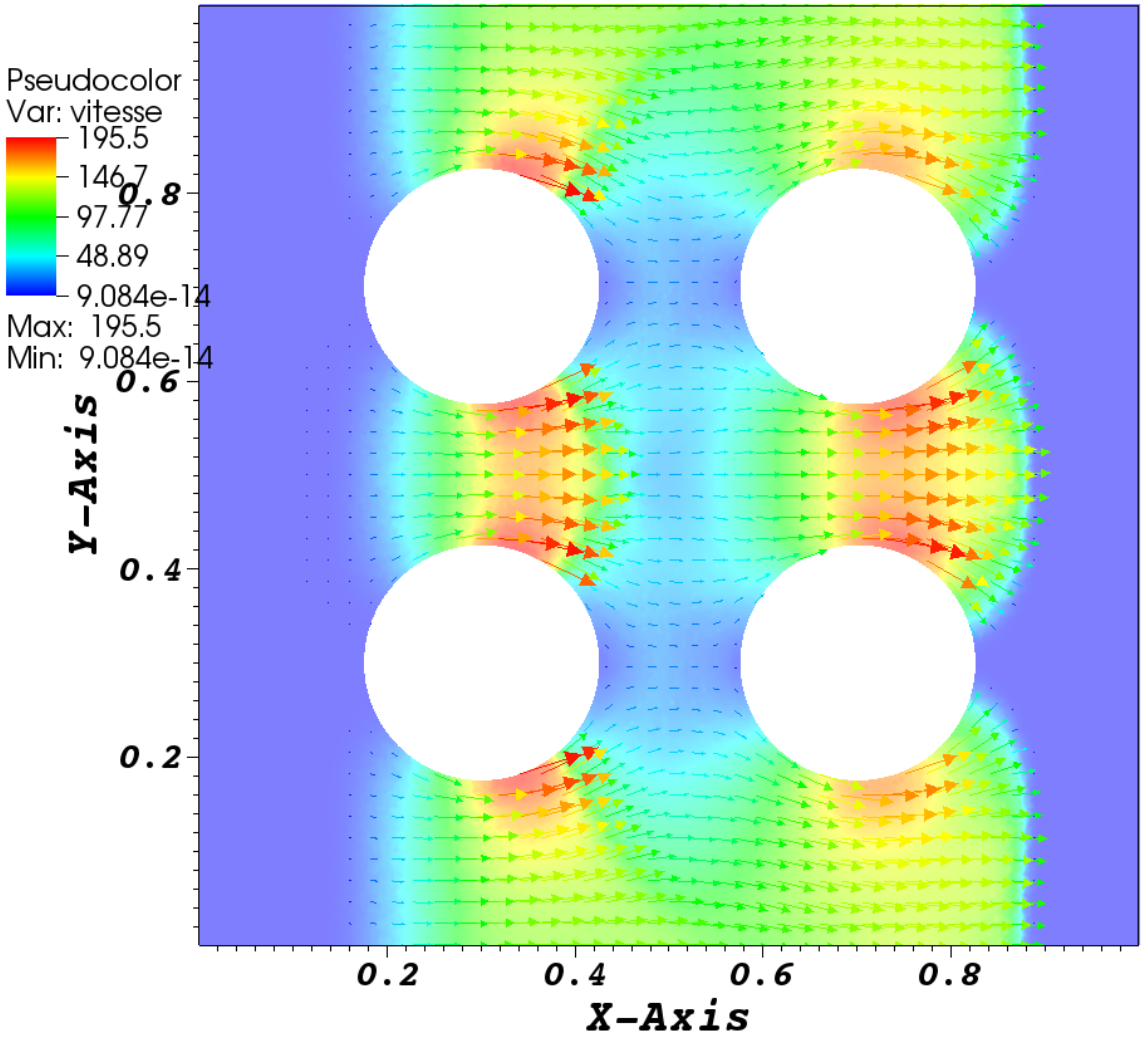


FIGURE 5.48 – Profil et champ vectoriel de la vitesse normale pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (40000 nœuds)

Les figures 5.49 et 5.50 donnent l'évolution en maillage des profils de la densité et de la vitesse (composante selon x) en coupant au centre du domaine (y=0.5m) et en coupant les cylindres (y=0.3m). En ce qui concerne les profils de la densité, à y=0.3m la vitesse évolue de manière monotone entre les cylindres. En revanche, en raison de l'arrêt brutal à l'impact des cylindres la variation de la densité est plus rapide que dans le cas sans cylindre (5.44). A y=0.5m, on peut observer l'effet du contournement des cylindres sur le profil de la densité. Au niveau des cylindres à gauche (x=0.3m), une forte baisse de la densité peut être observée. Au niveau des cylindres à droite (y=0.7m), une hausse de la densité peut être observée, par contre celle-ci est plus étalée à t=0.8ms que la baisse de la densité aux niveaux des cylindres à droite. En ce qui concerne les profils de la vitesse, à y=0.5m, on retrouve bien les maxima de la vitesse au niveau des cylindres (x=0.3m et y=0.7m), cela vient de la réduction de l'aire dans la direction de l'écoulement. A y=0.3m, les vitesses sont nulles au contact avec les cylindres et le maximum de la vitesse se situe au centre à x=0.5m. En effet, à cet emplacement la vitesse n'est pas perturbée par la déviation imposée par les cylindres.

En outre, la figure 5.51 donne le profil de la densité autour du cylindre de position x=0.3m, y=0.3m. Theta est l'angle orienté dans le sens direct en degré autour du cylindre. Theta=0 correspond aux coordonnées (x=0.425m,y=0.3m). On peut voir que la chute de la densité est la plus élevée entre les deux cylindres de centre (x=0.3m, y=0.3m) et (x=0.3m, y=0.7m) qu'entre le cylindre de centre (x=0.3m, y=0.3m) et le mur en bas de domaine. Cela vient du fait que la distance entre les deux cylindres est de 0.15m alors que la distance entre le mur et le cylindre est de 0.175m. Puisque l'aire de passage est plus grande, l'écoulement est moins compressé, d'où une baisse plus faible de la densité.

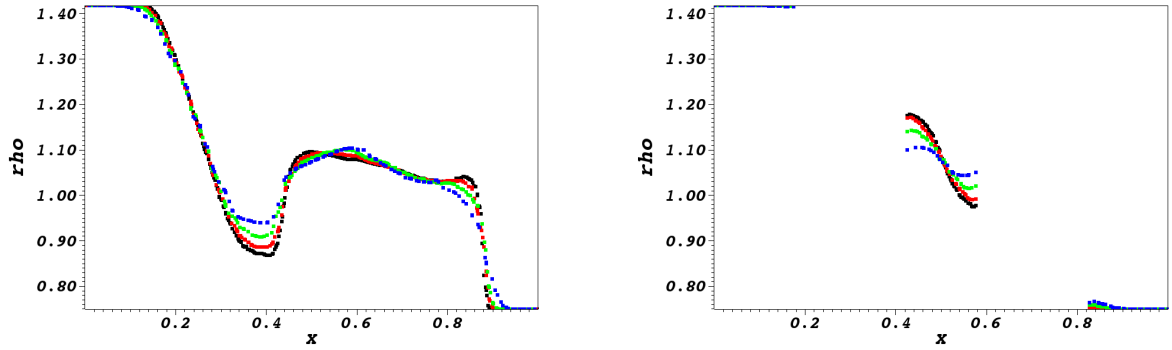


FIGURE 5.49 – Profil de la densité à y=0.5m (à gauche) et à y=0.3m (à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (noir : 40000 nœuds, rouge : 20000 nœuds, vert : 10000 nœuds, bleu : 5000 nœuds)

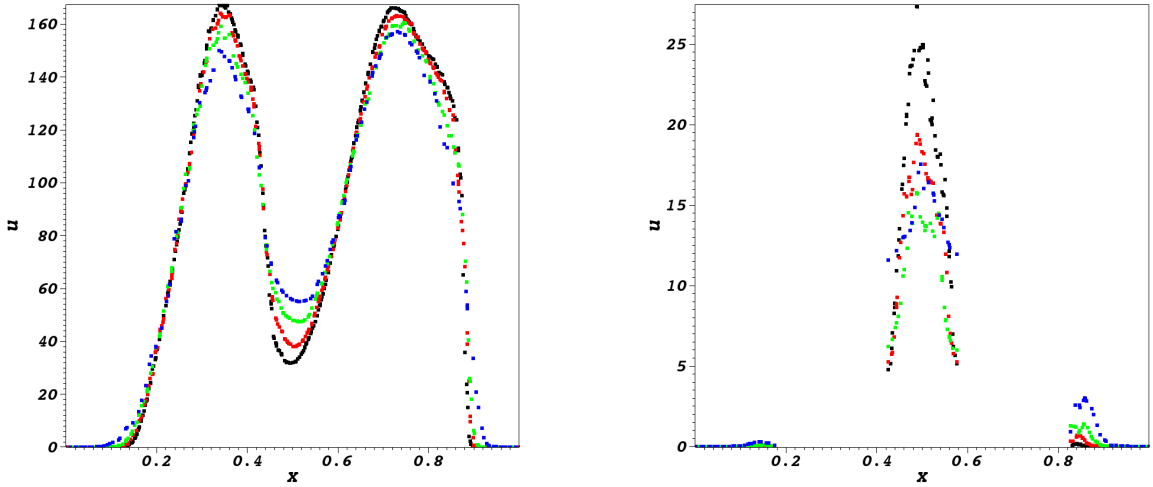


FIGURE 5.50 – Profil de la vitesse (composante selon x) à y=0.5m (à gauche) et à y=0.3m (à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (noir : 40000 nœuds, rouge : 20000 nœuds, vert : 10000 nœuds, bleu : 5000 nœuds)

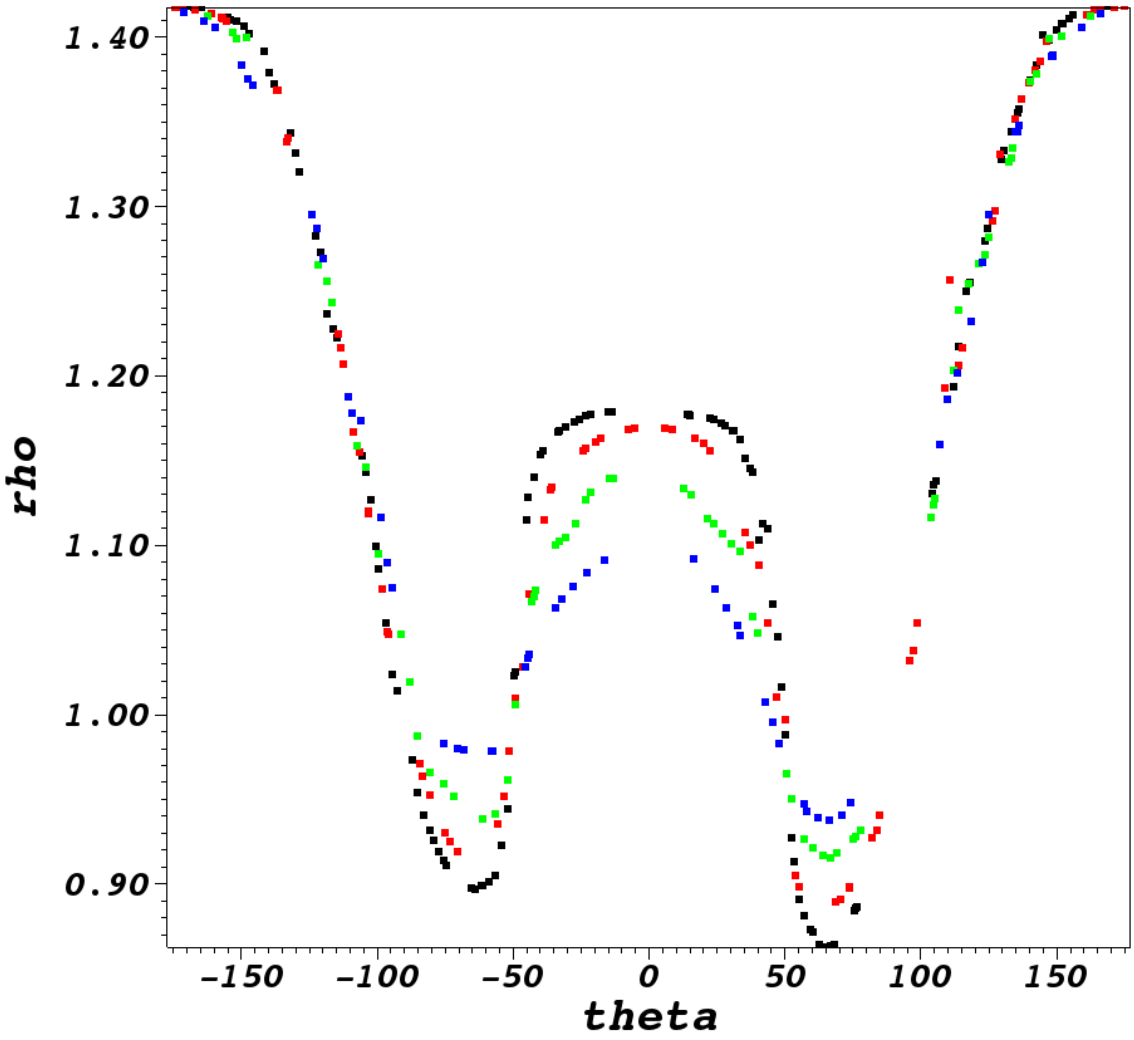


FIGURE 5.51 – Profil de la densité autour du cylindre de centre x=0.3m, y=0.3m pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (noir : 40000 nœuds, rouge : 20000 nœuds, vert : 10000 nœuds, bleu : 5000 nœuds)

5.5 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté une extension des méthodes aux résidus distribués au modèle diphasique à quatre équations. La forme conservative de ce système étant connue, nous avons pu utiliser une approche innovante permettant d'assurer la bonne convergence du système malgré une résolution sous forme non-conservative. Notre méthode numérique a alors été optimisée en utilisant une méthode de résolution à postériori basée sur l'algorithme de MOOD.

La résolution avec la méthode aux résidus distribués ainsi obtenue a alors été appliquée à de nombreux cas tests en une et deux dimensions, avec et sans transfert de masse, et confrontée à la méthode de propagation des ondes. Les résultats obtenus sont en bonnes cohérences et démontrent la capacité de notre modèle à converger vers la bonne solution faible du problème. En outre, utiliser la cascade de l'algorithme de MOOD permet d'obtenir un schéma très efficace et peu diffus avec peu d'oscillations.

Finalement, des résultats obtenus avec des maillages non-structurés dans une géométrie très complexe ont été présentés. Les résultats sont très bons et démontrent l'efficacité de notre méthode à donner des résultats précis et présentant peu d'oscillations en utilisant des maillages fortement non-structurés, même en présence de chocs.

Chapitre 6

Prise en compte des incertitudes et applications à des problèmes industriels

6.1 Principes et objectifs

La simulation numérique d'écoulements de fluides est désormais considérée comme un outil technologique fondamental au niveau industriel. Par contre, une des questions qui reste cependant toujours ouverte et qui pénalise l'utilisation de la simulation numérique concerne le degré de fiabilité de la solution obtenue. Du point de vue théorique, un consensus se dégage aujourd'hui sur la nécessité de coupler à la simulation numérique une estimation de sa fiabilité, ce qui est nécessaire pour exploiter les calculs dans l'analyse expérimentale.

Une façon naturelle d'étudier ces problèmes consiste dans la prise en compte des incertitudes expérimentales, les conditions opérationnelles (et aux limites) et la géométrie dans la simulation numérique.

Dans le cadre de la simulation d'écoulements diphasiques, plusieurs sources d'incertitude existent. En effet, les conditions initiales peuvent varier au cours du temps en raison d'un bruit extérieur et peuvent dans certains cas être difficiles à définir, par exemple des phénomènes comme l'ébullition ou la cavitation sont fortement dépendants des taux d'impureté du mélange et de la rugosité des parois. En effet, ce sont les impuretés et les trous dans les parois qui permettent la croissance de bulles.

Une autre source d'incertitude est liée au modèle. En effet, on utilise un modèle dont les paramètres sont généralement calés suite à des mesures expérimentales, les mesures expérimentales présentant elles aussi des erreurs provenant de la tolérance de l'outil de mesure. On peut en outre rajouter que nous négligeons de nombreux phénomènes comme la viscosité, la tension de surface et comme déjà présenté les transferts de masse nécessitent de nombreuses hypothèses pour être modélisés. De plus l'équation d'état stiffened gas, utilisant une approximation linéaire, est inexacte pour des fortes variations des pressions.

Des travaux récents sur les incertitudes dans les l'écoulements diphasiques peuvent par exemple être trouvés dans [107, 108, 109], où différentes sources d'incertitudes sont prises en compte dans la simulation d'écoulements cavitants. Le lecteur peut se référer aux livres de Tarantola [110], de Kaipo [111] et de Sivia [112] pour aller plus loin dans les méthodes de quantification d'incertitude.

Dans ce chapitre, on s'est donc focalisé sur la caractérisation des incertitudes et leur propagation à travers le code de calcul pour évaluer l'impact sur certaines quantités d'intérêt. On a aussi utilisé des méthodes de décomposition de la variance afin de déterminer l'impact de chaque paramètre incertain sur les variabilités du résultat numérique.

Pour mener cette analyse, on s'est basé sur la méthode des polynômes du chaos. En particulier, on a systématiquement utilisé le logiciel UQLAB [113].

Dans ce chapitre nous considérons deux cas à étudier, l'expérience de Canon [73] et l'expérience de Simpson [74]. Ces deux expériences modélisent des accidents de référence ayant lieu dans des conduites d'eau. Celles-ci présentent notamment de forts phénomènes de cavitation très dommageables. L'objectif est d'estimer la fiabilité de la simulation numérique et sa capacité prédictive.

Pour effectuer ces simulations, dans ce chapitre, nous utilisons la méthode de propagation des ondes telle qu'elle est présentée dans le chapitre 4. Nous avons choisi d'utiliser cette méthode en raison d'une très bonne vitesse des calculs. En effet, après avoir réalisé les simulations de ces expériences nous effectuons une analyse en utilisant les méthodes de quantification d'incertitude que nous avons introduites précédemment. Ces analyses demandent ainsi un grand nombre de calculs pour faire des analyses statistiques et nous avons donc préféré l'efficacité en temps de calcul du logiciel Clawpack (Clawpack est conçu pour résoudre des maillages structurés alors que notre code aux résidus distribués est conçu pour résoudre des maillages non-structurés, les traitements des tables de connectivité de notre code rd rendent donc le calcul plus lent qu'avec Clawpack) pour effectuer ces études.

Ainsi dans un premier temps, nous nous consacrons à l'expérience de Canon, pour laquelle nous effectuons une analyse tout d'abord du problème numérique avant de nous consacrer au problème de quantification d'incertitude où nous cherchons notamment à déterminer l'influence de l'incertitude des paramètres sur les résultats numériques, cela nous permet alors de déduire les variables qu'il faudrait mieux modéliser pour réduire les erreurs du modèle. Dans un second temps nous discutons de l'expérience de Simpson. Nous effectuons tout d'abord une analyse du problème numérique. Ensuite nous cherchons à évaluer l'impact de l'incertitude paramétrique sur la variabilité de certaines quantités d'intérêt.

6.2 Méthodes de quantification d'incertitude

6.2.1 Polynômes du chaos

Les méthodes de quantification d'incertitude nécessitent de reproduire un calcul numérique un grand nombre de fois pour faire des statistiques. Ainsi, si un calcul CFD a un coût en temps de calcul trop élevé il devient difficile d'appliquer ces méthodes en raison du coût trop élevé. Dans ce cas, on a recours à un métamodèle. Un métamodèle consiste à créer une relation permettant de relier directement les paramètres du problème à la solution donnée par le calcul numérique. On peut utiliser le métamodèle pour simuler un grand nombre de calculs numériques pour un temps moindre.

La construction d'un métamodèle nécessite de lancer un premier échantillon de calculs numériques suffisamment représentatif du modèle. Ensuite, on utilise ces échantillons pour créer

une relation reliant les variables incertaines aux solutions données par ces calculs. On peut ensuite utiliser notre relation pour de nouveaux échantillons. Evidemment, la solution ne sera pas exactement la même que celle du calcul numérique, il est donc nécessaire de vérifier que les résultats du métamodèle soient suffisamment proches des résultats numériques afin que son utilisation soit cohérente.

Dans notre cas, nous utilisons la méthode des polynômes du chaos (voir [114] et [109]). Il s'agit de construire un métamodèle sous la forme suivante :

$$u(\xi) = \sum_{\alpha} u_\alpha \Psi_\alpha(\xi), \tag{6.1}$$

où ξ est le vecteur des variables incertaines ξ_i avec $i = 1, 2, ..., n_\xi$, les u_α sont des coefficients constants à déterminer et les $\Psi_\alpha(\xi)$ les fonctions orthogonales aux distributions des variables incertaines. Théoriquement la somme sur α est infinie, mais en pratique on doit tronquer la somme pour construire un espace reliant nos quantités. Le nombre de termes utilisés est défini par l'ordre n_p du polynôme du chaos. La somme comprend alors $\frac{(n_\xi + n_p)!}{n_\xi ! n_p!}$ termes.

Par la suite, nous utilisons des distributions uniformes de nos paramètres incertains, la fonction orthogonale correspondante est alors donnée par des polynômes de Legendre comme expliqué dans [115].

Il reste alors à déterminer les coefficients u_α, pour cela nous avons utilisé la méthode OMP : Orthogonal Matching Pursuit du logiciel UQLAB, nous renvoyons à la notice du logiciel [115] et à [116] pour plus de détails.

6.2.2 Indices de Sobol

6.2.2.1 Définition des indices de Sobol

Une méthode permettant d'évaluer l'influence des paramètres incertains sur les résultats sont les méthodes de décomposition de la variance aussi appelée décomposition ANOVA. Comme leur nom l'indique ces méthodes consistent à partir de la variance obtenue en faisant varier tous les paramètres incertains puis de décomposer les contributions sur la variance de chaque variable. On peut ainsi déterminer la variance du modèle pour des variations individuelles des variables mais aussi des effets couplés dus à la variation de plusieurs variables sur la variance. Pour effectuer cette décomposition dans ce travail, nous avons recours à la méthode des indices de Sobol [117] présentée dans [118] et [119] en utilisant les polynômes du chaos. Nous allons dans cette section rappeler la définition des indices de Sobol et leurs utilisations pour décomposer la variance en reprenant ce qui est présenté dans [118] et [119]. Ensuite nous verrons comment la construction d'un métamodèle utilisant les polynômes du chaos permet de déterminer aisément les indices de Sobol.

On considère la fonction $f(\xi)$ reliant les variables ξ aux résultats y. Les variables sont définies dans l'espace K^{n_ξ} de dimension n_ξ tel que :

$$y = f(\xi).$$

La décomposition de Sobol de la fonction $f(\xi)$ s'écrit alors :

$$f(\xi) = f_0 + \sum_{i=1}^{n_\xi} f_i(\xi_i) + \sum_{1\leq i< j\leq n_\xi} f_{i,j}(\xi_i,\xi_j) + ... + f_{1,2,...,n_\xi}(\xi_1,...,\xi_{n_\xi}), \tag{6.2}$$

cette décomposition est composée de toutes les sommes de dimension croissante de 1 à n_ξ. f_0 est une constante calculée telle que :

$$f_0 = \int_{K^{n_\xi}} f(\xi) d\xi.$$

Pour calculer les termes $f_i(\xi_i)$ et $f_{i,j}(\xi_i,\xi_j)$ on introduit la notation $\xi_{\sim i}$ signifiant que l'on exclut la composante ξ_i du vecteur de paramètres ξ, les termes $f_i(\xi_i)$ et $f_{i,j}(\xi_i,\xi_j)$ sont alors donnés par les relations suivantes :

$$\begin{aligned} f_i(\xi_i) &= \int_{K^{n_\xi-1}} f(\xi) d\xi_{\sim i} - f_0, \\ f_{ij}(\xi_i,\xi_j) &= \int_{K^{n_\xi-2}} f(\xi) d\xi_{\sim\{i,j\}} - f_i(\xi_i) - f_j(\xi_j) - f_0. \end{aligned} \tag{6.3}$$

Finalement, on peut noter deux propriétés des termes des sommes de la relation (6.2) :

— pour un terme $f_{i1,..,is}(\xi_{i1},...,\xi_{is})$, l'intégrale de ce terme avec le paramètre ξ_k inclus dans $(\xi_{i1},...,\xi_{is})$ est nulle soit :

$$\int_{K^{\xi_k}} f_{i1,..,is}(\xi_{i1},...,\xi_{is}) d\xi_k = 0 \qquad \text{avec } i1 \leq ik \leq is.$$

— pour deux sets de paramètres $(\xi_{i1},...,\xi_{is})$ et $(\xi_{j1},...,\xi_{js})$ différents, les termes de somme $f_{i1,..,is}(\xi_{i1},...,\xi_{is})$ et $f_{j1,..,js}(\xi_{j1},...,\xi_{js})$ sont orthogonaux entre eux tels que les intégrales sur l'espace K^{n_ξ} :

$$\int_{K^n} f_{i1,..,is}(\xi_{i1},...,\xi_{is}) f_{j1,..,js}(\xi_{j1},...,\xi_{js}) d\xi = 0,$$

soient nulles.

Quand ces conditions sont vérifiées la décomposition de Sobol est unique.

On considère maintenant que chacun des paramètres ξ_i sont aléatoires, on peut alors définir la variance ou variance totale :

$$D = \sigma[f(\xi)] = \int_{K^{n_\xi}} f^2(\xi) d\xi - f_0^2, \tag{6.4}$$

et les variances partielles :

$$D_{i1,...,is} = \int_{K^{n_{\xi_{is}}}} f^2_{i1,..,is}(\xi_{i1},...,\xi_{is}) d\xi_{i1},...,\xi_{is}. \tag{6.5}$$

En prenant le carré puis en intégrant sur K^{n_ξ} la décomposition de Sobol (6.2) on obtient la relation suivante entre ces quantités :

$$D = \sum_{i=1}^{n_\xi} D_i + \sum_{1\leq i\leq j\leq n_\xi} D_{i,j} + ... + D_{1,2,...,n_\xi}. \tag{6.6}$$

On introduit alors les indices de Sobol :

$$S_{i1,...,is} = \frac{D_{i1,...,is}}{D}, \tag{6.7}$$

où l'équation (6.6) se réécrit alors sous la forme suivante :

$$1 = \sum_{i=1}^{n_\xi} S_i + \sum_{1\leq i\leq j\leq n_\xi} S_{i,j} + ... + S_{1,2,...,n_\xi}. \tag{6.8}$$

Les termes (6.7) sont appelés les indices de Sobol, comme le montre les relations (6.6) et (6.8) ils permettent de décomposer la variable en déterminant ainsi la contribution de chaque incertitude sur la variance globale. On distingue alors trois types d'indices de Sobol :

- l'indice de Sobol au premier ordre S_i associé à la variable ξ_i permettant ainsi de mesurer la contribution de chaque paramètre sur la variance globale.
- les indices de Sobol couplés $S_{i1,...,is}$ avec i1 différent de is, ces indices indiquent l'effet sur la variance dû à des interactions couplées entre les paramètres du set $\xi_{i1,...,is}$. Ces indices prennent seulement les effets couplés du set $\xi_{i1,...,is}$ sur la variance en excluant les effets des indices de Sobol au premier ordre S_{i1} à S_{is} et permettent de voir l'effet des interactions des paramètres sur l'incertitude des résultats. Comme montré par l'expression (6.8), la somme des indices couplés et des indices au premier ordre vaut 1. La somme des variances déterminées avec les effets individuels des variables et les effets couplés des variables préserve donc bien la variance totale du problème.
- les indices de Sobol totaux, S_i^t, ils indiquent l'influence totale de la variable ξ_i en prenant son effet individuel S_i sur la variance ainsi que ses interations avec les indices couplés $S_{i1,...,is}$ pour tous les sets $\xi_{i1,...,is}$ comprenant le paramètre ξ_i.

6.2.2.2 Détermination à partir des polynômes du chaos

La création d'un métamodèle en utilisant les polynômes du chaos est très pratique parce que celle-ci permet de calculer facilement les indices de Sobol. Nous présentons dans cette section, la méthode présentée dans [119] pour déterminer les indices de Sobol à partir d'un modèle utilisant les polynômes du chaos.

On rappelle tout d'abord l'expression (6.1) d'un polynôme du chaos :

$$u(\xi) = \sum_\alpha u_\alpha \Psi_\alpha(\xi),$$

α est l'ensemble des $(\alpha_1, ..., \alpha_{n_\xi})$ tel que $\sum_{i=1}^{n_\xi} \alpha_i \leq \alpha$. On considère l'ensemble $\mathscr{A}_{i1,...,is}$ avec $(i1, ..., is) \subset (1, ..., n_\xi)$ et $(i1, ..., is) \cap (j1, ..., js) = (1, ..., n_\xi)$. L'ensemble $\mathscr{A}_{i1,...,is}$ regroupe tous les α de la somme de l'expression (6.1) tel que les valeurs des α_i sont supérieures à zéro pour tous les i inclus dans (i1,...,is) alors que les valeurs des α_i sont nulles pour tous les i inclus dans (j1,...,js). On peut alors réécrire l'expression (6.1) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} u(\xi) = u_0 + \sum_i^{n_\xi} \sum_{\alpha\in\mathscr{A}_i} u_\alpha \Psi_\alpha(\xi_i) + \sum_{1\leq i1\leq i2\leq n_\xi} \sum_{\alpha\in\mathscr{A}_{i1,i2}} u_\alpha \Psi_\alpha(\xi_{i1}, \xi_{i2}) + ...+ \\ \sum_{1\leq i1\leq ...\leq is\leq n_\xi} \sum_{\alpha\in\mathscr{A}_{i1,...,is}} u_\alpha \Psi_\alpha(\xi_{i1}, ..., \xi_{is}) + ... + \sum_{\alpha\in\mathscr{A}_{1,2,...,n_\xi}} u_\alpha \Psi_\alpha(\xi_1, ..., \xi_{n_\xi}). \end{aligned} \tag{6.9}$$

En comparant les relations (6.2) et (6.9) on voit que la structure des sommes de ces deux relations sont les mêmes. La décomposition de Sobol étant unique on en déduit que la relation

(6.9) est la décomposition de Sobol de notre problème et la relation entre les termes de sommes suivante :

$$f_{i1,..,is}(\xi_{i1},...,\xi_{is}) = \sum_{\alpha \in \mathscr{A}_{i1,...,is}} u_\alpha \Psi_\alpha(\xi_{i1},...,\xi_{is}). \tag{6.10}$$

Finalement, toujours en suivant [119], la moyenne $\overline{u}_\xi$ et la variance D_{PC} de (6.1) sont données par :

$$\begin{aligned} \overline{u}_\xi &= u_0, \\ D^{PC} = Var[\sum_\alpha u_\alpha \Psi_\alpha(\xi)] &= \sum_\alpha u_\alpha^2 E[\Psi_\alpha^2(\xi)], \end{aligned} \tag{6.11}$$

$E[\Psi_\alpha^2(\xi)]$ est la moyenne :

$$E[\Psi_\alpha^2(\xi)] = \frac{1}{N}\sum_{i_1}^{N} \Psi_\alpha^2(\xi_i)$$

des N échantillons ayant été utilisés pour construire le métamodèle.

De même les variances partielles s'écrivent :

$$D^{PC}_{i1,..,is} = \sum_{\alpha \in \mathscr{A}_{i1,...,is}} u_\alpha^2 E[\Psi_\alpha^2(\xi_{i1},...,\xi_{is})]. \tag{6.12}$$

On peut finalement utiliser la relation (6.7) pour calculer les indices de Sobol :

$$S^{PC}_{i1,..,is} = \frac{D^{PC}_{i1,..,is}}{D^{PC}}. \tag{6.13}$$

Pour calculer les indices totaux on utilise la relation suivante :

$$S^{PC,t}_{i1,..,is} = 1 - \sum_{\alpha \notin \mathscr{A}_{i1,...,is}} S^{PC}_\alpha \tag{6.14}$$

Cette corrélation directe entre les polynômes du chaos (PC) et la décomposition de la variance est très utile dans la pratique. En effet, l'effort employé pour construire les PC nous permet d'avoir aussi gratuitement la décomposition ANOVA.

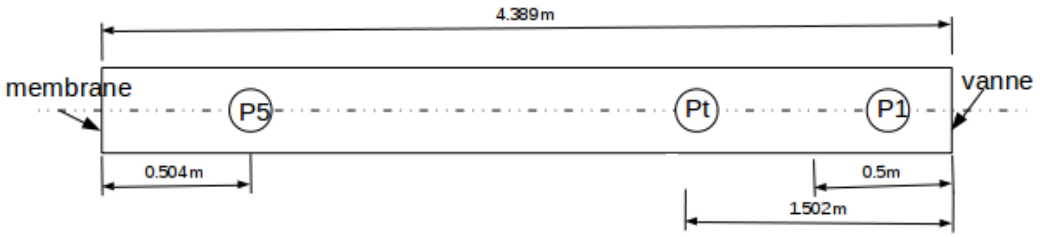


FIGURE 6.1 – Configuration expérimentale de l'expérience de Canon [120]

6.3 Expérience de Canon

6.3.1 Problème numérique

6.3.1.1 Formulation du problème numérique

La première des expériences que nous traitons est l'une des expériences menées par Riegel [73]. Dans la littérature celle-ci est appelée expérience de Canon ([120], [121]). Celle-ci simule un des accidents de référence en raison de la rupture d'une conduite contenant de l'eau à haute pression. Cela provoque une décompression intense et la cavitation de l'eau. On considère le cas avec P=32bar, T=220˚C et une ouverture complète de la membrane.

Le dispositif utilisé par Riegel est illustré sur la figure 6.1. On considère une conduite contenant de l'eau à haute pression séparée du milieu extérieur par une membrane dont l'état initial est donné dans le tableau 6.1. L'autre bord est caractérisé par un mur impénétrable. A l'instant initial la membrane se brise. L'état du milieu est donné par le tableau 6.2, puisque nous effectuons un calcul diphasique, la présence d'air est négligée et on considère que le milieu est constamment composé de vapeur à pression atmosphérique provenant de la fuite de la conduite. L'eau sous forme liquide et sous forme vapeur est simulée par une loi d'état stiffened gas avec les coefficients reportés sur la table 6.3.

Des mesures sont alors effectuées par les capteurs P1 et P5 pour suivre l'évolution de la pression et sur le capteur Pt pour suivre l'évolution de la fraction volumique de vapeur.

α_v	P(bar)	u(m/s)	T(˚C)
$1e^{-3}$	32	0	220

TABLE 6.1 – Etats initiaux dans la conduite de Canon [120]

α_v	P(bar)	u(m/s)	T(˚C)
$(1-1e^{-3})$	1	0	220

TABLE 6.2 – Etats imposés dans le conteneur [120]

	γ	P_∞	c_v	q	q'
liquide	1.66333	769317123.86	2807.61	-1359570	11671.61
vapeur	1.334	0	1162	2032350	2351.11

TABLE 6.3 – Coefficients stiffened gas de Canon [120]

Finalement, en ce qui concerne le traitement des transferts de masse, ceux-ci ont été réalisés de trois manières afin de comparer les résultats (nous rappelons que Θ_t est le temps de relaxation

des potentiels chimiques, en outre la définition du terme source des transferts chimiques et sa résolution sont présentées dans la section 4.2.3.3). Les transferts chimiques ont été réalisés avec des tranferts instantanés, soit $\Theta_t = 0$, puis avec des formules provenant de l'étude de Bilicki [14] sur l'évaporation de l'eau. Celles-ci sont rappelées par la relation (6.15) pour la première :

$$\begin{cases} \Theta_t = (\Theta_0 \alpha_v^{-0.257} \psi^{-2.24})/1000, \\ \Theta_0 = 6.51e^{-4}, \\ \psi = \frac{[P_s(T_{in})-P]}{P_s(T_{in})}, \end{cases} \tag{6.15}$$

et la relation (6.16) pour la deuxième :

$$\begin{cases} \Theta_t = \Theta_0 \alpha_v^{-0.54} \psi^{-1.76}, \\ \Theta_0 = 3.84e^{-7}, \\ \psi = \frac{[P_s(T_{in})-P]}{P_c - P(T_{in})}. \end{cases} \tag{6.16}$$

On rajoute que comme suggéré dans [121] la première de ces relations est divisée par 1000 pour avoir de meilleurs résultats. En effet, cette première relation est introduite pour de l'évaporation pour des faibles pressions inférieures à 10 bar, les pressions considérées étant plus élevées, la vitesse d'évaporation est donc plus forte, d'où un temps de relaxation plus faible.

6.3.1.2 Résultats numériques

On montre dans cette section les résultats obtenus en utilisant la méthode de propagation des ondes pour les modèles à quatre et six équations avec la méthode de propagation des ondes. On peut observer l'évolution de la pression par rapport au temps pour le capteur P1 sur la figure 6.2 et pour le capteur P5 sur la figure 6.3. De plus, on représente la fraction volumique de vapeur du capteur Pt sur la figure 6.4. Premièrement, on analyse donc la convergence en maillage des deux modèles pour les trois modélisations du temps de relaxation chimique considérées. Comme pour les résultats du chapitre 4 les résultats des deux modèles tendent vers le même résultat et les résultats du modèle à quatre équations convergent plus rapidement. En revanche la valeur de Θ_t semble influencer l'évolution temporelle des variables, les meilleurs résultats sont ceux obtenus avec $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$.

Comme observable dans les différents résultats de la littérature ([120], [121]), les résultats présentent la bonne valeur du plateau de pression à 20 bar. En revanche, la diminution de la pression de 20 bar à 0.1 bar se produit avec 0.2s d'avance pour les résultats numériques par rapport aux résultats expérimentaux. Nous précisons que cette valeur correspond à la pression de saturation du fluide. Nous allons donc dans la prochaine section, considérer certaines variables incertaines du domaine afin d'observer la variabilité de la solution numérique due à l'incertitude de ces variables. Pour les simulations à venir, nous avons utilisé le modèle à quatre équations avec un maillage de 500 nœuds ainsi que $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$ pour modéliser les tranferts de masse.

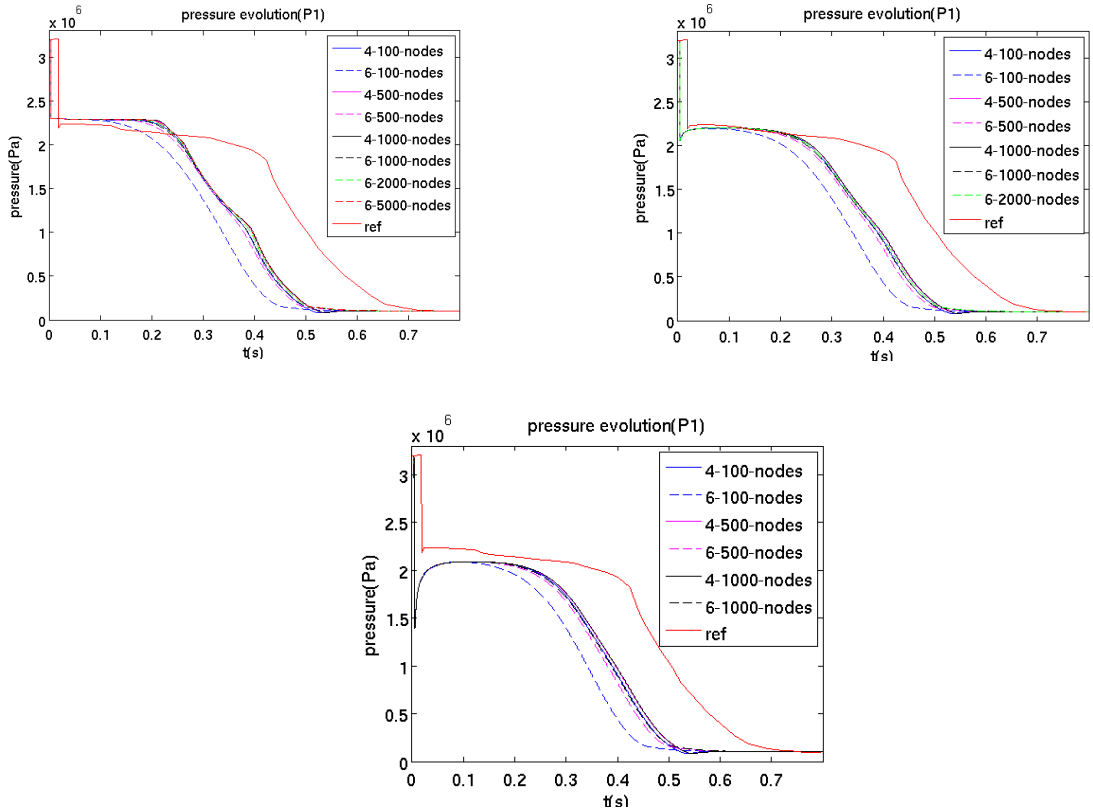


FIGURE 6.2 – Profil de la pression du capteur P1 pour l'expérience de Canon obtenu avec les modèles à quatre équations et à six équations (à gauche : $\Theta_t = 0$, à droite : $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$, au centre : $\Theta_t = \Theta_{bilicki2}$)

6.3.2 Prise en compte des incertitudes

6.3.2.1 Caractérisation des incertitudes

Dans un premier temps, nous avons défini les paramètres pour lesquels nous effectuons l'analyse et les bornes à considérer. Nous avons considéré que la pression initiale a une erreur de $\pm 5\%$. En outre selon [73] la température radiale avait une inhomogénéité pouvant aller jusqu'à $\pm 10K$. Les relations (6.15) pour calculer les transferts de masse sont dépendantes de la fraction volumique de vapeur. Nous avons donc aussi fait varier celle-ci entre $1e^{\pm -2}_{-4}$. Finalement, pour influencer les transferts de masse nous avons fait varier arbitrairement les paramètres de l'équation d'état du mélange. Les deux variables considérées incertaines sont les coefficients q_l et $q_l^{'}$. Afin que la variation de ces deux paramètres soit cohérente, nous faisons varier aléatoirement q_l, $q_l^{'}$ est alors calculé en utilisant l'égalité (4.21). Pour fermer cette dernière équation nous utilisons la valeur tirée des tables de l'eau $T_{sat}(P = 20bar) = 485.37K$. Cela permet ainsi de conserver la valeur de 20 bar du plateau de pression. Les paramètres d'incertitude sont compilés dans la table 6.4.

6.3.2.2 Analyse par décomposition ANOVA

Comme expliqué dans la section 6.2.1, un premier échantillonage suffisamment représentatif du modèle numérique est nécessaire. Plusieurs tailles d'échantillons ont été utilisés jusqu'à

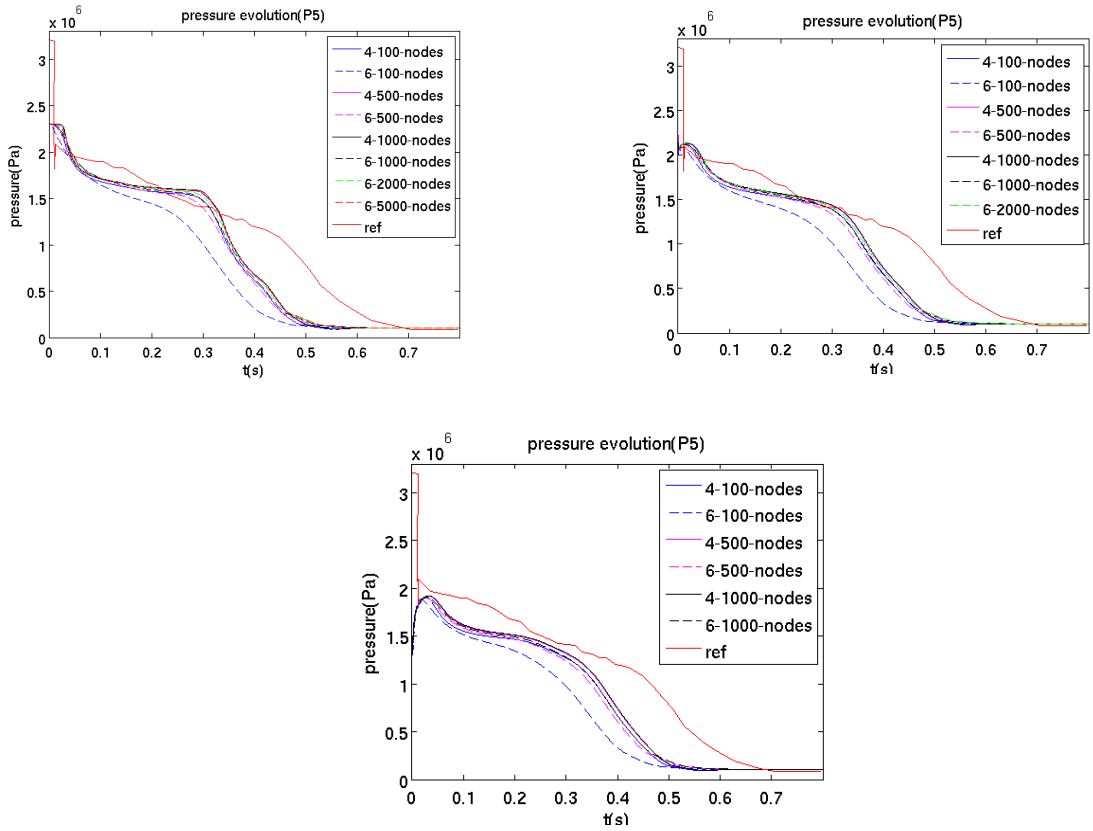


FIGURE 6.3 – Profil de la pression du capteur P5 pour l'expérience de Canon obtenu avec les modèles à quatre équations et à six équations (à gauche : $\Theta_t = 0$, à droite : $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$, au centre : $\Theta_t = \Theta_{bilicki2}$)

	T(°C)	P(bar)	α_v	q_l	$q_l^{'}$
min	210	30.4	$1e^{-4}$	-2000000	$f(q_l)$
max	230	33.6	$1e^{-2}$	-500000	$f(q_l)$

TABLE 6.4 – Incertitude du cas Canon

obtenir un métamodèle reproduisant le calcul numérique. Ces échantillonages aléatoires ont été construits par latin hypercube sampling (LHS) (voir [122]). Nous avons alors pu observer qu'un LHS de 800 échantillons était suffisant pour atteindre une bonne précision du métamodèle. Nous allons donc présenter la construction du métamodèle obtenu avec ce LHS.

Comme expliqué dans la section 6.2.2, notre métamodèle est un modèle mathématique qui relie les variables incertaines (pression, température, taux d'impureté et paramètres de l'équation d'état) aux quantités que nous étudions (évolution des pressions aux capteurs P1 et P5 et de la fraction volumique au capteur Pt). Ce métamodèle a été construit, pour les temps $0.01 : 0.01 : 0.8s$ (un métamodèle pour chaque pas de temps), avec le logiciel UQLAB en utilisant des polynômes du chaos et en choisissant l'ordre permettant de minimiser l'erreur entre le métamodèle et les calculs CFD.

Deux méthodes ont été utilisées pour vérifier la validité du métamodèle . La première utilise une technique appelée LOO (leave-one-out), où l'on calcule la quantité suivante :

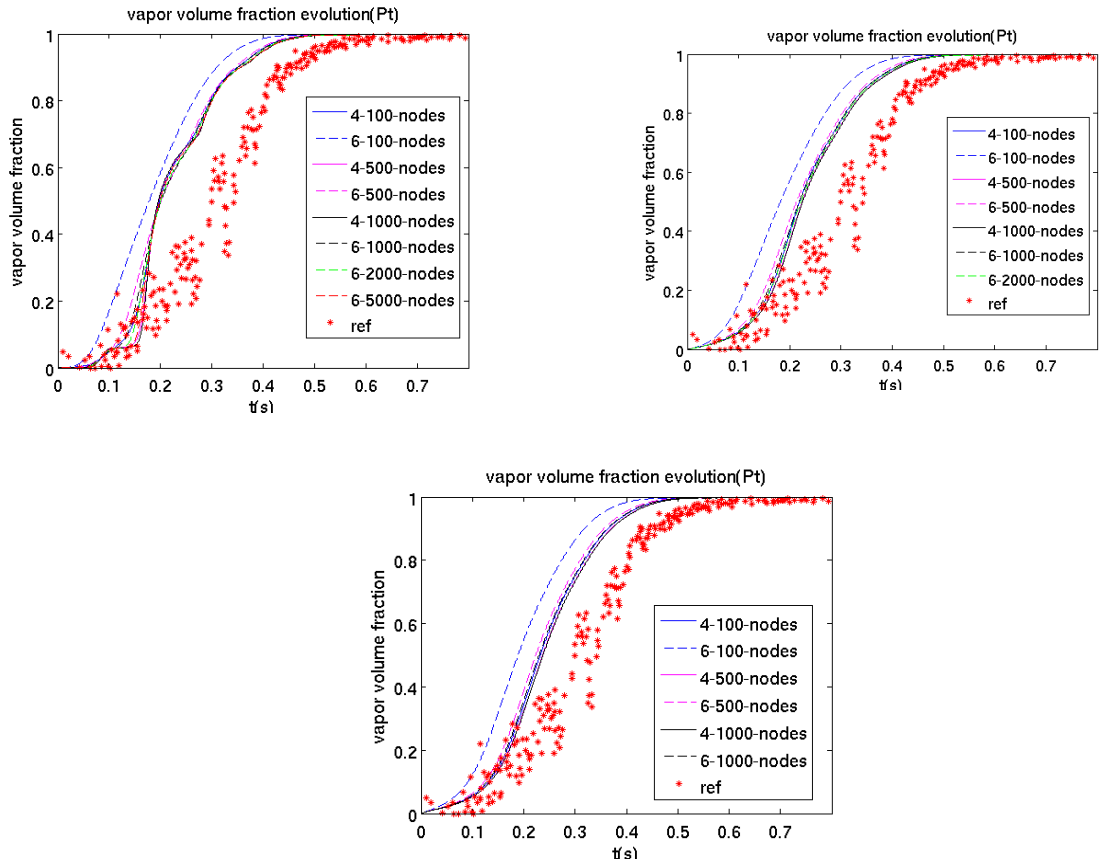


FIGURE 6.4 – Profil de la fraction volumique de vapeur du capteur Pt pour l'expérience de Canon obtenu avec les modèles à quatre équations et à six équations (à gauche : $\Theta_t = 0$, à droite : $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$, au centre : $\Theta_t = \Theta_{bilicki2}$)

$$L00 = \frac{\sum_{i=1,N}(M(\vartheta_i) - M^{Pc\setminus i}(\vartheta_i))^2}{\sum_{i=1,N}(M(\vartheta_i) - \overline{M(\vartheta)})^2}. \tag{6.17}$$

avec $M(\vartheta)$ le résultat numérique et $\overline{M(\vartheta)}$ la moyenne de toutes les N simulations utilisées c'est à dire :

$$\overline{M(\vartheta)} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} M(\vartheta_i)$$

Le terme $M^{Pc}(\vartheta)$ quant à lui est le résultat obtenu avec le métamodèle construit en utilisant tous les échantillons disponibles. Par construction, le métamodèle donne les mêmes résultats que les simulations numériques pour les paramètres des échantillons utilisés lors de sa conception. Pour cette raison, pour chaque échantillon ϑ_i on construit les métamodèles $M^{Pc\setminus i}(\vartheta)$, ces métamodèles sont contruits de la même manière que le métamodèle $M^{Pc(\vartheta)}$ mais en excluant l'échantillon ϑ_i pour calculer les coefficients u_α du métamodèle. On utilise alors le métamodèle $M^{Pc\setminus i}(\vartheta)$ pour calculer l'échantillon ϑ_i. L'erreur entre ces résultats et les résultats CFD permet alors de vérifier la consistance du métamodèle pour de nouveaux échantillons. Comme le montre la figure 6.5, où on a représenté la valeur LOO résultant de la construction du métamodèle, les ordres choisis sont associés à un LOO du métamodèle très faible.

En outre, pour s'assurer de la validité du modèle, nous avons tiré 10 nouveaux échantillons

aléatoires puis comparé les résultats du calcul numérique avec les résultats du métamodèle. Sur la figure 6.6, on voit que le métamodèle simule très bien le calcul numérique. On peut tout de même noter quelques défauts pour les plateaux de 0.1 bar mais cette partie n'est pas importante pour la suite de l'étude. Pour avoir une meilleure visibilité de l'erreur de notre métamodèle nous avons calculé l'erreur pour chaque pas de la façon suivante :

$$L^2 = \sqrt{(\sum_{i=1}^{79} \frac{M(\vartheta_i) - M^{Pc}(\vartheta_i)}{M(\vartheta_i)})^2}.$$

Cette erreur est représentée sur la figure 6.7. Comme déjà dit l'erreur des pressions à 0.4s devient plus élevée en raison des petites oscillations sur les plateaux de 0.1 bar. Puisque nos erreurs sont calculées en cumulant les erreurs sur les simulations on peut conclure de la figure 6.7 que notre métamodèle reproduit très bien le calcul numérique.

Une fois que le métamodèle est construit et validé, nous pouvons l'utiliser pour calculer les moments statistiques de différentes quantités d'intérêt (moyenne et variance) et effectuer également une décomposition ANOVA. Pour cela nous calculons les indices de Sobol totaux et au premier ordre de notre problème d'incertitude. Comme présenté dans la section 4.2.2, la construction d'un métamodèle permet de déterminer aisément les indices de Sobol. On présente par la suite dans les figures 6.8, 6.9 et 6.10, la variation de la solution considérée à plus ou moins l'écart type, les indices de Sobol au premier ordre et totaux, pour la fraction volumique du capteur Pt, la pression du capteur P1 et la pression du capteur P5, respectivement.

Cela permet d'observer l'influence de chacun des paramètres au cours du temps. On peut conclure que l'incertitude influe surtout dans la zone 0.05 :0.55s.

Les résultats montrent que l'incertitude sur la pression et la fraction volumique a peu d'effet sur la variance de nos quantités d'intérêt. En revanche la température influe un peu sur les résultats tandis que les paramètres de l'équation d'état influent énormément sur le calcul. On voit en outre un léger effet couplé entre la température et les paramètres de l'équation d'état. En effet, les variances associées à la température et aux paramètres de l'équation d'état en utilisant les indices totaux sont plus élevées que leur variance en utilisant les indices au premier ordre. Cela vient du fait que les indices au premier ordre prennent uniquement en compte l'effet des paramètres indépendamment alors que les indices totaux prennent aussi en compte les effets couplés entre les variables sur la variance. L'effet couplé entre la température et l'équation d'état vient du fait que ces deux paramètres influent sur l'intensité et la vitesse des transferts de masse et les transferts de masse sont le mécanisme essentiel de l'expérience de Canon.

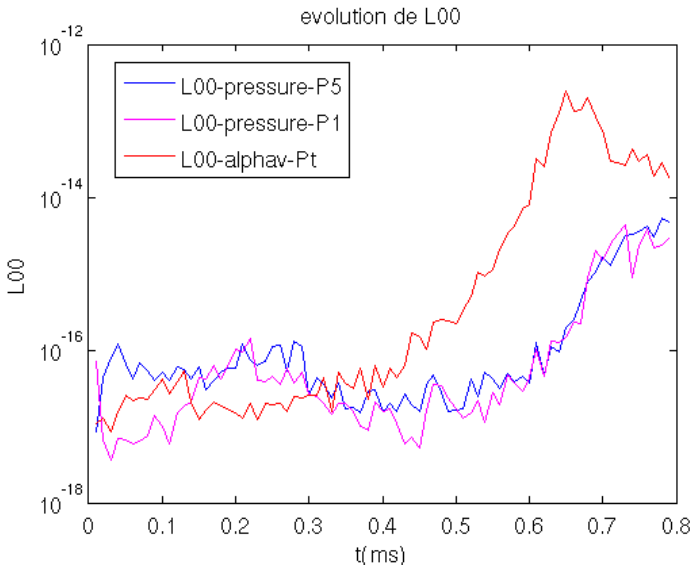


FIGURE 6.5 – Leave-one-out (L00) du métamodèle construit pour le problème de Canon

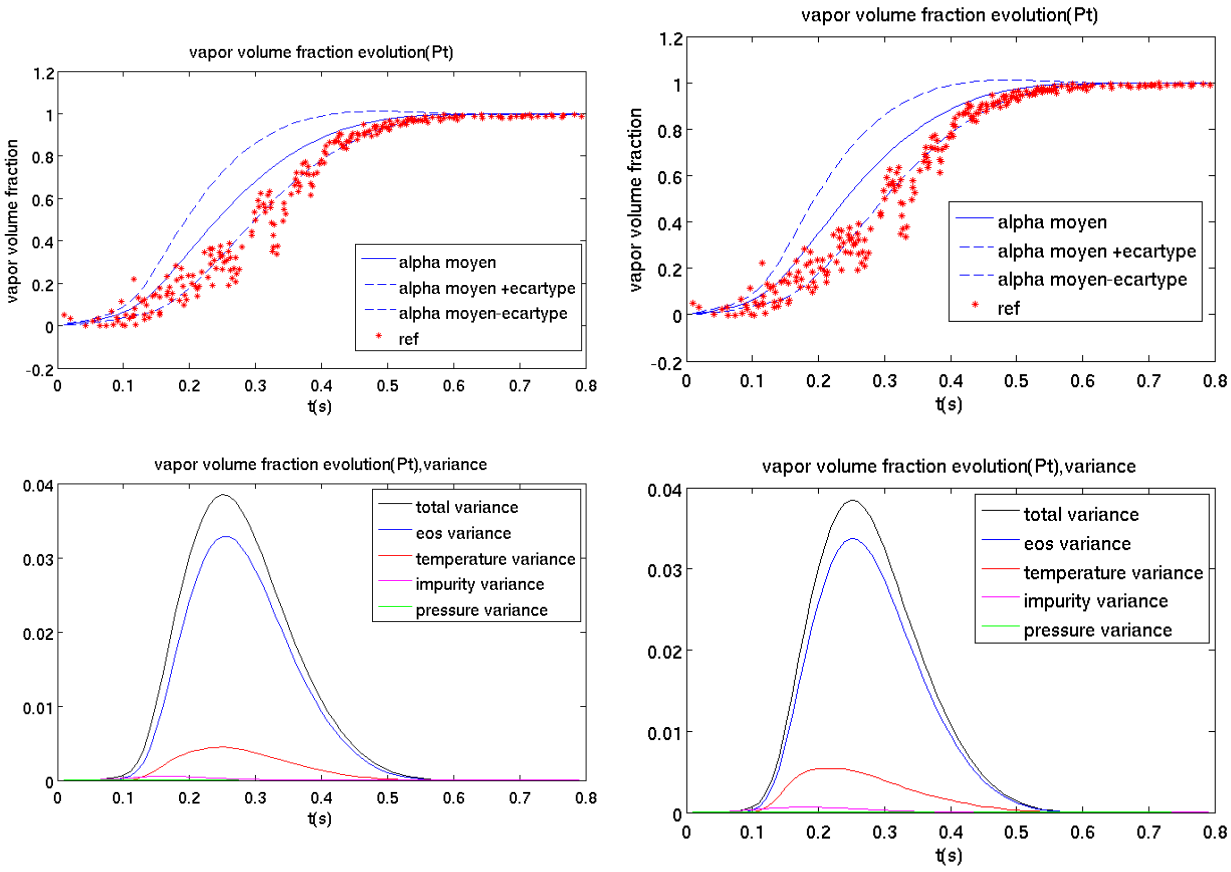


FIGURE 6.8 – Figures du haut : profil de la fraction volumique au capteur Pt (en rouge les résultats expérimentaux, en bleu la moyenne des calculs du LHS et en pointillé les valeurs du LHS en ajoutant et en soustrayant l'écart type à la moyenne). Figures du bas : décomposition ANOVA pour la fraction volumique au capteur Pt pour l'expérience de Canon (1er ordre à gauche, totale à droite)

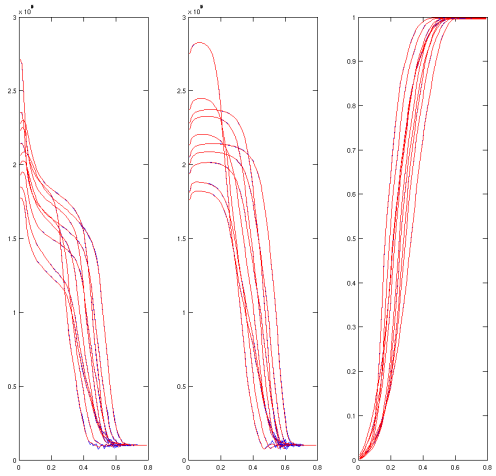


FIGURE 6.6 – Test de validité du métamodèle (en rouge le calcul numérique et en bleu le calcul du métamodèle)(de gauche à droite : pression du capteur P5, pression du capteur P1, fraction volumique du capteur Pt)

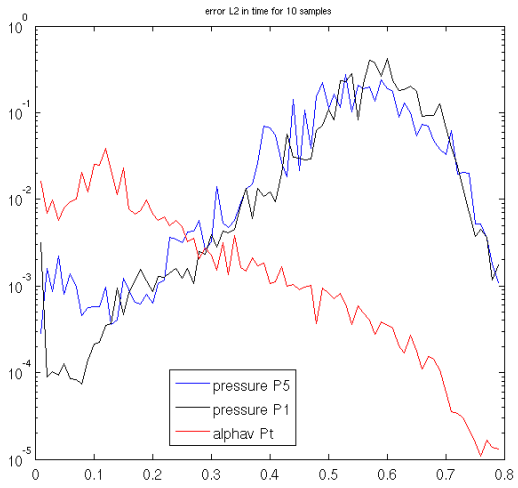


FIGURE 6.7 – Test de validité du métamodèle : erreur entre les métamodèles et les calculs CFD pour le cas Canon

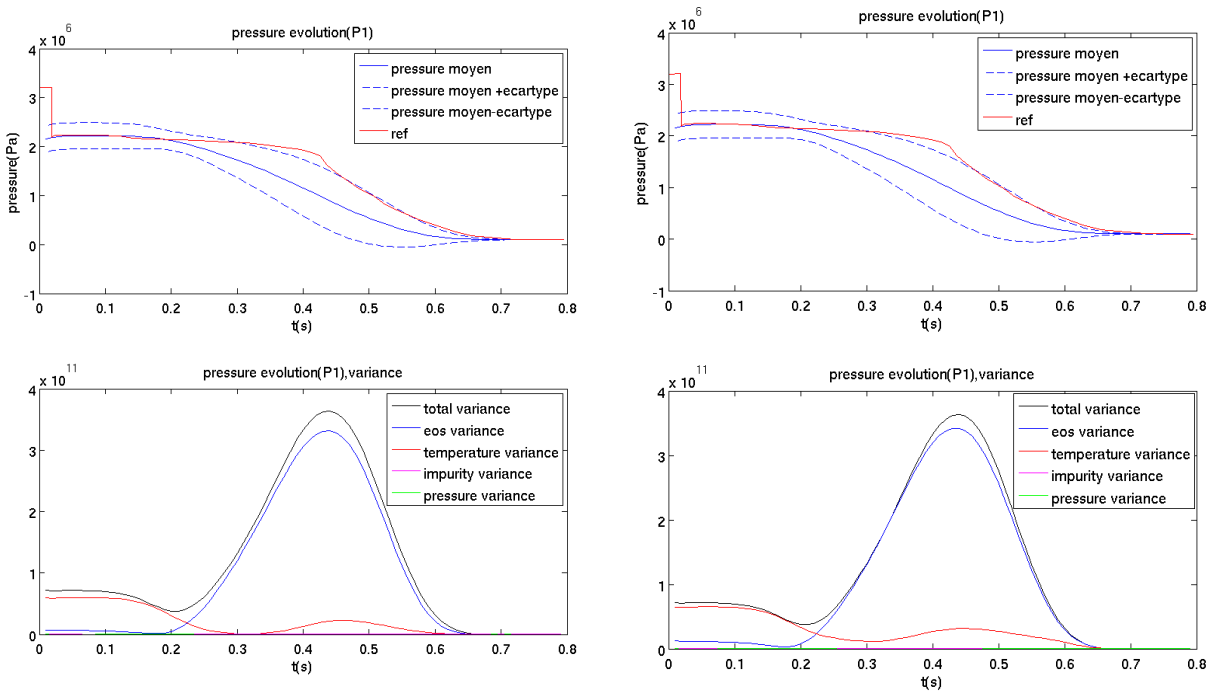


FIGURE 6.9 – Figures du haut : profil de la pression au capteur P1 (en rouge les résultats expérimentaux, en bleu la moyenne des calculs du LHS et en pointillé les valeurs du LHS en ajoutant et en soustrayant l'écart type à la moyenne). Figures du bas : décomposition ANOVA pour la pression au capteur P1 pour l'expérience de Canon (1er ordre à gauche, totale à droite)

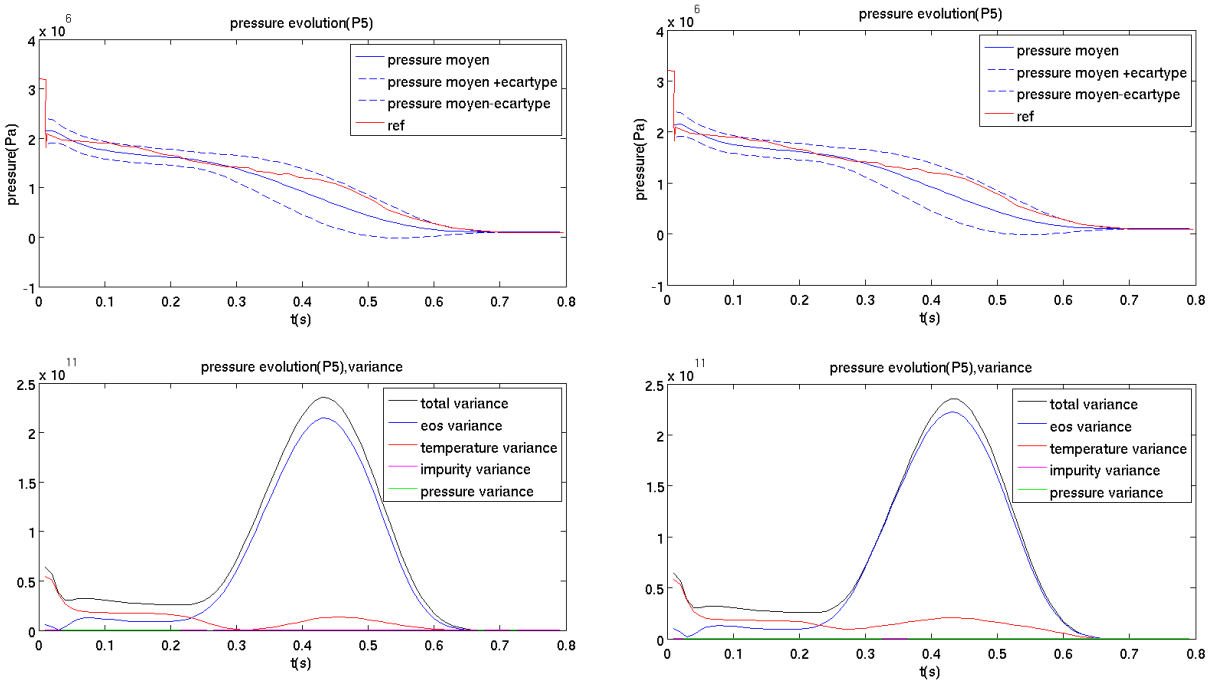


FIGURE 6.10 – Figures du haut : profil de la pression au capteur P5 (en rouge les résultats expérimentaux, en bleu la moyenne des calculs du LHS et en pointillé les valeurs du LHS en ajoutant et en soustrayant l'écart type à la moyenne). Figures du bas : décomposition ANOVA pour la pression au capteur P5 pour l'expérience de Canon (1er ordre à gauche, totale à droite)

6.3.2.3 Commentaire sur la quantification d'incertitude

Nous présentons dans cette partie, un des meilleurs résultats obtenus avec le LHS appliqué au cas Canon. Ce résultat a été obtenu en reprenant les 800 calculs numériques de notre LHS, puis nous avons selectionné le set de paramètres i permettant de minimiser la norme suivante :

$$L^2 = \sqrt{\sum_{t=5}^{55} \left(\frac{P1_{ref,t,i} - M(\vartheta_i = P1_{t,i})}{P1_{ref,t,i}}\right)^2 + \left(\frac{P5_{ref,t,i} - M(\vartheta_i = P5_{t,i})}{P5_{ref,t,i}}\right)^2}.$$

Cette norme prend en compte les effets de l'incertitude sur les pressions aux capteur P1 et P5, nous n'avons pas utilisé la fraction volumique parce que les résultats expérimentaux de référence sont trop dispersés. Comme dit dans le chapitre précédant l'incertitude des paramètres influe surtout sur la zone t=0.05s à t=0.55s, nous avons donc utilisé seulement ces valeurs pour effectuer cette minimisation. Les paramètres obtenus sont répertoriés dans la table 6.5 et les résultats obtenus par simulation numérique sont représentés dans la figure 6.11.

Les résultats obtenus sont bien plus proches des résultats expérimentaux que les résultats numériques utilisant les paramètres nominaux de la section 6.3.1, ce qui est logique puisque ces résultats proviennent de la résolution d'un problème d'optimisation. Par contre, cela montre la capacité intrinsèque du modèle à mieux reproduire les données expérimentales. Pour compléter cette étude nous avons tracé la courbe de saturation avec nos valeurs nominales et celles du tableau 6.5. Ces deux courbes sont comparées avec une courbe de saturation théorique de l'eau

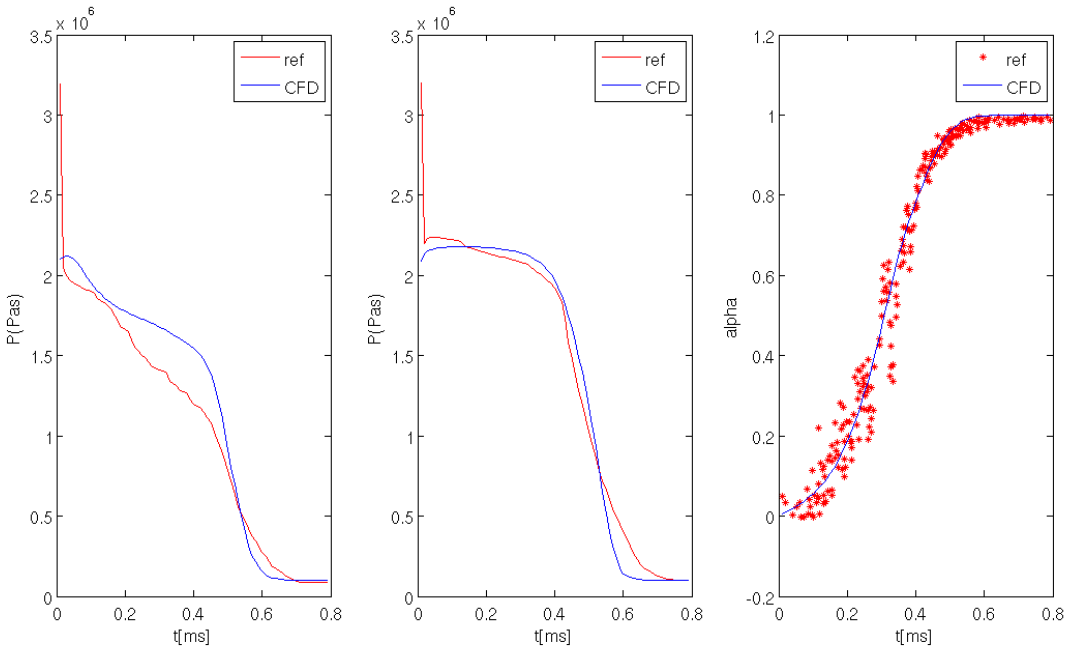


FIGURE 6.11 – Résultats du LHS (de gauche à droite : pression du capteur P5, pression du capteur P1, fraction volumique du capteur Pt)

sur le graphique 6.12. Les meilleurs résultats obtenus en sélectionnant le calcul le plus prédictif dans le LHS divergent fortement de la courbe théorique. Ainsi le problème de la simulation semble en grande partie venir de l'équation d'état, il y a alors deux hypothèses.

— La loi d'état stiffened gas est une approximation linéaire entre la pression et l'énergie interne du fluide, ainsi pour des simulations avec des grandes variations de la pression, celle-ci peut ne pas être assez précise pour modéliser idéalement la physique du problème. En effet dans [96], les auteurs utilisent la loi d'état IAPWS [66] très précise pour l'eau et en jouant sur la vitesse des transferts de masse réussissent à retrouver des résultats proches pour l'expérience Super Canon (une variante de l'expérience de Canon)

— La courbe de saturation théorique que nous utilisons est faite pour reproduire une courbe expérimentale, or celle-ci dépend de l'impureté du fluide et de la rugosité de la paroi. Donc, cela peut fortement modifier la courbe de saturation selon les valeurs de ces paramètres lors des mesures expérimentales de l'expérience Canon.

Pour continuer ce travail, une idée pourrait être d'utiliser la loi d'état IAPWS puis d'effectuer une analyse d'incertitude sur les paramètres du temps de relaxation. En effet, dans [96] on voit bien l'effet de l'incertitude des paramètres de la vitesse des transferts de masse. L'utilisation des méthodes de quantification d'incertitude comme les méthodes Markov Chain Monte Carlo ([123], [109]) sur les paramètres du temps de relaxation permettrait d'observer les barres d'erreurs liées à ces incertitudes mais aussi à déterminer les paramètres optimaux à utiliser pour des simulations de l'expérience de Simpson. N'ayant pas accès à cette équation d'état nous avons décidé de traiter un deuxième cas d'expérience industrielle réelle.

T(°C)	P(bar)	α_v	q	q'
221.7	33.16	$1e^{-2.59}$	-712979.832100	12998.608138

TABLE 6.5 – Résultat de l'incertitude du cas Canon

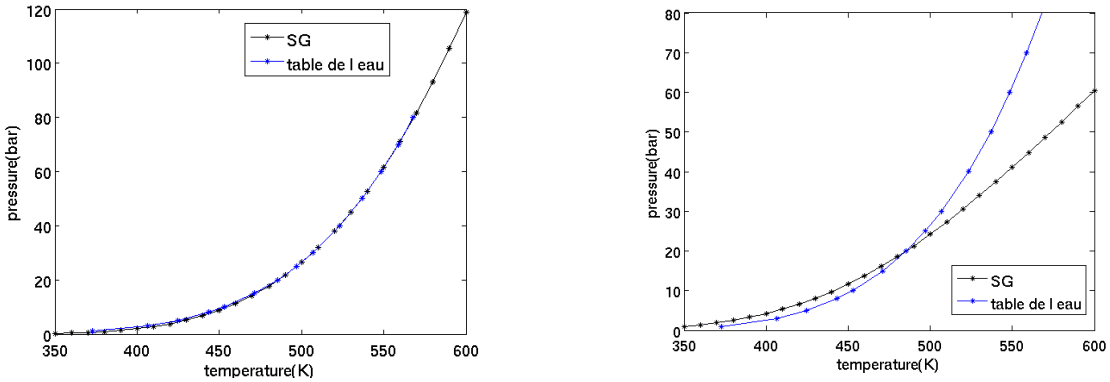


FIGURE 6.12 – Profil de la courbe de saturation de l'eau pour l'expérience de Canon (nominal à gauche, optimal à droite)

6.4 Expérience de Simpson

6.4.1 Formulation du problème

6.4.1.1 Formulation du problème numérique

La seconde expérience réelle que nous considérons est l'expérience de Simpson (voir [74]). Cette expérience représente un des accidents de référence dans les systèmes hydrauliques et représente le phénomène provoqué lorsque l'eau subit un arrêt brusque par exemple avec la fermeture d'une vanne dans une tuyauterie. Cela produit une cavitation de l'eau très dommageable qu'il est nécessaire de quantifier pour dimensionner au mieux les tuyauteries. Nous ne considérerons qu'une seule des nombreuses expériences réalisées par Simpson : celle traitée dans [121], [120] et [96]. Le domaine est décomposé en deux parties, la tuyauterie et le conteneur.

Les conditions initiales données pour la tuyauterie sont celles répertoriées dans la table 6.6. En ce qui concerne le conteneur, comme le problème est ramené en une dimension celui-ci est imposé comme une condition aux limites dont les paramètres sont donnés par la table 6.7. L'autre condition aux limites au bout de la tuyauterie est une condition de non pénétration pour représenter la fermeture de la valve. Concernant les valeurs imposées dans le conteneur d'aucuns peuvent se demander pourquoi il n'est pas imposé une fraction de liquide proche de 1.

Lors de nos simulations pour cette configuration en 1D, la résolution numérique donnait de très mauvais résultats pour une telle valeur de la fraction volumique, ce qui s'explique facilement puisqu'en toute rigueur la fraction volumique devrait varier dans le conteneur au cours du temps. Nous avons donc finalement pris une fraction volumique de vapeur presque pure. Une difficulté de ce problème est que les vibrations de la conduite modifient la vitesse du son du

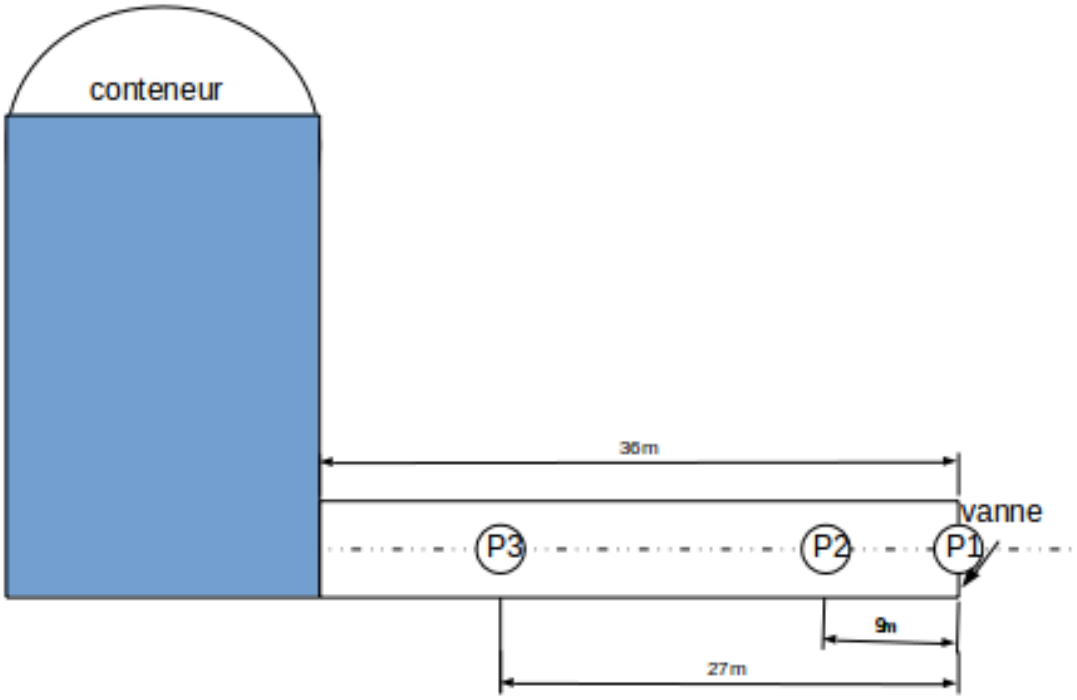


FIGURE 6.13 – Configuration expérimentale de l'expérience de Simpson

problème (voir [124]). Comme le montre les résultats de [125], il est nécessaire de corriger la vitesse du son pour que les résultats soient satisfaisants vis à vis de l'expérience. Nous reprenons donc une formulation stiffened gas avec les paramètres donnés dans [125]. Ceux-ci sont rappelés dans la table 6.8 qui permet de retrouver une vitesse du son similaire à l'expérience soit $c_l = 1256 m.s^{-1}$.

α_v	P(bar)	u(m/s)	T(K)
$1e^{-8}$	3.419	0.401	293

TABLE 6.6 – Etats initiaux dans la conduite de l'expérience de Simpson

α_v	P(bar)	u(m/s)	T(K)
$(1-1e^{-8})$	3.419	0.401	293

TABLE 6.7 – Etats imposés dans le conteneur ([74])

	γ	P_{inf}	c_v	q	q'
liquide	2.2736	692754002.87	1840.48	-1142331.00	24218.87
vapeur	1.3393	0	1344.06	2009800.00	1977.08

TABLE 6.8 – Coefficients stiffened gas de l'expérience de Simpson

D'autre part, il est nécessaire de définir le temps de relaxation du processus Θ_t. Nous avons pris deux définitions, la première est $\Theta_t = 0$ ce qui correspond à une remise à l'équilibre instantanée entre les deux phases, et la deuxième est la formulation donnée par Downar et Bilicki [14] pour de l'évaporation de l'eau à basse pression soit l'expression (6.18) :

$$\begin{cases} \Theta_t = \Theta_0 \alpha_v^{-0.257} \psi^{-2.24}, \\ \Theta_0 = 6.51e^{-4}, \\ \psi = \frac{[P_s(T_{in}) - P]}{P_s(T_{in})}. \end{cases} \tag{6.18}$$

6.4.1.2 Caractérisation des incertitudes

Un autre point que nous avons abordé est l'incertitude des paramètres du modèle. Comme tout le monde le sait les modèles physiques sont imparfaits, en outre les mesures physiques sont elles aussi pertubées par des bruits. Les résultats de la littérature expérimentaux [74] et numériques ([121], [120] ,[96]) présentant quelques différences, nous avons cherché à caractériser au mieux les incertitudes du système et du modèle en prenant en compte les erreurs des mesures. Dans un premier temps, il est nécessaire pour cela de définir l'incertitude sur les paramètres de notre modèle. Comme la vitesse du son doit être modifiée pour ce calcul, nous avons pris une incertitude sur la vitesse du son. D'après la thèse de Simpson la vitesse du son serait comprise dans l'intervalle 1233-1324 m/s. Ainsi pour modifier la vitesse du son nous avons recalculé le γ_l du liquide selon l'expression stiffened gas de la vitesse du son $c_l = \sqrt{\gamma_l(\gamma_l - 1)cv_l T}$. Pour éviter les déviations de la courbe de saturation que nous avons eu dans le cas de l'expérience de Canon (6.12) nous avons calibré le paramètre q_l' pour les deux extrema des γ_l de manière à ce que l'équation d'état permette de retrouver la courbe de saturation expérimentale en utilisant ces nouvelles valeurs. Une interpolation linéaire est alors réalisée pour recalculer les q_l' intermédiaires de la manière suivante :

$$q_1' = 26680\frac{\gamma_l - 2.2429}{2.3613 - 2.2429} + 23350\frac{2.3613 - \gamma_l}{2.3613 - 2.2429}.$$

D'autre part, dans les résultats numériques présentés dans [121], [120] et [96] les maxima des valeurs de la pression au cours du temps sont surestimés par rapport aux maxima des résultats expérimentaux. D'après [126] cela pourrait être amélioré en incluant des effets de frottement comme la viscosité. Pour prendre en compte l'incertitude liée à cette approximation, puisque les frottements influent sur les profils de la vitesse et le gradient de la pression nous faisons aussi varier la vitesse et la pression initiale du calcul. Finalement, comme déjà expliqué la fraction volumique du gaz imposée dans la cuve joue beaucoup sur les résultats. Nous avons donc aussi regardé l'incertitude liée à cette variable. Les fourchettes d'incertitude prises en compte sont répertoriées dans la table 6.9.

	$\gamma_l/(q_l')$	$P(bar)$	$u(m/s)$	$\alpha_l(cuve)$
min	2.2429/(23350)	2.8	0.3	$1e^{-8}$
max	2.3613/(26680)	4	0.5	$1-1e^{-8}$

TABLE 6.9 – Incertitudes associées à l'expérience de Simpson

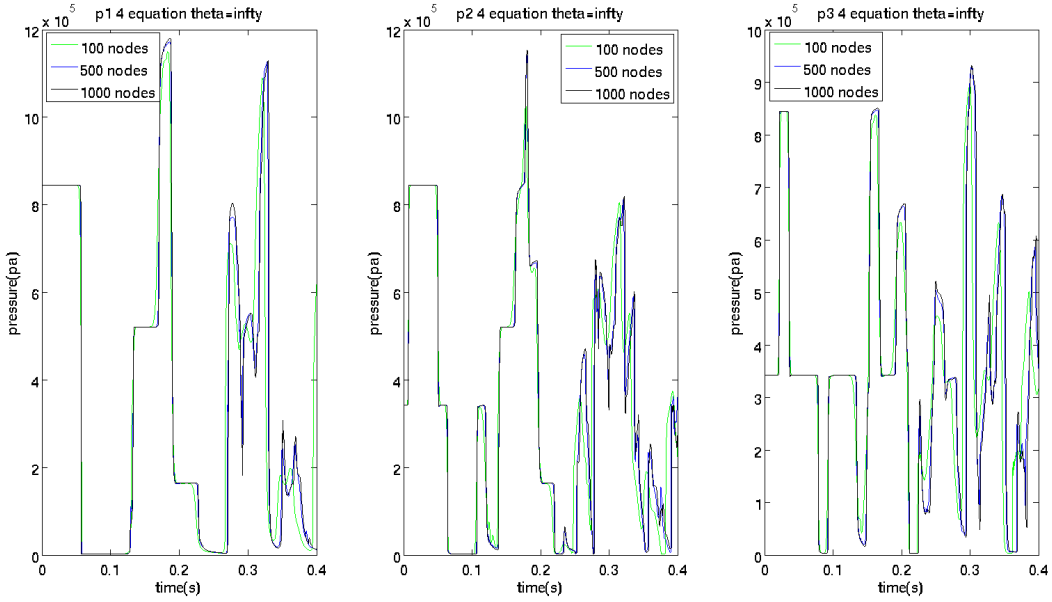


FIGURE 6.14 – Convergence en maillage de l'expérience de Simpson avec le modèle à quatre équations

6.4.2 Résultats

6.4.2.1 Résultats numériques

Nous avons d'abord réalisé le calcul sans incertitude en utilisant les paramètres nominaux des tables 6.6, 6.7 et 6.8. Ces calculs ont été réalisés pour les modèles à quatre et six équations pour trois maillages de plus en plus fins dans le cas d'un transfert de masse instantané. Les résultats obtenus pour la convergence en maillage sont représentés sur les figures 6.14 et 6.15. Les résultats pour un maillage de 1000 cellules étant convergés, nous avons comparé les résultats obtenus avec ce maillage avec les résultats expérimentaux [74] et d'autres résultats numériques [96]. Ces résultats sont visibles sur la figure 6.16 pour $\Theta_t = 0$ et sur la figure 6.17 pour $\Theta = \Theta_{bilicki}$. On voit ainsi que les résultats donnés par les modèles à quatre et six équations et pour les différents temps de relaxation sont les mêmes, d'autre part les résultats sont similaires à ceux obtenus dans [96]. En effet, ces résultats ont été obtenus avec la loi d'état IAPWS-IF97 (voir [66]), cette loi d'état est très précise ce qui confirme la qualité de nos résultats.

6.4.2.2 Résultats de l'étude d'incertitude

On mène ici une étude sur la variabilité induite par les paramètres incertains.

Le problème est complexe, car le comportement de la fonction est très non-linéaire, ce qui complique beaucoup la construction d'un métamodèle basé sur des polynômes du chaos. Même si il y a des techniques en littérature pour traiter ce type de comportement non linéaire, on a décidé ici de présenter juste une étude préliminaire pour apprécier la variabilité de la solution numérique quand on prend en compte les incertitudes du système.

Nous avons alors réalisé un échantillonnage des quatre paramètres considérés. Nous avons utilisé le modèle à quatre équations avec un maillage de 500 nœuds avec des transferts de masse

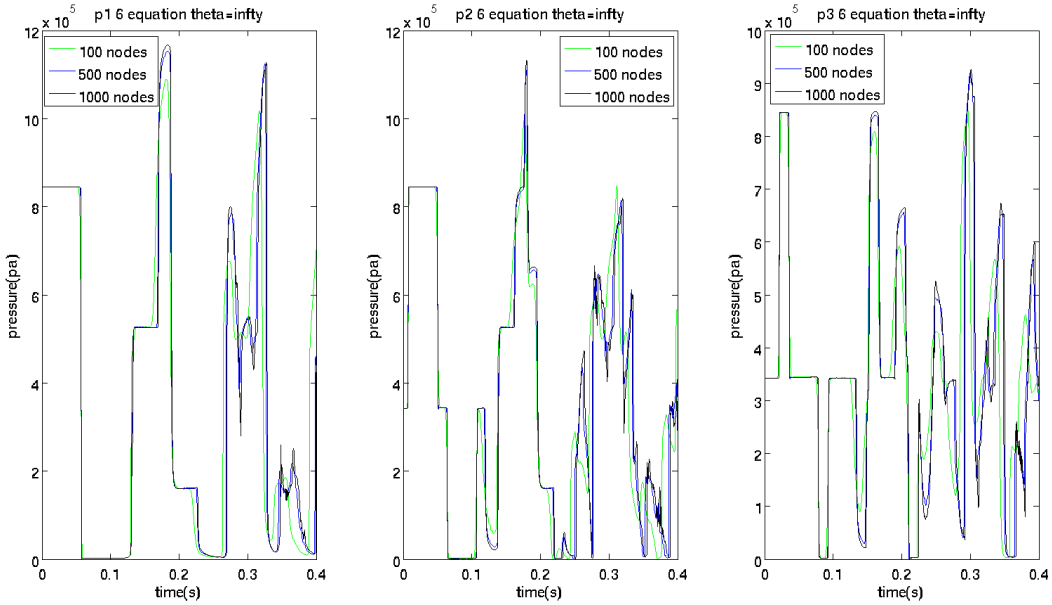


FIGURE 6.15 – Convergence en maillage de l'expérience de Simpson avec le modèle à six équations

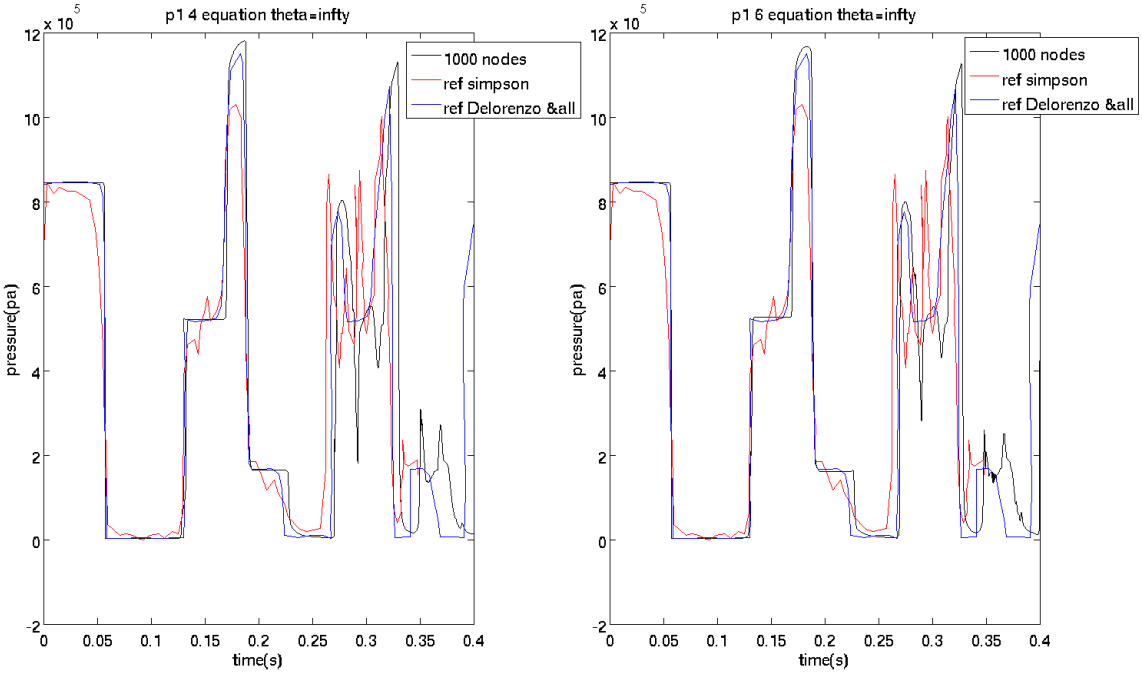


FIGURE 6.16 – Comparaison des résultats de l'expérience de Simpson pour des transferts de masse définis par un temps de relaxation instantané $\Theta_t = 0$ (soit $\Theta = \infty$) (à gauche sont présentés les résultats pour le modèle à quatre équations et à droite ceux obtenus avec le modèle à six équations)

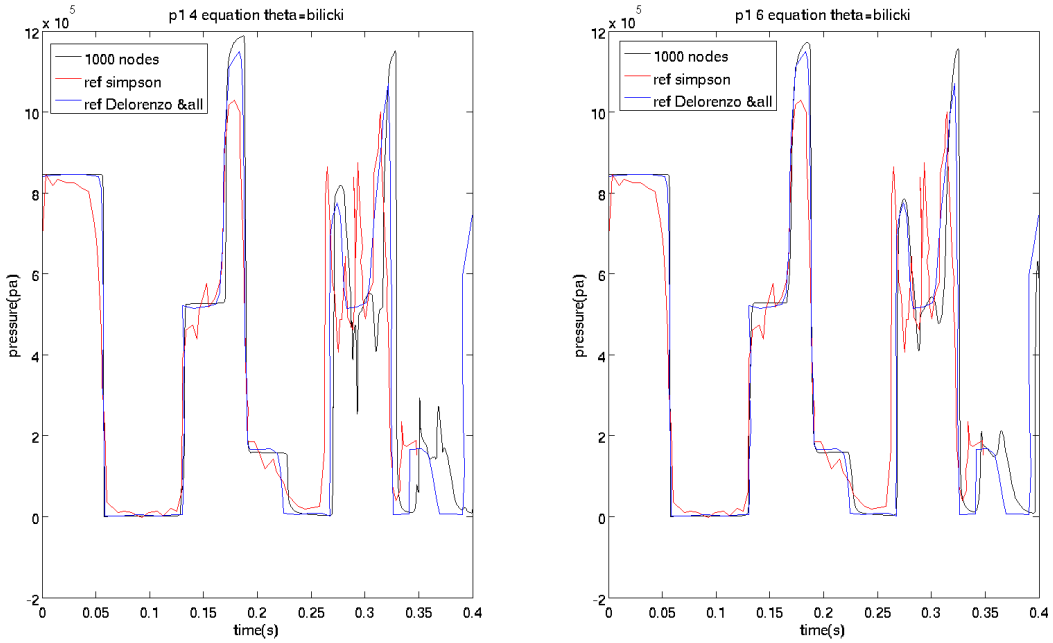


FIGURE 6.17 – Comparaison des résultats de l'expérience de Simpson pour des transferts de masse définis par le temps de relaxation $\Theta_t = \Theta_{bilicki}$ (à gauche sont présentés les résultats pour le modèle à quatre équations et à droite ceux obtenus avec le modèle à six équations)

instantanés avec un CFL de 0.8. Les calculs étant très rapides (environ 15s) nous avons effectué nos calculs d'incertitude en utilisant directement le code numérique.

Nous avons généré un LHS (latin hypercube sample) de 51200 simulations (voir [122] pour des détails de la méthode d'échantillonnage) avec le logiciel UQLAB [113], et évalué les moments statistiques de la pression pour chaque capteur pour chaque pas de temps. La figure 6.18 illustre le comportement de la moyenne et de sa variabilité (en terme d'écart-type) par rapport aux données expérimentales.

On peut observer que l'enveloppe donnée par la moyenne plus ou moins l'écart-type suit assez bien les données expérimentales, même si la prédiction devient très mauvaise après le temps de 0.25s. La deuxième observation est liée à la sensibilité de la solution par rapport aux incertitudes. Il y a une multitude de solutions qui sont potentiellement possibles, à voir avec deux ou trois fois l'écart-type. Ce comportement, qui a été déjà observé en littérature, alerte sur le degré de confiance de la simulation numérique, dans les cas où on ne peut pas bien contrôler les aprioris des paramètres du modèle.

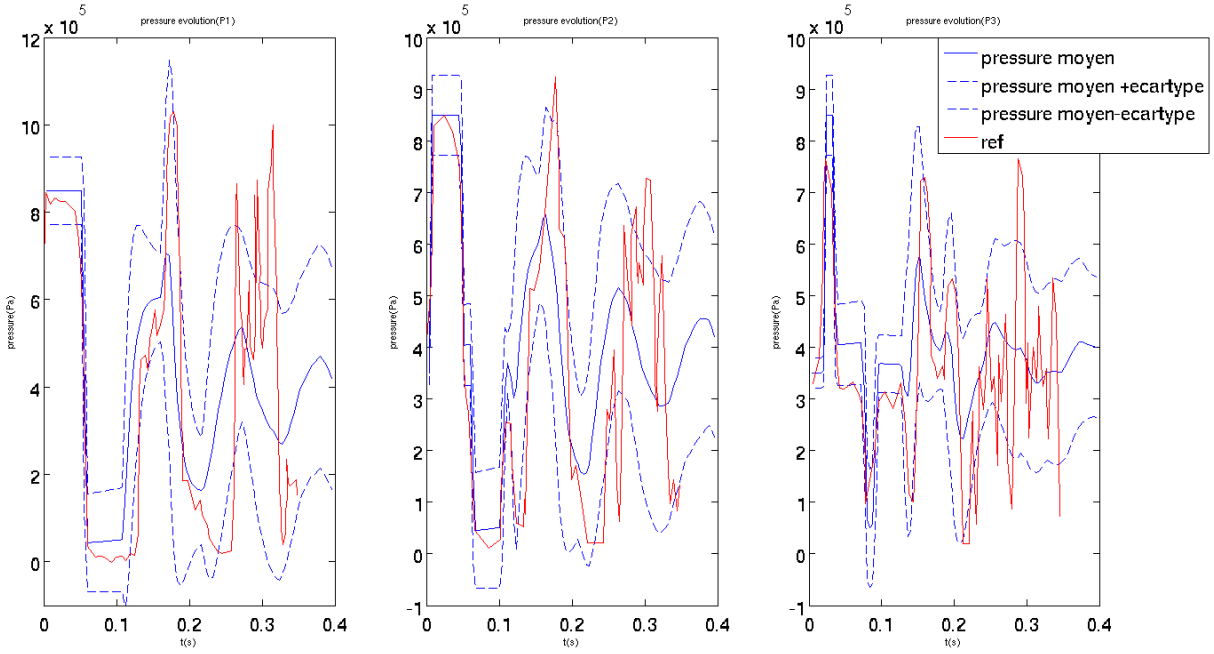


FIGURE 6.18 – Comparaison des résultats expérimentaux (en rouge) avec les moments statistiques de la solution (moyenne plus ou moins l'écart-type) en bleu pour l'expérience de Simpson (LHS)

Conclusion

Travaux réalisés

Dans les travaux qui ont été présentés dans cette thèse nous nous sommes intéressés à la résolution numérique de modèles d'écoulements diphasiques avec des transferts de masse et de chaleur. En effet, les écoulements diphasiques sont très présents dans le milieu industriel. Ces écoulements sont très complexes à caractériser notamment en raison d'interactions très complexes entre les fluides. Il est donc très important de développer des outils permettant des simulations numériques fiables pour dimensionner au mieux les structures industrielles et notamment prévenir les risques dus à des phénomènes comme la cavitation qui peuvent être très dommageables. Dans les travaux que nous avons présentés nous nous sommes intéréssés aux modèles diphasiques à interfaces diffuses.

Notre objectif est alors de contribuer à la création d'outils permettant d'effectuer des simulations précises d'écoulements diphasiques et compressibles dans des configurations industrielles en prenant en compte les différentes interactions entre les phases et notamment les transferts de masse. Pour cela, nous avons étendu la classe des méthodes aux résidus distribués au modèle à quatre équations dans le but de construire une méthode diphasique très efficiente dans des géométries très complexes. Par ailleurs, nous avons aussi étudié l'incertitude et la fiabilité, des modèles à interfaces diffuses, liées à deux expériences reproduisant des accidents industriels : l'expérience de Canon et l'expérience de Simpson. L'objectif de cette étude est alors de déterminer les paramètres permettant aux modèles de reproduire au mieux les résultats expérimentaux.

— Dans un premier temps, nous nous sommes consacrés à l'utilisation de la méthode de propagation des ondes afin de résoudre et comparer les modèles diphasiques à quatre et six équations. Nous avons présenté les solveurs de Riemann HLLC que nous avons utilisés ainsi que les procédures de relaxation permettant de résoudre les systèmes comprenant les termes sources modélisant les transferts entre les phases. Les résultats ont alors été comparés pour différentes configurations unidimensionnelles et bidimensionnelles. Les résultats obtenus valident la propriété des modèles à coïncider dans le cas où les temps de relaxation des températures et des pressions peuvent être considérés comme instantanés. En outre, le modèle à six équations, étant plus diffus, permet une résolution plus robuste.

— Ensuite nous avons procédé à l'extension des méthodes aux résidus distribués. Celle-ci a été effectuée avec le modèle à quatre équations écrit sous forme non-conservative. Notre méthode a alors été comparée à la résolution sous forme conservative en utilisant la méthode de propagation des ondes. Les résultats ont permis de vérifier la convergence de notre méthode vers la bonne solution. En outre l'utilisation d'une méthode à postériori

nous a alors permis d'obtenir une méthode très efficace même pour des maillages fortement non-structurés. La méthode a alors pu être appliquée à un problème en géométrie complexe discrétisé avec un maillage fortement non-structuré et à permis d'obtenir des résultats d'ordre élevés et présentant peu d'oscillations.

— Finalement, nous avons étudié la variabilité des modèles à quatre et six équations sur des expériences réelles de cas industriels en prenant en compte les incertitudes du système. Les résultats obtenus sont cohérents avec les résultats expérimentaux mais présentent quelques défauts. Nous avons alors utilisé des techniques de quantification d'incertitude afin de mieux cibler l'origine des problèmes. Nous tirons de cette étude que pour l'expérience de Canon les erreurs viennent majoritairement de l'équation d'état. En ce qui concerne l'expérience de Simpson, celle-ci pourrait être améliorée en incluant l'effet de la viscosité dans nos modèles.

Perspectives et travaux futurs

Il y a de nombreuses pistes pour continuer ce travail.

En ce qui concerne la comparaison des méthodes diphasiques à interfaces diffuses on peut imaginer :

— Comparer les résultats obtenus pour les modèles diphasiques à quatre et à six équations pour des écoulements diphasiques véritables (fraction volumique proche de 0.5). Cela permettrait de quantifier l'erreur due à la résolution du terme non-conservatif par rapport à la solution conservée donnée par le système à quatre équations pour des écoulements ne pouvant pas être résolus analytiquement. Nous rappelons que pour que les systèmes à quatre et six équations aient la même solution forte, il est nécessaire de considérer des transferts mécaniques et thermiques instantanés.

— De la même manière on pourrait comparer les résultats donnés par le modèle à cinq équations avec les modèles diphasiques à quatre et à six equations. En effet, cette étude pourrait être intéressante en raison du terme non-conservatif très complexe de ce modèle. On pourrait alors comparer les résultats du modèle à cinq équations avec le modèle à six équations en prenant en compte des transferts mécaniques instantanés. Cette comparaison serait en premier temps avec des écoulements diphasiques non véritables, la solution du modèle à six équations étant alors similaire à la solution forte du problème on pourrait observer l'erreur du modèle à cinq équations pour des problèmes complexes où la solution exacte n'est pas connue. Puis dans un second temps avec des écoulements diphasiques véritables, pour des problèmes où la solution exacte est connue, on pourrait alors comparer l'erreur due au traitement des termes non-conservatifs des deux modèles. Dans un second temps, en considérant des transferts mécaniques et thermiques instantanés on pourrait alors comparer pour des écoulements diphasiques véritables les erreurs dues aux traitements des termes non-conservatifs pour les modèles à cinq et six équations avec les résultats conservés du modèle à quatre équations.

En ce qui concerne le développement des méthodes aux résidus distribués on peut citer :

— Développer le code de calcul afin d'effectuer des calculs d'ordre très élevé (trois et plus). Cela est facilement achevable. En effet dans [59], la méthode de discrétisation spatiale

est facilement étendue afin d'obtenir des méthodes d'ordre trois et quatre. Les résultats obtenus avec les équations d'Euler pour des maillages fortement non-structurés sont excellents.

— On peut, en outre, évoquer la possibilité d'ajouter les effets de la viscosité du calcul. Dans [47], les ingrédients pour une discrétisation d'ordre très élevé des termes de viscosité sont proposés. En revanche, l'efficacité de ces méthodes a uniquement été démontrée pour des problèmes stationnaires.

— On peut évidemment imaginer appliquer les méthodes aux résidus distribués à des modèles plus complets comme le modèle à six équations ou le modèle à sept équations. Toutefois, ces modèles n'ayant pas de forme conservative, nous ne pouvons alors pas utiliser la méthode proposée dans [68] pour assurer la conservation du problème.

En ce qui concerne la simulation de cas réels comme l'expérience de Canon ou l'expérience de Simpson, plusieurs études seraient intéressantes :

— Pour l'expérience de Canon, nous pourrions utiliser une équation d'état plus performante comme la loi d'état IAPWS [66]. En effet, dans [96] nous voyons qu'en jouant avec la vitesse des transferts de masse nous pouvons obtenir des résultats très satisfaisants pour le problème SuperCanon. On peut ainsi imaginer réaliser avec cette loi d'état une nouvelle analyse d'incertitude en faisant varier les différentes constantes de la relation (6.15).

— En ce qui concerne la reproduction de l'expérience de Simpson, reproduire l'expérience en deux dimensions semble nécessaire pour ne plus avoir le problème que nous avons eu concernant la détermination des fractions volumiques du conteneur comme cela est fait dans [120]. En outre, inclure les effets de la viscosité semble nécessaire pour résoudre ce cas test.

Liste des tableaux

4.1 Paramètres initiaux d'un tube à choc eau-vapeur 57
4.2 Paramètres de la loi d'état stiffened gas utilisés dans un tube à choc eau-vapeur 57
4.3 Etats initiaux pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 . . 58
4.4 Paramètres d'état stiffened gas du CO_2 58
4.5 Paramètres initiaux utilisés pour la simulation d'une cavitation de l'eau à faible vitesse 66
4.6 Paramètres initiaux utilisés pour la simulation d'une cavitation de l'eau à haute vitesse 67
4.7 Paramètres initiaux d'une bulle d'hélium heurtée par un choc 71
4.8 Paramètres d'état stiffened gas d'une bulle d'hélium heurtée par un choc 71

6.1 Etats initiaux dans la conduite de Canon [120] 125
6.2 Etats imposés dans le conteneur [120] 125
6.3 Coefficients stiffened gas de Canon [120] 125
6.4 Incertitude du cas Canon 128
6.5 Résultat de l'incertitude du cas Canon 135
6.6 Etats initiaux dans la conduite de l'expérience de Simpson 136
6.7 Etats imposés dans le conteneur ([74]) 136
6.8 Coefficients stiffened gas de l'expérience de Simpson 136
6.9 Incertitudes associées à l'expérience de Simpson 137

Table des figures

1 Fonctionnement d'une centrale nucléaire, on observe que le bon fonctionnement du processus dépend en partie des changements de phase de l'eau (image libre de droit reprise de [1]) 1

2 Les méthodes VOF ou level-set considèrent des milieux purs séparés par des interfaces nettes (à gauche). Avec les méthodes à interfaces diffuses (à droite) tout le domaine est considéré comme une zone de mélange contenant une proportion plus ou moins importante des milieux constitutifs 3

1.1 Retard de la vitesse du son en raison des interfaces diffuses [83] (ce schéma présente la traversée d'une onde à travers une interface diffuse séparant des zones d'eau et d'air, on peut voir que l'erreur d'épaisseur de l'interface entraîne un retard de la traversée des ondes) 19

1.2 Comparaison des vitesses du son de différents modèles [80] (La vitesse du son c_{frozen} du modèle à six équations est monotone. En rose et en vert les vitesses du son des modèles à cinq et quatre équations sont non-monotones. En bleu foncé, dans le cas d'un mélange totalement à l'équilibre, la vitesse du son présente une discontinuité) 21

1.3 Isotherme dans un diagramme d'équilibre des phases pression-volume d'un fluide diphasique [83] 23

2.1 Condition initiale d'un problème de Riemann (à t=0 une discontinuité de contact sépare deux états constants q_l ("left") et q_r ("right")) 26

2.2 Solution caractéristique d'un problème de Riemann d'un système d'équations linéaires (la solution consiste en une suite d'états constants séparés par les vitesses caractéristiques associées aux valeurs propres) 27

2.3 Discrétisation de type volumes finis 27

2.4 Méthode de Godunov pour une équation linéaire scalaire (on cherche à déterminer la valeur $q_{i-\frac{1}{2}}$ le long de la caractéristique rouge de pente $\frac{x_{i-\frac{1}{2}}}{t} = 0$. La caractéristique noire ayant pour pente la vitesse d'advection du problème délimite la solution en deux valeurs, à gauche $q_{i-\frac{1}{2}} = q^n_{i-1}$ et à droite $q_{i-\frac{1}{2}} = q^n_i$. La solution montre que la valeur le long de la caractéristique rouge est constante au cours du temps et vaut q^n_{i-1}) 29

2.5 Implémentation des conditions aux limites en utilisant la méthode des cellules fantômes (le domaine comprend toutes les cellules de x_1 à x_N, on ajoute deux cellules fictives, x_{-1} et x_0 à gauche et x_{N+1} et x_{N+2} à droite, à chaque limite du domaine) 32

3.1 Domaine discrétisé pour les méthodes aux résidus distribués [83] 36
3.2 Définition du résidu intégral pour une cellule K [56], [83] 37
3.3 Distribution des résidus [56], [83] (une fois le résidu de la cellule K calculé, celui-ci est distribué à chaque nœud de la cellule pour faire évoluer les variables vers l'état stationnaire) 37
3.4 Cellule de contrôle des méthodes aux résidus distribués (dans le cas de fonction de base de degré 1, celle-ci s'obtient en reliant les centres de chacune des cellules adjacentes) 38
3.5 Evolution des variables par redistribution des signaux [56], [83] (le nœud i reçoit un résidu local provenant de chacune des cellules adjacentes produisant les valeurs au temps suivant) 38
3.6 Distribution des résidus pour un problème instationnaire (les résidus sont maintenant calculés dans des cellules spatio-temporelles, les résidus locaux sont alors déterminés de manière à vérifier les équations de bilan dans les cellules de contrôle C_I) 41
3.7 Implémentation faible des conditions aux limites (cela est effectué en considérant des cellules infiniment minces, le résidu envoyé au nœud i de ces cellules permet alors d'imposer les conditions aux limites) 43

4.1 Structure des ondes d'un problème de Riemann modélisée avec un solveur HLLC (la figure illustre le cas où les ondes S_R et S sont supérieures à 0, la structure est à adapter selon les signes des ondes S_R, S_L et S pour calculer les fluctuations $A^+\Delta q_{i-\frac{1}{2}}$ et $A^-\Delta q_{i+\frac{1}{2}}$) 48
4.2 Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 54
4.3 Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 54
4.4 Profil de la densité obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 55
4.5 Profil de la pression obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 55
4.6 Profil de la température obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 56

4.7 Profil de la fraction massique de liquide obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 56
4.8 Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la température obtenu pour la résolution d'un tube à choc liquide-vapeur entre les modèles à quatre et 6 équations (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 57
4.9 Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 58
4.10 Convergence en maillage de la densité obtenue pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 59
4.11 Profil de la densité obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 59
4.12 Profil de la pression obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 59
4.13 Profil de la température obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 60
4.14 Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la température obtenu pour la résolution d'une dépression dans une conduite de CO_2 (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 60
4.15 Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 62
4.16 Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 62
4.17 Profil de la densité obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 63
4.18 Profil de la pression obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 63
4.19 Profil de la température obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 64

4.20 Profil de l'énergie interne spécifique obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 64
4.21 Profil de la vitesse obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 65
4.22 Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la densité obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à faible vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 65
4.23 Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse sans transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 67
4.24 Convergence en maillage de la vitesse obtenue pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse avec transfert de masse (à gauche : 6 équations, à droite : 4 équations) 68
4.25 Profil de la vitesse obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 68
4.26 Profil de la densité obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 69
4.27 Profil de la pression obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 69
4.28 Profil de la température obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 70
4.29 Comparaison pour plusieurs maillages du profil de la vitesse obtenu pour la résolution d'une simulation de cavitation de l'eau à haute vitesse (à gauche sont présentés les résultats sans transfert de masse et à droite ceux obtenus avec transfert de masse) 70
4.30 Configuration du cas test 2D d'un choc heurtant une bulle d'hélium 71
4.31 Résultats de la densité ρ d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (quatre équations à gauche et six équations à droite) 72
4.32 Résultats de la pression P d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (quatre équations à gauche et six équations à droite) 73
4.33 Comparaison des isolignes (en haut : densité, en bas : pression) (isolignes violettes : 6 équations, isolignes multicolores : 4 équations) 74
4.34 Comparaison du profil de la densité à t=0.577ms et x=0.125m (gauche : quatre équations, droite : six équations)(noir : 1200x360,rouge : 900x270, vert : 600x180) 75

4.35 Comparaison des profils de la densité à t=0.577ms et x=0.125m pour un maillage de 1200x3600 mailles (noir : quatre équations, rouge : six équations) 75
4.36 Résultats de la densité ρ d'un tube à choc eau-vapeur en 2D (quatre équations à gauche et six équations à droite) 76
4.37 Profil de la densité ρ, de la pression P et de la fraction massique de liquide Y_l d'un tube à choc eau-vapeur en 2D (quatre équations en noir et six équations en rouge) 77

5.1 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la densité pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 89
5.2 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Détails du profil de la densité de la figure 5.1 pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 90
5.3 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la vitesse pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 90
5.4 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Détails des profils de vitesse des figures 5.3 pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 91
5.5 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la pression pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 91
5.6 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la température pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 91
5.7 Tube à choc d'un mélange liquide-vapeur à $t = 0.8$ms. Comparaison de la fraction de masse liquide pour la formulation RD non-conservative et l'approche conservative CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 92
5.8 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Etude de convergence en maillage pour l'approche non-conservative RD *sans* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom (à droite). 92
5.9 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative pour différents maillages *sans* transfert de masse - pression (à gauche) et vélocité (à droite). 93

5.10 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative pour différents maillages pour le système *sans* transfert de masse - zooms de la vitesse. 93
5.11 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative pour différents maillages *sans* transfert de masse - densité (à gauche) et zoom de la densité (à droite). 94
5.12 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *sans* transfert de masse - température (à gauche) et fraction massique de liquide (à droite). 94
5.13 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Etude de convergence en maillage pour l'approche non-conservative RD *avec* transfert de masse - vitesse. 95
5.14 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - pression (à gauche) et vitesse (à droite). 95
5.15 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - zooms des pressions. 95
5.16 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - zooms de la vitesse. 96
5.17 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - densité (à gauche) et zoom de la densité (à droite). 96
5.18 Dépression d'une conduite de CO_2 à $t = 0.08$s. Comparaison entre l'approche conservative CLAWPACK (CP) et la formulation RD non-conservative *avec* transfert de masse - température (à gauche) et fraction de masse liquide (à droite). . 96
5.19 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Convergence en maillage de la formulation RD *sans* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom de la vitesse (à droite). 97
5.20 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *sans* transfert de masse pour la densité (à gauche) et la pression (à droite). . . . 97
5.21 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *sans* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom de la vitesse (à droite). . . 98
5.22 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *sans* transfert de masse - température (à gauche) et zoom de la température (à droite). 98
5.23 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Convergence en maillage de la formulation RD *avec* transfert de masse - vitesse. 99

5.24 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - densité (à gauche) et zoom de la densité (à droite). . . 99
5.25 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - vitesse (à gauche) et zoom de la vitesse (à droite). . . 100
5.26 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - fraction de masse liquide (à gauche) et zoom de la fraction de masse liquide (à droite). 100
5.27 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 2$m/s à $t = 3.2$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages *avec* transfert de masse - énergie interne (à gauche) et zoom de l'énergie interne (à droite). 100
5.28 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Densité : Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite). 101
5.29 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Vitesse : Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite) 101
5.30 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Pression : Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK (CP) pour différents maillages - *sans* transfert de masse (à gauche) et *avec* transfert de masse (à droite) 102
5.31 Problème de cavitation de l'eau pour $|u| = 100$m/s à $t = 1.5$ms. Comparaison de la formulation RD avec la solution de CLAWPACK pour différents maillages avec transfert de masse - fraction de masse liquide (à gauche) température (à droite). 102
5.32 Profil de la densité ρ (à gauche) et de la fraction massique de liquide Y_l (à droite) d'un tube à choc eau-vapeur en 2D (noir : 200x20 nœuds rd, rouge : 200x20 nœuds Clawpack, vert : 100x10 nœuds rd, bleu : 100x10 nœuds Clawpack) . . 103
5.33 Résultats de la densité ρ d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (300x80 nœuds à gauche, 450x120 nœuds à droite) 104
5.34 Résultats de la pression P d'une bulle de vapeur heurtée par un choc (300x80 nœuds à gauche, 450x120 nœuds à droite) 105
5.35 Isolignes de la densité à t=288.5e-6 s (450x120 nœuds) (les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent) 106
5.36 Isolignes de la pression à t=288.5e-6 s (450x120 nœuds) (les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent) 106

5.37 Isolignes de la densité à t=577.e-6 s (450x120 nœuds)(les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent) 108
5.38 Isolignes de la pression à t=577.e-6 s (450x120 nœuds)(les isolignes violettes reprennent les isolignes obtenues avec la méthode de propagation des ondes à maillage équivalent) 108
5.39 Comparaison du profil de la densité à t=0.2885ms et x=0.2m (à gauche : noir : 300x80 rd, rouge : 300x80 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (à droite : noir : 450x120 rd, rouge : 450x120 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (les profils sont adimensionnés) 109
5.40 Comparaison du profil de la densité à t=0.577ms et x=0.125m (à gauche : noir : 300x80 rd, rouge : 300x80 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (à droite : noir : 450x120 rd, rouge : 450x120 Clawpack, vert : 1200x360 Clawpack) (les profils sont adimensionnés) 109
5.41 Maillage de quadrangles pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel (1000 nœuds) 110
5.42 Maillage de triangles pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel (1000 nœuds) 110
5.43 Comparaison du profil de la densité (à gauche) et de la fraction massique de liquide (à droite) pour un maillage de 1000 nœuds (noir : triangle, rouge : quadrangle) 111
5.44 Comparaison du profil de la densité (à gauche) et de la fraction massique de liquide (à droite) pour un maillage de 4000 nœuds (noir : triangle, rouge : quadrangle) 111
5.45 Configuration (à gauche) et maillage (5000 nœuds, à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe . . 112
5.46 Profil de la densité pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (40000 nœuds) (à gauche : isocontours 3D, à droite : isolignes) 113
5.47 Isolignes de la pression (à gauche) et de la fraction massique de liquide (à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (40000 nœuds) 113
5.48 Profil et champ vectoriel de la vitesse normale pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (40000 nœuds) 114
5.49 Profil de la densité à y=0.5m (à gauche) et à y=0.3m (à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (noir : 40000 nœuds, rouge : 20000 nœuds, vert : 10000 nœuds, bleu : 5000 nœuds) 115
5.50 Profil de la vitesse (composante selon x) à y=0.5m (à gauche) et à y=0.3m (à droite) pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (noir : 40000 nœuds, rouge : 20000 nœuds, vert : 10000 nœuds, bleu : 5000 nœuds) 115

5.51 Profil de la densité autour du cylindre de centre x=0.3m, y=0.3m pour un tube à choc d'un mélange liquide-vapeur bidimensionnel dans une géométrie complexe à t=0.8ms (noir : 40000 nœuds, rouge : 20000 nœuds, vert : 10000 nœuds, bleu : 5000 nœuds) 116

6.1 Configuration expérimentale de l'expérience de Canon [120] 125
6.2 Profil de la pression du capteur P1 pour l'expérience de Canon obtenu avec les modèles à quatre équations et à six équations (à gauche : $\Theta_t = 0$, à droite : $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$, au centre : $\Theta_t = \Theta_{bilicki2}$) 127
6.3 Profil de la pression du capteur P5 pour l'expérience de Canon obtenu avec les modèles à quatre équations et à six équations (à gauche : $\Theta_t = 0$, à droite : $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$, au centre : $\Theta_t = \Theta_{bilicki2}$) 128
6.4 Profil de la fraction volumique de vapeur du capteur Pt pour l'expérience de Canon obtenu avec les modèles à quatre équations et à six équations (à gauche : $\Theta_t = 0$, à droite : $\Theta_t = \Theta_{bilicki1}$, au centre : $\Theta_t = \Theta_{bilicki2}$) 129
6.5 Leave-one-out (L00) du métamodèle construit pour le problème de Canon . . . 131
6.8 Figures du haut : profil de la fraction volumique au capteur Pt (en rouge les résultats expérimentaux, en bleu la moyenne des calculs du LHS et en pointillé les valeurs du LHS en ajoutant et en soustrayant l'écart type à la moyenne). Figures du bas : décomposition ANOVA pour la fraction volumique au capteur Pt pour l'expérience de Canon (1er ordre à gauche, totale à droite) 131
6.6 Test de validité du métamodèle (en rouge le calcul numérique et en bleu le calcul du métamodèle)(de gauche à droite : pression du capteur P5, pression du capteur P1, fraction volumique du capteur Pt) 132
6.7 Test de validité du métamodèle : erreur entre les métamodèles et les calculs CFD pour le cas Canon 132
6.9 Figures du haut : profil de la pression au capteur P1 (en rouge les résultats expérimentaux, en bleu la moyenne des calculs du LHS et en pointillé les valeurs du LHS en ajoutant et en soustrayant l'écart type à la moyenne). Figures du bas : décomposition ANOVA pour la pression au capteur P1 pour l'expérience de Canon (1er ordre à gauche, totale à droite) 132
6.10 Figures du haut : profil de la pression au capteur P5 (en rouge les résultats expérimentaux, en bleu la moyenne des calculs du LHS et en pointillé les valeurs du LHS en ajoutant et en soustrayant l'écart type à la moyenne). Figures du bas : décomposition ANOVA pour la pression au capteur P5 pour l'expérience de Canon (1er ordre à gauche, totale à droite) 133
6.11 Résultats du LHS (de gauche à droite : pression du capteur P5, pression du capteur P1, fraction volumique du capteur Pt) 134
6.12 Profil de la courbe de saturation de l'eau pour l'expérience de Canon (nominal à gauche, optimal à droite) 135
6.13 Configuration expérimentale de l'expérience de Simpson 136
6.14 Convergence en maillage de l'expérience de Simpson avec le modèle à quatre équations 138

6.15 Convergence en maillage de l'expérience de Simpson avec le modèle à six équations 139
6.16 Comparaison des résultats de l'expérience de Simpson pour des transferts de masse définis par un temps de relaxation instantané $\Theta_t = 0$ (soit $\Theta = \infty$) (à gauche sont présentés les résultats pour le modèle à quatre équations et à droite ceux obtenus avec le modèle à six équations) 139
6.17 Comparaison des résultats de l'expérience de Simpson pour des transferts de masse définis par le temps de relaxation $\Theta_t = \Theta_{bilicki}$ (à gauche sont présentés les résultats pour le modèle à quatre équations et à droite ceux obtenus avec le modèle à six équations) 140
6.18 Comparaison des résultats expérimentaux (en rouge) avec les moments statistiques de la solution (moyenne plus ou moins l'écart-type) en bleu pour l'expérience de Simpson (LHS) 141

Bibliographie

[1] Centrale_nucleaire_REP.png, décembre 2009.
https ://fr.wikipedia.org/wikiFichier :Centrale_nucléaire_REP.png.

[2] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. Journal of computational physics, 39(1) :201–225, 1981.

[3] J.A. Sethian. Level Set Methods and Fast Marching Methods : Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science. Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics. Cambridge University Press, 1999.

[4] Monsieur Labois Mathieu. Modélisation des déséquilibres mécaniques dans les écoulements diphasiques : Approches par relaxation et par modèle réduit. PhD thesis, Université de Provence, 2008.

[5] Monsieur Furfaro Damien. Simulation numérique d'écoulements multiphasiques, problèmes à interfaces et changement de phase. PhD thesis, Université d'Aix-Marseille, 2015.

[6] Richard Saurel and Rémi Abgrall. A simple Method for compressible multifluid flows . SIAM J. SCI. COMPUT. Vol. 21, No. 3, pp. 1115-1145, 1999.

[7] D.J. Benson. Comput. methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 99 (1992), pp. 235-394, 1992.

[8] R. Young, J. Glimm, and B. Boston. Proceedings of the 5th International Workshop on Compressible Turbulent Mixing. World Scientific, 1996.

[9] Ménard T., Tanguy S., and Berlemont A. Coupling level set/VOF/ghost fluid methods : Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet. International Journal of Multiphase Flow, 33(5) :510–524, 2007.

[10] M.R. Baer and J.W. Nunziato. A Two-phase Mixture Theory for the Deflagration-to-detonation Transition (DDT) in Reactive Granular Materials. International journal of multiphase flow, 12(6) :861–889, 1986.

[11] Donald A.Drew and Stephen L.Passman. Theory of Multicomponent Fluids. Springer, 1998.

[12] Richard Saurel and Rémi Abgrall. A Multiphase Godunov Method for Compressible Multifluid and Multiphase Flows . Journal of Computational Physics, 1998.

[13] Rémi Abgrall. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi conservative approach. RR-2372, INRIA. 1994.<inria-00074304>, 1994.

[14] P. Downar-Zapolski, Z. Bilicki, L. Bolle, and J. Franco. The Non-equilibrium Relaxation Model for One-dimensional Flashing Liquid Flow. International journal of multiphase flow, 22(3) :473–483, 1996.

[15] A. K. Kapila, D.S Stewart, and R.Menikoff. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : Reduced equations. Physic of fluids, 2001.

[16] Angelo Murrone and Hervé Guillard. A five equation reduced model for compressible two phase flow problems. Journal of Computational Physics, 2005.

[17] M. Pelanti and K-M. Shyue. A mixture-energy-consistent six-equation two-phase numerical model for fluids with interfaces, cavitation and evaporation waves. Journal of computational physics, 2013.

[18] Marica Pelanti and Keh-Ming Shyue. A numerical model for multiphase liquid-vapor-gas flows with interfaces and cavitation. International journal of multiphase flow, 2019.

[19] Richard Saurel. A compressible flow model with capillary effects. Journal of Computational Physics, 2005.

[20] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and Zemach CA. A Continuum Method for Modeling Surface Tension. Journal of Computational Physics, 1992.

[21] Le Martelot S, Saurel R, and Nkonga B. Towards the direct numerical simulation of nucleate boiling flows. International Journal of Multiphase Flow, 2014.

[22] Eleuterio F. Toro. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamic : A pratical introduction. Springer, 2009.

[23] Randall J. LeVeque. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge University Press, 2004.

[24] S. K. Godunov. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. Mat. Sb, 47(89),pp. 271-306, 1959.

[25] E.F. Toro. The Riemann Problem : Solvers and Numerical Fluxes . Handbook of Numerical Analysis, 2016.

[26] B. Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second-order sequel to Godunov's method . Journal of computational Physics, 1979.

[27] Ami Harten and Stanley Osher. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes I . SIAM J. Numer. Anal., 24, No2,pp 279-209, 1987.

[28] Ami Harten. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes III . NASA Contractor report 178101, 1987.

[29] Guang-Shan Jiang and Chi-Wang Shu. Efficient Implementation of Weighted Eno Schemes. NASA Contractor Report 198228, 1996.

[30] E. F. Toro, R. C. Millington, and L. A. M. Nejad. Towards very high-order Godunov schemes. In Godunov Methods : Theory and Applications. Edited Review, E. F. Toro (Editor). Kluwer Academic/Plenum Publishers. Conference in Honour of S. K. Godunov. Vol. 1, pages 897-902. New York, Boston and London, 2001.

[31] V. A. Titarev and E. F. Toro. ADER : Arbitrary High Order Godunov Approach. Journal of Scientific Computing, Vol. 17, Nos. 1-4, December, 2002.

[32] S. A. Tokareva and E. F. Toro. A flux splitting method for the Baer-Nunziato equations of compressible two-phase flow. Journal of Computational Physics, 2016.

[33] Richard Saurel, Pierre Boivin, and Olivier Le Métayer. A general formulation for cavitating, boiling and evaporating flows. Computers and Fluids, 2016.

[34] Gino I. Montecinos, Lucas O. Müller, and Eleuterio F. Toro. Hyperbolic reformulation of a 1D viscoelastic blood flow model and ADER finite volume schemes. Journal of Computational Physics, 2014.

[35] M. Dumbser, A. Hidalgo, M. Castro, C. Parés, and E. F. Toro. FORCE schemes on unstructured meshes II : Non-conservative hyperbolic systems. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 2010.

[36] Walter Boscheri and Michael Dumbser. A direct Arbitrary-Lagrangian-Eulerian ADER-WENO finite volume scheme on unstructured tetrahedral meshes for conservative and non-conservative hyperbolic systems in 3D. Journal of Computational Physics, 2014.

[37] P. L. Roe. Fluctuations and signals - a framework for numerical evolution problems. Numerical Methods for Fluids Dynamics,page 219-257. Academic Press, 1982.

[38] P.L.Roe. CHARACTERISTIC-BASED SCHEMES FOR THE EULER EQUATIONS. Annual Review of Fluid Mechanics, 18 :337-365, 1986.

[39] Struijs R., Deconinck H., and Roe P.L. Fluctuation splitting schemes for the 2d Euler equations. Computational Fluid Dynamics, 1991.

[40] Deconinck H., Struijs R., and Roe P.L. Compact advection schemes on unstructured grids. Computational Fluid Dynamics, 1993.

[41] R. Abgrall. Toward the ultimate conservative scheme : following the quest. Journal of computational physics, 2001.

[42] R. Abgrall and P.L. Roe. High Order Fluctuation Schemes on Triangular Meshes. Journal of scientific computing, 2002.

[43] Rémi Abgrall. A review of Residual Distribution Schemes for Hyperbolic and Parabolic Problems : The July 2010 state of the Art . Comput. Phys. vol.11,No. 4, pp. 1043-1080 April, 2012.

[44] R. Abgrall. Essentially non-oscillatory Residual Distribution schemes for hyperbolic problems. Journal of computational physics, 2006.

[45] Rémi Abgrall and Timothy Barth. Residual Distribution Schemes For Conservation Laws Via Adaptive Quadrature. SIAM J. SCI. COMPUT, 2002.

[46] R. Abgrall, Q. Viville, H. Beaugendre, and C. Dobrzynski. Construction of a p-Adaptive Continuous Residual Distribution Scheme. J Sci Comput(2017) 72 : 1232-1268, 2017.

[47] Monsieur De Santis Dante. Schémas d'ordre élevé distribuant le résidu pour la résolution des équations de Navier-Stokes moyennées. PhD thesis, Université Bordeaux 1, 2013.

[48] R. Abgrall and D. De Santis. Linear and non-linear high order accurate residual distribution schemes for the discretization of the steady compressible Navier-Stokes equations. Journal of computational physics, 2015.

[49] R. Abgrall, P.M. Congedo, D. De Santis, and N. Razaaly. A non-linear residual distribution scheme for real-gas computations. Computers & fluids, 2014.

[50] D. De Santis. High-order linear and non-linear residual distribution schemes for turbulent compressible flows. Computer methods in applied mechanics and engineering, 2015.

[51] P. De Palma, G. Pascazio, G.Rossiello, and M. Napolitano. A second-order-accurate monotone implicit fluctuation splitting scheme for unsteady problems. Journal of computational physics, 2004.

[52] G.Rossiello, P. De Palma, G. Pascazio, and M. Napolitano. Third-order-accurate fluctuation splitting schemes for unsteady hyperbolic problems. Journal of computational physics, 2007.

[53] Alireza Mazaheri and Hiroaki Nishikawa. Very efficient high-order hyperbolic schemes for time-dependant advection-diffusion problems : third-, fourth-, and sixth-order. Computers & Fluids, 2014.

[54] D. Sármány, M.E. Hubbard, and M. Ricchiuto. Unconditionally stable space-time discontinuous residual distribution for shallow-water flows. Journal of Computational Physics, 2012.

[55] H. Deconinck and M. Ricchiuto. Residual Distribution schemes : foundations and analysis. Encyclopedia of Computational Mechanics, Part 3. Fluids, John Wiley & Sons, Ltd., 2007.

[56] Mario Ricchiuto. Contributions to the development of residual discretizations for hyperbolic conservation laws with application to shallow water flows. PhD thesis, Université de Bordeaux, 2016.

[57] M. Ricchiuto and R. Abgrall. Explicit Runge-Kutta residual distribution schemes for time dependent problems : second-order case. Journal of Computational Physics, 2010.

[58] Rémi Abgrall. High-Order Schemes for Hyperbolic Problems Using Globally Continuous Approximation and Avoiding Mass Matrices. J Sci Comput (2017) 73 :461-494, 2017.

[59] Rémi Abgrall, Paola Bacigaluppi, and Svetlana Tokareva. High-order residual distribution scheme for the time-dependent Euler equations of fluid dynamics. Computers and mathematics with applications, 2018.

[60] R. Abgrall and H. Kumar. Numerical Approximation of a Compressible Multiphase System. Global Science, 2015.

[61] Paola Bacigaluppi, Rémi Abgrall, and Tulin Kaman. Hybrid Explicit Residual Distribution Scheme for Compressible Multiphase Flows. 2017 J. Phys. :Conf. Ser. 821 012007, 2017.

[62] T. Y. Hou and P.G. Le Floch. Why nonconservative schemes converge to wrong solutions : Error analysis. Mathematics of Computation, 62(206) :497–530, 1994.

[63] Carlos Parés. Numerical Methods For Nonconservative Hyperbolic Systems : a Theoretical Framework. SIAM Journal of Numerical Analysis, 2006.

[64] Rémi Abgrall and Smadar Karni. A comment on the computation of non-conservative products. Journal of Computational Physics, 2010.

[65] Richard Saurel and Carlos Pantano. Diffuse-Interface Capturing Methods for Compressible Two-Phase Flows . Annual Review of Fluid Mechanics, 2018.

[66] Wagner W. and al. The IAPWS Industrial Formulation year 1997 For the Thermodynamic Properties of Water and Stream. ASME J. Eng. Gas Turbines Power 122,150-182, 2000.

[67] R. Menikoff and B.J. Plohr. The riemann problem for fluid flow of real materials. Rev. Mod Phys. 61(1989)75-130, 1989.

[68] R. Abgrall, P. Bacigaluppi, and S. Tokareva. A High-order Nonconservative Approach for Hyperbolic Equations in Fluid Dynamics. Computers & Fluids, 169 :10–22, 2018.

[69] Paola Bacigaluppi, Rémi Abgrall, and Svetlana Tokareva. "A Posteriori" Limited High Order and Robust Residual Distribution Schemes for transient Simulations of Fluid Flows in Gas Dynamics. 2019.

[70] E.F. Toro, M. Spruce, and W. Speares. Restoration of the contact surface in the Harten-Lax-van Leer Riemann solver. Springer, 1994.

[71] R.J. LeVeque, M.J. Berger, et al. CLAWPACK Software. available from netlib. att. com in netlib/pdes/claw or on the Web at the URL ftp ://amath. washington. edu/pub/rjl/programs/clawpack. html, 2011.

[72] S. Diot, S. Clain, and R. Loubère. Improved Detection Criteria for the Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD) on Unstructured Meshes with Very High-order Polynomials. Computer & Fluids, 64 :43–63, 2012.

[73] B. Riegel. Contribution à l'étude de la décompression d'une capacité en régime diphasique. PhD thesis, Université national polytechnique de Grenoble, 1978.

[74] Angus Ross Simpson. Large Water Hammer Pressures due to column separation in sloping pipes. PhD thesis, University of Michigan, 1986.

[75] J. A. Sethian and P. Smereka. Level set methods for fluid interfaces. Annual Review of Fluid Mechanics, 35(1) :341–372, 2003.

[76] A. Tomiyama, A. Sou, H. Minagawa, and T. Sakaguchi. Numerical analysis of a single bubble with VOF method. JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering, 36(1) :51–56, 1993.

[77] Halvor Lund. A Hierarchy Of Relaxation Models For Two-phase Flow. SIAM J. Appl. Math., 2012.

[78] J.B.Bdzil, A.K. Kapila, and D.S. Stewart. Two-phase modeling of deflagration-to-detonation transition in granular materials : A critical examination of modeling issues. Physics of fluids, 1999.

[79] Michel Barret, Eric Faucher, and Jean-Marc Hérard. Schemes to Compute Unsteady Flashing Flows. AIAA Journal vol. 40,No 5, may, 2002.

[80] Tore Flåtten and Halvor Lund. Relaxation Two-Phase Flow Models And The Subcharacteristic Condition. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 2011.

[81] Grégoire Allaire, Sébastien Clerc, and Samuel Kokh. A Five-Equation Model for the Simulation of Interfaces between Compressible Fluids. Journal of Computational Physics 181, 577-616, 2002.

[82] Richard Saurel, Fabien Petitpas, and Ray A. Berry. Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitation flows and shocks in multiphase mixtures. Journal of Computational Physics, 2009.

[83] P. Bacigaluppi. High Order Fully Explicit Residual Distribution Approximation for Conservative and Non-Conservative Systems in Fluid Dynamics. PhD thesis, University of Zurich, 2018.

[84] María Luz Munõz Ruiz and Carlos Parés. On the Convergence and Well-Balanced Property of Path-Conservative Numerical Schemes for Systems of Balance Laws. J Sci Comput(2011) 48 :274-295, 2010.

[85] Marco De Lorenzo, Marica Pelanti, and Philippe Lafon. HLLC-type and path-conservative schemes for a single-velocity six-equation two-phase flow model : A comparative study. Applied Mathematics and Computation, 2018.

[86] O. Le Métayer and R. Saurel. The Noble-Abel Stiffened-Gas equation of state. Physics of Fluids, American Institute of Physics, 2016, 28, pp.046102. <10.1063/1.4945981>.<hal-01305974>, 2016.

[87] O. Le Métayer, J. Massoni, and R. Saurel. Elaborating equations of state of a liquid and its vapor for two-phase flow models. International Journal of Thermal Sciences 43(2004)265-276, 2004.

[88] Pablo G. Debenedetti. Metastable Liquids Concepts and Principles. Princeton University Press, 1996.

[89] Randall J. LeVeque. Wave Propagation Algorithms for Multidimensional Hyperbolic Systems. Journal of computational physics 131, 327-353, 1997.

[90] Bram Van Leer. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second-Order Scheme. Journal of computational physics 14, 361-370, 1974.

[91] Ami Harten. High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws. Journal of computational physics,49, 357-393, 1983.

[92] E. van der Weide and H. Deconinck. Positive matrix distribution schemes for hyperbolic systems. Computational Fluid Dynamics, 1996.

[93] Á Csík, H. Deconinck, and S. Poedts. Monotone Residual Distribution Schemes for the Ideal Magnetohydrodynamics Equations on Unstructured Grids. AIAA Journal vol. 39, 2001.

[94] Struijs R. A multi-dimensional upwind discretization method for the Euler equations on unstructured grids. PhD thesis, Technische Universiteit Delft (The Netherlands), 1994.

[95] Davis S.F. Simplified second-order Godunov-type methods. SIAM J Sci Stat Comput, 1988.

[96] M. De Lorenzo, Ph. Lafon, and all. Homogeneous two-phase flow models and accurate steam-water table look-up method for fast transient simulations. International journal of multiphase flow, 2017.

[97] A. Chiapolino, P. Boivin, and R. Saurel. A simple phase transition relaxation solver for liquid-vapor flows. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 83 :583–605, 2017.

[98] H. Lund and P. Aursand. Two-Phase Flow of CO_2 with Phase Transfer. SciVerse Science Direct, 2012.

[99] J.P. Cocchi, R. Saurel, and J.C. Loraud. Some remarks about the resolution of high velocity flows near low densities. Shock Waves(1998) 8 : 119-125, 1997.

[100] G. Layes and O. Le Métayer. Quantitative numerical and experimental studies of the shock accelerated heterogeneous bubbles motion. Physics of fluids 19,042105, 2007.

[101] Gianni DAL MASO, Philippe G. LEFLOCH, and François Murat. Definition and weak stability of nonconservative products. J. Math. Pures Appl., 1995.

[102] S. Clain, S. Diot, and R. Loubère. A High-order Finite Volume Method for Systems of Conservation Laws – Multi-dimensional Optimal Order Detection (MOOD). Journal of Computational Physics, 230(10) :4028–4050, 2011.

[103] Thomas J.R. Hughes and Michel Mallet. A new finite element formulation for computational fluid dynamics : III. The generalized streamline operator for multidimensional advective-diffusive systems. Computer methods in applied mechanics and engineering, 1985.

[104] Erik Burman and Peter Hansbo. Edge stabilization for Galerkin approximations of convection-diffusion-reaction problems. Computer methods in applied mechanics and engineering, 2003.

[105] D. Pathria. Intermediate Boundary Conditions for Runge-Kutta time Integration of Initial-Boundary Value Problems. Journal of Mathematics, 1996.

[106] F. Vilar. A Posteriori Correction of High-Order Discontinuous Galerkin Scheme through Subcell Finite Volume Formulation and Flux Reconstruction. Journal of Computational Physics, 2018.

[107] M.G. Rodio and al. Numerical simulation of cavitating flows under uncertainty. Journal of Physics : Conference Series, 2017.

[108] Pietro Marco Congedo, Maria Giovanna Rodio, Julie Tryoen, and Rémi Abgrall. Reliable and robust thermodynamic model for liquid-vapor mixture. Inria report n 8439, 2013.

[109] P.M. Congedo, E. Goncalves, and M.G. Rodio. About the uncertainty quantification of turbulence and cavitation models in cavitating flows simulations. European Journal of Mechanics B/Fluids, 2015.

[110] Albert Tarantola. Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation. SIAM, 2005.

[111] Jari Kaipo and Erkki Somersalo. Statistical and Computational Inverse Problems. Springer, 2005.

[112] D.S. Sivia and J. Skilling. Data Analysis A Bayesian Tutorial second edition. Oxford University Press, 2006.

[113] S. Marelli and B. Sudret. UQLAB : A framework for uncertainty quantification in matlab. Proc, 2nd In. Conf. on Vulnerability, Risk and Management (ICVRAM2014), Liverpool, United Kingdom, 2014,2554-2563.

[114] Crestaux Thierry, Olivier Le Maître, and Jean-Marc Martinez. Polynomial chaos expansion for sensitivity analysis. Reliability Engineering and system safety, 2009.

[115] S. Marelli and B. Sudret. UQLab user manual – Polynomial chaos expansions. Technical report, Chair of Risk, Safety & Uncertainty Quantification, ETH Zurich, 2018. Report # UQLab-V1.1-104.

[116] Y.C. Pati, R. Rezaiifar, and P.S. Krishnaprasad. Orthogonal Matching Pursuit : Recursive Function Approximation with Applications to Wavelet Decomposition. 27th Annual Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers, 1993.

[117] I.M. Sobol. Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates. Mathematics and Computers in Simulation 55, 2001.

[118] S. Marelli, C. Lamas, B. Sudret, K. Konakli, and C. Mylonas. UQLab user manual – sensitivity analysis. Technical report, Chair of Risk, Safety & Uncertainty Quantification, ETH Zurich, 2018. Report # UQLab-V1.1-106.

[119] Bruno Sudret. Global sensitivity analysis using polynomial chaos expansion. Reliability Engineering and System Safety 93 (7) 964-979, 2008.

[120] Yujie Liu. Contribution à la vérification et à la validation d'un modèle diphasique bifluide instationnaire. PhD thesis, Université Aix-Marseille, 2013.

[121] Hippolyte Lochon. Modélisation et simulation d'écoulements transitoires eau-vapeur en approche bifluide. PhD thesis, Université Aix-Marseille, 2016.

[122] M.D. McKay, R.J. Beckman, and W.J. Conover. A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code. Technometric,vol 21,No.2, 1979.

[123] Persi Diaconis. THE MARKOV CHAIN MONTE CARLO REVOLUTION. Bulletin of the american mathematical society, 2009.

[124] Mohamed S. Ghidaoui and Ming Zhao. A Review of Water Hammer Theory and Practice. Applied Mechanics Reviews, 2005.

[125] F. Daude, P. Galon, and all. Numerical experiments using a HLLC-type scheme with ALE formulation for compressible two-phase flows five-equation models with phase transition. Computers & Fluids, 2014.

[126] Hippolyte Lochon, Frédéric Daude, Pascal Galon, and Jean-Marc Hérard. Comparison of two-fluid models on steam-water transients. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, EDP Sciences, 2016.

Annexe A

Détermination des conditions aux limites pour un mur impénétrable

A.1 Détermination des vecteurs propres

On considère le référentiel $(\overrightarrow{n}, \overrightarrow{t})$ défini tel que :

$$\begin{cases} \overrightarrow{n} = n_x \overrightarrow{x} + n_y \overrightarrow{y}, \\ \overrightarrow{t} = -n_y \overrightarrow{x} + n_x \overrightarrow{y}. \end{cases} \tag{A.1}$$

Le jacobien dans la direction de la normale $(\overrightarrow{n})$ est alors donné par l'expression (A.2) :

$$M = \begin{bmatrix} y_2 u_n & -y1 u_n & y1 & 0 & 0 \\ -y_2 u_n & y1 u_n & y2 & 0 & 0 \\ \frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1} + \frac{q^2}{2}\frac{\partial P}{\partial e} - u_n^2 & \frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2} + \frac{q^2}{2}\frac{\partial P}{\partial \varepsilon} - u_n^2 & 2u_n - u_n \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} & -u_t \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} & \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \\ -u_n u_t & -u_n u_t & u_t & u_n & 0 \\ -u_n H + u_n(\frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1} + \frac{q^2}{2}\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}) & -u_n H + u_n(\frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2} + \frac{q^2}{2}\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}) & H - u_n^2 \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} & -u_n u_t \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} & u_n + u_n \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} \end{bmatrix}, \tag{A.2}$$

avec :

$$\begin{cases} u_n = n_x u + n_y v, \\ u_t = -n_y u + n_x v, \\ dP = \frac{\partial P}{\partial \varepsilon} d\varepsilon + \frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1} d\alpha_1 \rho_1 + \frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2} d\alpha_2 \rho_2, \\ H = \frac{E+P}{\rho}, \\ q^2 = u_n^2 + u_t^2. \end{cases} \tag{A.3}$$

La matrice (A.2) est alors caractérisée par les valeurs propres (A.4) :

$$\begin{cases} \lambda_{1,2,3} = u_n; \quad \lambda_4 = u_n - a; \quad \lambda_5 = u_n + a, \\ \text{avec la vitesse du son } a = \sqrt{Y_1 \frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1} + Y_2 \frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2} + (H - \frac{q^2}{2})\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}. \end{cases} \tag{A.4}$$

Et les vecteurs propres (A.5) :

$$K1=\begin{pmatrix}1\\0\\u_n\\u_t\\\frac{q^2}{2}-\frac{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1\rho_1}}{-\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\end{pmatrix};K2=\begin{pmatrix}0\\1\\u_n\\u_t\\\frac{q^2}{2}-\frac{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2\rho_2}}{-\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\end{pmatrix};K3=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\\-u_t\end{pmatrix};$$
$$K4=\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\u_n-a\\u_t\\H-u_na\end{pmatrix};K5=\begin{pmatrix}y_1\\y_2\\u_n+a\\u_t\\H+u_na\end{pmatrix}. \tag{A.5}$$

A.2 Mise en forme du solveur de Roe

A.2.1 Moyenne de Roe

Les moyennes de Roe entre les états L et R sont données par :

$$\begin{aligned}\overline{u_n}=\frac{\sqrt{\rho_L}u_n^L+\sqrt{\rho_R}u_t^R}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}};\overline{u_t}=\frac{\sqrt{\rho_L}u_t^L+\sqrt{\rho_R}u_t^R}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}};\\ \overline{y_{1,2}}=\frac{\sqrt{\rho_L}y_{1,2}^L+\sqrt{\rho_R}y_{1,2}^R}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}};\overline{H}=\frac{\sqrt{\rho_L}H^L+\sqrt{\rho_R}H^R}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}};\underline{\rho}=\sqrt{\rho_L\rho_R};\\ \Delta K=K_L-K_R.\end{aligned} \tag{A.6}$$

En outre on a les relations entre les variables moyennées :

$$\begin{aligned}\Delta(fg)=\overline{f}\Delta g+\underline{g}\Delta f,\\ \underline{fg}=\underline{f}\,\underline{g}.\end{aligned} \tag{A.7}$$

avec :

$$\begin{aligned}\overline{f}=\frac{\sqrt{\rho_L}f_L+\sqrt{\rho_R}f_R}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}},\\ \underline{f}=\frac{\sqrt{\rho_R}f_L+\sqrt{\rho_L}f_R}{\sqrt{\rho_L}+\sqrt{\rho_R}}.\end{aligned} \tag{A.8}$$

On pose en outre la vitesse du son moyennée : $\boxed{\overline{a}^2=\overline{y_1}\overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1\rho_1}}+\overline{y_2}\overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2\rho_2}}+\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}(\overline{H}-\overline{q^2})}$

Nous allons maintenant démontrer la consistance du jacobien moyenné avec la conservation des flux et en déduire quelques relations utiles entre les valeurs moyennées de Roe. Dans les calculs qui suivent on remplace u_n par u et on utilise le jacobien ramené en une dimension.

A.2.2 Consistance du transport des densités partielles

On veut démontrer que : $\Delta(\alpha_1\rho_1u)=\overline{y_2u}\Delta(\alpha_1\rho_1)-\overline{y_1u}\Delta(\alpha_2\rho_2)+\overline{y_1}\Delta(\rho u)$.

Comme $\overline{y_1}\Delta(\rho u) = \overline{y_1}\underline{\rho}\Delta u + \overline{y_1 u}\Delta(\alpha_1\rho_1) + \overline{y_1 u}\Delta(\alpha_2\rho_2)$,
Et $\overline{y_1}\underline{\rho}\Delta u = \underline{\alpha_1\rho_1}\Delta u$,
On a donc $\overline{y_2 u}\Delta(\alpha_1\rho_1) - \overline{y_1 u}\Delta(\alpha_2\rho_2) + \overline{y_1}\Delta(\rho u) = \overline{u}\Delta(\alpha_1\rho_1) + \underline{\alpha_1\rho_1}\Delta u$.
Puisque $\Delta(\rho_1\alpha_1 u) = \overline{u}\Delta(\alpha_1\rho_1) + \underline{\alpha_1\rho_1}\Delta u$
La relation $\Delta(\alpha_1\rho_1 u) = \overline{y_1 u}\Delta(\alpha_1\rho_1) - \overline{y_1 u}\Delta(\alpha_2\rho_2) + \overline{y_1}\Delta(\rho u)$ est vérifiée et consistante.

A.2.3 Consistance de la quantité de mouvement

L'égalité entre le flux de la quantité de mouvement normale et le jacobien des valeurs moyennées donne l'égalité :

$$\begin{aligned}\Delta(\rho u^2 + P) = (&\overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1\rho_1}}\Delta\alpha_1\rho_1 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2\rho_2}}\Delta\alpha_2\rho_2 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta\varepsilon)\\ &+\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}(\Delta(\frac{\rho u^2}{2}) - \overline{u}\Delta(\rho u) + \frac{1}{2}\overline{u}^2\Delta\rho)\\ &+2\overline{u}\Delta(\rho u) - \overline{u}^2\Delta\rho.\end{aligned} \tag{A.9}$$

On cherche à démontrer que : $\Delta P = \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1\rho_1}}\Delta\alpha_1\rho_1 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2\rho_2}}\Delta\alpha_2\rho_2 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta\varepsilon$.
Pour cela nous allons montrer que :

$$\begin{cases}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}(\Delta(\frac{\rho u^2}{2}) - \overline{u}\Delta(\rho u) + \frac{1}{2}\overline{u}^2\Delta\rho) = 0\\ 2\overline{u}\Delta(\rho u) - \overline{u}^2\Delta\rho = \Delta(\rho u^2)\end{cases} \tag{A.10}$$

Commençons par la première relation :

$$\begin{aligned}\text{on part de } &: \Delta(\rho u^2) - 2\overline{u}\Delta(\rho u) + \overline{u}^2\Delta\rho,\\ \text{Puisque} &: \Delta(\rho u^2) = \overline{u}\Delta(\rho u) + \underline{\rho}\overline{u}\Delta u,\\ \text{On obtient alors } &: \Delta(\rho u^2) - 2\overline{u}\Delta(\rho u) + \overline{u}^2\Delta\rho = \underline{\rho}\overline{u}\Delta u + \overline{u}^2\Delta\rho - \overline{u}\Delta(\rho u),\\ \text{Puisque} &: \underline{\rho}\Delta u + \overline{u}\Delta\rho = \Delta(\rho u),\\ \text{On obtient alors} &: \Delta(\rho u^2) - 2\overline{u}\Delta(\rho u) + \overline{u}^2\Delta\rho = 0.\end{aligned} \tag{A.11}$$

Pour la seconde relation :

$$\begin{aligned}\Delta(\rho u^2) &= \underline{\rho}\overline{u}\Delta u + \overline{u}\Delta(\rho u),\\ \text{Or} : \Delta(\rho u) &= \underline{\rho}\Delta u + \overline{u}\Delta\rho,\end{aligned} \tag{A.12}$$

On introduit cette expression et on obtient alors : $\Delta(\rho u^2) = 2\overline{u}\Delta(\rho u) - \overline{u}^2\Delta\rho$.

On en déduit alors les relations :
— $\boxed{\Delta P = \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1\rho_1}}\Delta\alpha_1\rho_1 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2\rho_2}}\Delta\alpha_2\rho_2 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta\varepsilon}$
— $\boxed{\Delta(\rho u^2) = 2\overline{u}\Delta(\rho u) - \overline{u}^2\Delta\rho}$

Et le jacobien est alors consistant avec le flux de la quantité de mouvement si la condition sur la pression est vérifiée.

A.2.4 Relation sur l'énergie moyennée

On veut démontrer l'égalité entre le flux de l'énergie totale et le jacobien des valeurs moyennées sur l'énergie totale :

$$\begin{aligned}\Delta u(E+P) = \overline{u}(-\overline{H} + \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1}} + \frac{\overline{u}^2}{2}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}})\Delta(\alpha_1\rho_1) + \overline{u}(-\overline{H} + \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2}} + \frac{\overline{u}^2}{2}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}})\Delta(\alpha_2\rho_2) \\ +(\overline{H} - \overline{u}^2\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}})\Delta(\rho u) + (\overline{u} + \overline{u}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}})\Delta E.\end{aligned} \tag{A.13}$$

D'une part : $\overline{u}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta E = \overline{u}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta\varepsilon + \frac{1}{2}\overline{u}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta(\rho u^2)$.

En outre nous avons démontré que $\Delta P = \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1}}\Delta\alpha_1\rho_1 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2}}\Delta\alpha_2\rho_2 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta\varepsilon$

Le second membre de (A.13) se réécrit donc :

$-\overline{u}\overline{H}\Delta\rho + \overline{u}\Delta P + \overline{H}\Delta(\rho u) + \overline{u}\Delta E + \overline{u}\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}(\frac{\overline{u}^2}{2}\Delta\rho - \overline{u}\Delta(\rho u) + \Delta\frac{\rho u^2}{2})$.

Puisque : $\Delta\frac{\rho u^2}{2} = \frac{1}{2}(\overline{\rho}\overline{u})^2\Delta(\frac{1}{\rho}) + \frac{1}{2\underline{\rho}}\Delta(\rho u)^2 = -\frac{1}{2}\overline{u}^2\Delta\rho + \overline{u}\Delta(\rho u)$,

Le second membre de (A.13) se réécrit alors :

$-\overline{u}\overline{H}\Delta\rho + \overline{u}\Delta P + \overline{H}\Delta(\rho u) + \overline{u}\Delta E$.

Passons au premier membre de (A.13) : $\Delta(u(E+P)) = \Delta((\rho u)H) = \overline{H}\Delta(\rho u) + \underline{\rho}\overline{u}\Delta H$

Puisque : $\underline{\rho}\overline{u}\Delta H = \underline{\rho}\overline{u}\Delta\frac{E+P}{\rho} = \overline{u}\Delta(E+P) - \overline{u}\frac{\overline{E}+\overline{P}}{\underline{\rho}}\Delta\rho = \overline{u}\Delta E + \overline{u}\Delta P - \overline{u}\overline{H}\Delta\rho$,

On trouve : $\Delta(u(E+P)) = -\overline{u}\overline{H}\Delta\rho + \overline{u}\Delta P + \overline{H}\Delta(\rho u) + \overline{u}\Delta E$.

Ce qui valide la consistance de nos valeurs moyennées sur l'énergie totale du système.

On peut en outre conclure que la seule contrainte à respecter afin d'assurer la consistance du problème est la condition sur la différence des pressions :

$$\Delta P = \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1}}\Delta\alpha_1\rho_1 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2}}\Delta\alpha_2\rho_2 + \overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}\Delta\varepsilon. \tag{A.14}$$

A.3 Détermination des coefficients entre les sauts et les vecteurs propres

Avant de calculer les flux, il est nécessaire de déterminer les coefficients α reliant les sauts des variables aux vecteurs propres selon la relation :

$$\Delta u = \sum_{i=1}^{5} \alpha_i \overline{K(i)}. \tag{A.15}$$

Les calculs sont effectués en omettant les moyennes de Roe pour alléger les calculs. En outre on notera $Pr1 = \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1}}$, $Pr2 = \overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2}}$, $Pe = \overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}$. On pose $aa = \alpha_4 + \alpha_5$ et $bb = \alpha_5 - \alpha_4$. Le système d'équations à résoudre est donné par :

$$\begin{cases} (1) : \alpha_1 + y_1 aa = \Delta\alpha_1\rho_1; \\ (2) : \alpha_2 + y_2 aa = \Delta\alpha_2\rho_2; \\ (3) : u_n(\alpha_1+\alpha_2) + u_n aa + abb = \Delta\rho u_n; \\ (4) : u_t(\alpha_1+\alpha_2) + \alpha_3 + u_t aa = \Delta\rho u_t; \\ (5) : \frac{q^2}{2}(\alpha_1+\alpha_2) - \frac{Pr1}{Pe}\alpha_1 - \frac{Pr2}{Pe}\alpha_2 + u_t\alpha_3 + Haa + u_n abb = \Delta E. \end{cases} \tag{A.16}$$

L'opération $(1)u_t + (2)u_t$ donne : $u_t(\alpha_1+\alpha_2) + u_t aa = u_t \Delta\rho$.

L'équation (4) se simplifie alors en : $\alpha_3 + u_t\Delta\rho = \Delta\rho u_t$.

On obtient alors $\boxed{\alpha_3 = \rho\Delta u_t}$.

On cherche maintenant à déterminer aa et bb.

(1)+(2) donne : $\alpha_1+\alpha_2 = \Delta\rho - aa$

L'équation (3) se réécrit alors $u_n(\Delta\rho - aa) + u_n aa + abb = \Delta\rho u_n$.

L'équation (4) se réécrit alors $u_t(\Delta\rho - aa) + \rho\Delta u_t + u_t aa = \Delta\rho u_t$.

En effectuant l'opération $(3)u_t - (4)u_n$ on a alors : $au_t bb - \rho u_n\Delta u_t = u_t\Delta\rho u_n - u_n\Delta\rho u_t$.

Cela se réécrit : $au_t bb = \rho u_t \Delta u_n$.

On obtient finalement : $\boxed{bb = \frac{\rho\Delta u_n}{a}}$.

Pour calculer aa, on utilise la relation (5), de même on remplace :$\alpha_1+\alpha_2 = \Delta\rho - aa$.

L'équation devient alors :

(5) :$\frac{q^2}{2}(\Delta\rho - aa) - \frac{Pr1}{Pe}(\Delta\alpha_1\rho_1 - y_1 aa) - \frac{Pr2}{Pe}(\Delta\alpha_2\rho_2 - y_2 aa) + \rho u_t\Delta u_t + Haa + \rho u_n\Delta u_n = \Delta E$.

Or $aa(H - \frac{q^2}{2}) + y1\frac{Pr1}{Pe} + y2\frac{Pr2}{Pe} = aa\frac{a^2}{Pe}$.

Et $\rho u_n\Delta u_n = \frac{1}{2}\rho\Delta u_n^2 = \frac{1}{2}\Delta\rho u_n^2 - \frac{u_n^2}{2}\Delta\rho$ et $\rho u_t\Delta u_t = \frac{1}{2}\rho\Delta u_t^2 = \frac{1}{2}\Delta\rho u_t^2 - \frac{u_t^2}{2}\Delta\rho$.

On peut alors ainsi réécrire (5) : $aa(a^2) - (Pr1\Delta\alpha 1\rho_1 + Pr2\Delta\alpha 2\rho_2 + Pe\Delta e) = 0$.

Puisque $\Delta P = Pr1\Delta\alpha 1\rho_1 + Pr2\Delta\alpha 2\rho_2 + Pe\Delta e$,

On obtient finalement $\boxed{aa = \frac{\Delta P}{a^2}}$. Les autres valeurs de α suivent aisément.

On reprenant la notation des moyennes de Roe on a alors :

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \Delta\alpha_1\rho_1 - \overline{y_1}\frac{\Delta P}{\overline{a}^2}; \alpha_2 = \Delta\alpha_2\rho_2 - \overline{y_2}\frac{\Delta P}{\overline{a}^2}; \alpha_3 = \underline{\rho}\Delta\overline{u_t}; \\ \alpha_4 = \frac{1}{2}(\frac{\Delta P}{\overline{a}^2} - \underline{\rho}\frac{\Delta u_n}{\overline{a}}); \alpha_5 = \frac{1}{2}(\frac{\Delta P}{\overline{a}^2} + \underline{\rho}\frac{\Delta u_n}{\overline{a}}) \end{aligned} \tag{A.17}$$

A.4 Détermination du flux

On veut calculer le flux (A.18) :

$$F(qcl).\overrightarrow{n} = \frac{1}{2}(F_R + F_L) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5}\alpha_i\overline{\lambda_i}\overline{K_i} \tag{A.18}$$

R est l'état de la condition aux limites, L est l'état connu du domaine. Pour modéliser une condition aux limites de mur impénétrable on pose :

$$\begin{cases} (\alpha_1\rho_1)(qcl) = (\alpha_1\rho_1)(q) \\ (\alpha_2\rho_2)(qcl) = (\alpha_2\rho_2)(q) \\ (\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})(qcl) = -(\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{n})(q) \\ (\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{t})(qcl) = (\rho\overrightarrow{u}.\overrightarrow{t})(q) \\ (E)(qcl) = (E)(q) \end{cases} \tag{A.19}$$

On a alors $\Delta u_n = 2u_n^L$, $\Delta P = 0$,$\Delta\alpha_1\rho_1 = 0$,$\Delta\alpha_2\rho_2 = 0$.

En outre les moyennes de Roe deviennent $\overline{u_n} = 0$, $\overline{u_t} = u_t^L$,$\underline{\rho} = \rho_L$. On omet l'indice L dans la suite du développement.

Le terme $-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{5}\alpha_i\overline{\lambda_i}\overline{K_i}$ devient alors :

$$-\frac{1}{2}\rho u_n\begin{pmatrix} y1\\ y2\\ -\overline{a}\\ u_t\\ H\end{pmatrix}-\frac{1}{2}\rho u_n\begin{pmatrix} y1\\ y2\\ +\overline{a}\\ u_t\\ H\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -\rho u_n y1\\ -\rho u_n y2\\ 0\\ -\rho u_n u_t\\ -\rho u_n H\end{pmatrix}. \tag{A.20}$$

Le terme $\frac{1}{2}(F_L+F_R)$ quant à lui vaut :

$$\frac{1}{2}(F_L+F_R)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} \rho u_n y1\\ \rho u_n y2\\ \rho u_n u_n+P\\ \rho u_n u_t\\ \rho u_n H\end{pmatrix}+\frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\rho u_n y1\\ -\rho u_n y2\\ \rho u_n u_n+P\\ -\rho u_n u_t\\ -\rho u_n H\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0\\ 0\\ \rho u_n^2+P\\ 0\\ 0\end{pmatrix} \tag{A.21}$$

On a donc selon (A.18) le flux de la condition aux limites donné par la relation (A.22) :

$$F(qcl).\overrightarrow{n}=\begin{pmatrix} -\rho u_n y1\\ -\rho u_n y2\\ \rho u_n^2+P\\ -\rho u_n u_t\\ -\rho u_n H\end{pmatrix} \tag{A.22}$$

Le terme $F(q).\overrightarrow{n}$ est quant à lui donné par l'expression (A.23) :

$$F(q).\overrightarrow{n}=\begin{pmatrix} \rho u_n y1\\ \rho u_n y2\\ \rho u_n^2+P\\ \rho u_n u_t\\ \rho u_n H\end{pmatrix} \tag{A.23}$$

On peut finalement déterminer le résidu $F(q).\overrightarrow{n}-F(qcl).\overrightarrow{n}$:

$$F(q).\overrightarrow{n}-F(qcl).\overrightarrow{n}=\begin{pmatrix} 2\rho u_n y1\\ 2\rho u_n y2\\ 0\\ 2\rho u_n u_t\\ 2\rho u_n H\end{pmatrix} \tag{A.24}$$

En passant du repère (n,t) au repère (x,y) l'expression est alors donnée par (A.25) :

$$F(q).\overrightarrow{n}-F(qcl).\overrightarrow{n}=\begin{pmatrix} 2\rho u_n y1\\ 2\rho u_n y2\\ -2\rho u_n u_t n(y)\\ 2\rho u_n u_t n(x)\\ 2\rho u_n H\end{pmatrix} \tag{A.25}$$

Remarque : dans notre cas il n'est pas nécessaire de calculer les dérivés partielles de la pression $\overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_1 \rho_1}}$, $\overline{\frac{\partial P}{\partial \alpha_2 \rho_2}}$ et $\overline{\frac{\partial P}{\partial \varepsilon}}$. En outre puisque les densités partielles et l'énergie interne ne varient pas, celles-ci sont par conséquent nulles et le saut de pression est nul. La condition (A.14) est alors toujours vérifiée. Dans un cadre plus général, il serait alors nécessaire de calculer les dérivés partielles de manière à ce que la relation (A.14) soit respectée et pouvoir calculer la vitesse du son $\overline{a}$, le lecteur peut se référer à [6] où une méthode est présentée pour le modèle à quatre équations.

université PARIS-SACLAY
ÉCOLE DOCTORALE
Sciences mécaniques et énergétiques, matériaux et géosciences (SMEMAG)

Titre : Schémas aux résidus distribués et méthodes à propagation des ondes pour la simulation d'écoulements compressibles diphasiques avec transfert de chaleur et de masse

Mots clés : écoulements diphasiques, modèle à transition de phase, cavitation, schémas aux résidus distribués, quantification d'incertitude

Résumé : Ce travail a pour thème la simulation numérique d'écoulements diphasiques dans un contexte industriel. En effet, la simulation d'écoulements diphasiques est un domaine qui présente de nombreux défis, en raison de phénomènes complexes qui surviennent, comme la cavitation et autres transferts entre les phases. En outre, ces écoulements se déroulent généralement dans des géométries complexes rendant difficile une résolution efficiente. Les modèles que nous considérons font partie de la catégorie des modèles à interfaces diffuses et permettent de prendre en compte aisément les différents transferts entre les phases. Cette classe de modèles inclut une hiérarchie de sous-modèles pouvant simuler plus ou moins d'interactions entre les phases. Pour mener à bien cette étude nous avons en premier lieu comparé les modèles diphasiques dits à quatre équations et six équations, en incluant les effets de transfert de masse. Nous avons ensuite choisi de nous concentrer sur le modèle à quatre équations. L'objectif majeur de notre travail a alors été d'étendre les méthodes aux résidus distribués à ce modèle. Dans le contexte des méthodes de résolution numérique, il est courant d'utiliser la forme conservative des équations de bilan. En effet, la résolution sous forme non-conservative conduit à une mauvaise résolution du problème. Cependant, résoudre les équations sous forme non-conservative peut s'avérer plus intéressant d'un point de vue industriel. Dans ce but, nous utilisons une approche développée récemment permettant d'assurer la conservation en résolvant un système sous forme non-conservative, à condition que la forme conservative soit connue. Nous validons ensuite notre méthode et l'appliquons à des problèmes en géométries complexes. Finalement, la dernière partie de notre travail est dédiée à étudier la validité des modèles à interfaces diffuses pour des applications à des problèmes industriels réels. On cherche alors, en utilisant des méthodes de quantification d'incertitude, à obtenir les paramètres rendant nos simulations les plus vraisemblables et cibler les éventuels développements pouvant rendre nos simulations plus réalistes.

Title : Residual distribution schemes and wave propagation methods for the simulation of two-phase compressible flows with heat and mass transfer

Keywords : two-phase flows, transition modelling, cavitation, residual distribution scheme, uncertainty quantification

Abstract : The topic of this thesis is the numerical simulation of two-phase flows in an industrial framework. Two-phase flows modelling is a challenging domain to explore, mainly because of the complex phenomena involved, such as cavitation and other transfer processes between phases. Furthermore, these flows occur generally in complex geometries, which makes difficult the development of efficient resolution methods. The models that we consider belong to the class of diffuse interface models, and they allow an easy modelling of transfers between phases. The considered class of models includes a hierarchy of sub-models, which take into account different levels of interactions between phases. To pursue our studies, first we have compared the so-called four-equation and six-equation two-phase flow models, including the effects of mass transfer processes. We have then chosen to focus on the four-equation model. One of the main objective of our work has been to extend residual distribution schemes to this model. In the context of numerical solution methods, it is common to use the conservative form of the balance law. In fact, the solution of the equations under a non-conservative form may lead to a wrong solution to the problem. Nonetheless, solving the equations in non-conservative form may be more interesting from an industrial point of view. To this aim, we employ a recent approach, which allows us to ensure conservation while solving a non-conservative system, at the condition of knowing its conservative form. We then validate our method and apply it to problems with complex geometry. Finally, the last part of our work is dedicated to the evaluation of the validity of the considered diffuse interface model for applications to real industrial problems. By using uncertainty quantification methods, the objective is to get parameters that make our simulations the most plausible, and to target the possible extensions that can make our simulations more realistic.

Université Paris-Saclay
Espace Technologique / Immeuble Discovery
Route de l'Orme aux Merisiers RD 128 / 91190 Saint-Aubin, France