## Modélisation du changement de phase dans des écoulements à interface

Samuel Kokh - Gloria Faccanoni

CEA Saclay



Modélisation du changement de phase

- Modélisation statique
- Modélisation dynamique

### 3 MTT-équilibre

- Approximation
- Tests numériques

Modélisation du changement de phase

- Modélisation statique
- Modélisation dynamique

#### 3 MTT-équilibre

- Approximation
- Tests numériques

## Caro F. (2004).

Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur.

Ph.D. thesis, École Polytechnique.

- modèle isotherme
- modèle anisotherme avec changement de phase

- amélioration de l'algorithme global,
- résolution "exacte" de l'étape de relaxation (changement de phase),
- étude complète du cas Gaz Parfaits Gaz Parfaits.

## Caro F. (2004).

Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur.

Ph.D. thesis, École Polytechnique.

- modèle isotherme
- modèle anisotherme avec changement de phase

- amélioration de l'algorithme global,
- résolution "exacte" de l'étape de relaxation (changement de phase),
- étude complète du cas Gaz Parfaits Gaz Parfaits.

## Caro F. (2004).

Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur.

Ph.D. thesis, École Polytechnique.

- modèle isotherme
- modèle anisotherme avec changement de phase

- amélioration de l'algorithme global,
- résolution "exacte" de l'étape de relaxation (changement de phase),
- étude complète du cas Gaz Parfaits Gaz Parfaits.

## Caro F. (2004).

Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur.

Ph.D. thesis, École Polytechnique.

- modèle isotherme
- modèle anisotherme avec changement de phase

- amélioration de l'algorithme global,
- résolution "exacte" de l'étape de relaxation (changement de phase),
- étude complète du cas Gaz Parfaits Gaz Parfaits.



Modélisation du changement de phase

- Modélisation statique
- Modélisation dynamique

#### MTT-équilibre

- Approximation
- Tests numériques

## Modèle à interface "épaisse"



Fig.:  $P_{\alpha} = P_{\alpha}(\tau)$  à entropie ou température constante

## Modèle à interface "épaisse"

#### Fig.: Paramètre d'ordre abstrait $z \in [0, 1]$ qui donne la position de l'interface



## Modèle à interface "épaisse"

#### Fig.: Paramètre d'ordre abstrait $z \in [0, 1]$ qui donne la position de l'interface



Interface  $\Gamma(t) := \{ (x, t) \text{ tels que } 0 < z(x, t) < 1 \}$ 

densité du mélange : 
$$\rho = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} \rho_{\alpha}$$
  
volume du mélange :  $\tau = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \tau_{\alpha}$  avec  $\begin{array}{c} y_{\alpha} := \frac{Z_{\alpha} \rho_{\alpha}}{\rho} \\ \tau_{\alpha} y_{\alpha} = Z_{\alpha} \tau \end{array}$ 

densité du mélange :  $\rho = \sum_{\alpha} z_{\alpha} \rho_{\alpha}$ volume du mélange :  $\tau = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \tau_{\alpha}$  avec  $\begin{cases} y_{\alpha} := \frac{Z_{\alpha} \rho_{\alpha}}{\rho} \\ \tau_{\alpha} y_{\alpha} = z_{\alpha} \tau \end{cases}$ 

énergie interne du mélange :  $\varepsilon = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}$  avec  $\varepsilon_{\alpha} y_{\alpha} = \psi_{\alpha} \varepsilon$ 

densité du mélange :  $\rho = \sum_{\alpha} z_{\alpha} \rho_{\alpha}$ volume du mélange :  $\tau = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \tau_{\alpha}$  avec  $\begin{cases} y_{\alpha} := \frac{Z_{\alpha} \rho_{\alpha}}{\rho} \\ \tau_{\alpha} y_{\alpha} = z_{\alpha} \tau \end{cases}$ 

énergie interne du mélange :  $\varepsilon = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}$  avec  $\varepsilon_{\alpha} y_{\alpha} = \psi_{\alpha} \varepsilon$ 

entropie spécifique de la phase  $\alpha$  :  $s_{\alpha}$ enthalpie libre spécifique de la phase  $\alpha$  :  $g_{\alpha}$   $\alpha = 1, 2.$ 

# Modélisation statique

#### Sans changement de phase

























## **Optimisation convexe**

### Théorème



## Optimisation convexe

### Théorème



$$s = ys_1(\tau_1, \varepsilon_1) + (1 - y)s_2(\tau_2, \varepsilon_2)$$
 avec  $y := \frac{2p}{2}$ 

• L'optimisation par rapport à  $\varepsilon_{\alpha}$  équivaut à  $T_1 = T_2$ .

• L'optimisation par rapport à  $\tau_{\alpha}$  équivaut à  $\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$ 

• L'optimisation par rapport à y équivaut à  $\frac{91}{T_1} = \frac{92}{T_2}$ .

$$s = ys_1(\tau_1, \varepsilon_1) + (1 - y)s_2(\tau_2, \varepsilon_2)$$
 avec  $y := \frac{2\rho}{\rho}$ 

• L'optimisation par rapport à  $\varepsilon_{\alpha}$  équivaut à  $T_1 = T_2$ .

• L'optimisation par rapport à  $\tau_{\alpha}$  équivaut à  $\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$ 

• L'optimisation par rapport à y équivaut à  $\frac{g_1}{T_1} = \frac{g_2}{T_2}$ .

$$s = ys_1(\tau_1, \varepsilon_1) + (1 - y)s_2(\tau_2, \varepsilon_2)$$
 avec  $y := \frac{2\rho_1}{\rho}$ 

• L'optimisation par rapport à  $\varepsilon_{\alpha}$  équivaut à  $T_1 = T_2$ .

• L'optimisation par rapport à  $\tau_{\alpha}$  équivaut à  $\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$ 

• L'optimisation par rapport à y équivaut à  $\frac{g_1}{T_1} = \frac{g_2}{T_2}$ .

$$s = ys_1(\tau_1, \varepsilon_1) + (1 - y)s_2(\tau_2, \varepsilon_2)$$
 avec  $y := \frac{2\rho_1}{\rho_1}$ 

- L'optimisation par rapport à  $\varepsilon_{\alpha}$  équivaut à  $T_1 = T_2$ .
- L'optimisation par rapport à  $\tau_{\alpha}$  équivaut à  $\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$ .

• L'optimisation par rapport à y équivaut à  $\frac{g_1}{T_1} = \frac{g_2}{T_2}$ .

$$s = ys_1(\tau_1, \varepsilon_1) + (1 - y)s_2(\tau_2, \varepsilon_2)$$
 avec  $y := \frac{z \rho_1}{\rho}$ 

- L'optimisation par rapport à  $\varepsilon_{\alpha}$  équivaut à  $T_1 = T_2$ .
- L'optimisation par rapport à  $\tau_{\alpha}$  équivaut à  $\frac{P_1}{T_1} = \frac{P_2}{T_2}$ .
- L'optimisation par rapport à y équivaut à  $\frac{g_1}{T_1} = \frac{g_2}{T_2}$ .

## Interpretation géométrique du problème d'optimisation

#### Théorème

Notons  $S_{\alpha}$  la surface  $(\tau, \varepsilon) \mapsto s_{\alpha}(\tau, \varepsilon)$  dans l'espace  $(\tau, \varepsilon, s)$ . Le système équivaut à trouver un point  $(\tau_{\alpha}, \varepsilon_{\alpha})$  sur chaque surface tel que les deux hyperplans tangents en ces points coïncident.



 $\widetilde{S}_{\alpha}(\tau,\varepsilon) = \frac{1}{T_{\alpha}}\varepsilon + \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}\tau + \frac{s_{\alpha}T_{\alpha}-\varepsilon_{\alpha}-P_{\alpha}}{T_{\alpha}}$  $\widetilde{S}_{1}||\widetilde{S}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{c} P_{1} = P_{2} \\ T_{1} = T_{2} \end{array} \right.$  $\widetilde{S}_{1} = \widetilde{S}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad a_{1} = a_{2}$ 



$$\widetilde{S}_{\alpha}(\tau,\varepsilon) = \frac{1}{T_{\alpha}}\varepsilon + \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}\tau + \frac{s_{\alpha}T_{\alpha}-\varepsilon_{\alpha}-P_{\alpha}\tau_{\alpha}}{T_{\alpha}}$$

$$\overline{S}_{1}||\overline{S}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} P_{1} = P_{2} \\ T_{1} = T_{2} \end{cases}$$

$$\overline{S}_{1} \equiv \overline{S}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad g_{1} = g_{2}$$



$$\widetilde{S}_{\alpha}(\tau,\varepsilon) = \frac{1}{T_{\alpha}}\varepsilon + \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}\tau + \frac{s_{\alpha}T_{\alpha}-\varepsilon_{\alpha}-P_{\alpha}\tau_{\alpha}}{T_{\alpha}}$$
$$\widetilde{S}_{1}||\widetilde{S}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} P_{1} = P_{2} \\ T_{1} = T_{2} \end{cases}$$
$$\widetilde{S}_{1} \equiv \widetilde{S}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad g_{1} = g_{2}$$



$$\widetilde{\mathbf{S}}_{\alpha}(\tau,\varepsilon) = \frac{1}{T_{\alpha}}\varepsilon + \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}\tau + \frac{s_{\alpha}T_{\alpha} - \varepsilon_{\alpha} - P_{\alpha}\tau_{\alpha}}{T_{\alpha}}$$
$$\widetilde{\mathbf{S}}_{1} || \widetilde{\mathbf{S}}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} P_{1} = P_{2} \\ T_{1} = T_{2} \end{cases}$$
$$\widetilde{\mathbf{S}}_{1} \equiv \widetilde{\mathbf{S}}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad g_{1} = g_{2}$$



$$\widetilde{s}_{\alpha}(\tau,\varepsilon) = \frac{1}{T_{\alpha}}\varepsilon + \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}\tau + \frac{s_{\alpha}T_{\alpha}-\varepsilon_{\alpha}-P_{\alpha}\tau_{\alpha}}{T_{\alpha}}$$
$$\widetilde{s}_{1}||\widetilde{s}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} P_{1} = P_{2} \\ T_{1} = T_{2} \end{cases}$$
$$\widetilde{s}_{1} \equiv \widetilde{s}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad g_{1} = g_{2}$$



$$\widetilde{s}_{\alpha}(\tau,\varepsilon) = \frac{1}{T_{\alpha}}\varepsilon + \frac{P_{\alpha}}{T_{\alpha}}\tau + \frac{s_{\alpha}T_{\alpha}-\varepsilon_{\alpha}-P_{\alpha}\tau_{\alpha}}{T_{\alpha}}$$
$$\widetilde{s}_{1}||\widetilde{s}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} P_{1} = P_{2} \\ T_{1} = T_{2} \end{cases}$$
$$\widetilde{s}_{1} \equiv \widetilde{s}_{2} \quad \Leftrightarrow \quad g_{1} = g_{2}$$



 $s(\rho, \varepsilon)$  est l'enveloppe concave de la fonction

$$(\tau, \varepsilon) \longrightarrow \max \{ s_1(\tau, \varepsilon) , s_2(\tau, \varepsilon) \}$$
$s(\rho, \varepsilon)$  est l'enveloppe concave de la fonction

$$(\tau,\varepsilon) \longrightarrow \max\{S_1(\tau,\varepsilon), S_2(\tau,\varepsilon)\}$$

#### $s(\rho, \varepsilon)$ est l'enveloppe concave de la fonction

 $(\tau \epsilon) \longrightarrow \max\{s_1(\tau \epsilon) : s_2(\tau \epsilon)\}$ 

#### $s(\rho, \varepsilon)$ est l'enveloppe concave de la fonction

$$(\tau,\varepsilon) \longrightarrow \max \{ \mathbf{S}_1(\tau,\varepsilon) , \mathbf{S}_2(\tau,\varepsilon) \}$$



#### $s(\rho, \varepsilon)$ est l'enveloppe concave de la fonction

(- -)

$$(\tau, \varepsilon) \longrightarrow \operatorname{IIIdx} \{ \mathbf{S}_1(\tau, \varepsilon) , \mathbf{S}_2(\tau, \varepsilon) \}$$

 $a_{1}(a_{1}(a_{2})) = a_{1}(a_{2})$ 



## Conclusion



#### Equations :

 $\begin{aligned} &\partial_t(z\rho_1) \\ &\partial_t((1-z)\rho_2) \\ &\partial_t(\rho u) \\ &\partial_t\left(\rho\left(\varepsilon + |u|^2/2\right)\right) \\ &\partial_t z \end{aligned}$ 

 $\begin{array}{rcl} \operatorname{div}(z\rho_1 u) &=& S_y,\\ \operatorname{div}((1-z)\rho_2 u) &=& -S_y,\\ \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P \operatorname{Id}) &=& 0,\\ \operatorname{div}((\rho (\varepsilon + |u|^2/2) + P) u) &=& 0,\\ u \cdot \operatorname{qrad} z &=& S_z, \end{array}$ 

Equations :

$$\begin{array}{rcl} \partial_t(z\rho_1) & + & \operatorname{div}(z\rho_1 u) & = & S_y, \\ \partial_t((1-z)\rho_2) & + & \operatorname{div}((1-z)\rho_2 u) & = & -S_y, \\ \partial_t(\rho u) & + & \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P \operatorname{Id}) & = & 0, \\ \partial_t(\rho(\varepsilon + |u|^2/2)) & + & \operatorname{div}((\rho(\varepsilon + |u|^2/2) + P) u) & = & 0, \\ \partial_t z & + & u \cdot \operatorname{qrad} z & = & S_z, \end{array}$$

Equations :

$$\begin{array}{rcl} \partial_t(z\rho_1) & + & \operatorname{div}(z\rho_1 u) & = & S_y, \\ \partial_t((1-z)\rho_2) & + & \operatorname{div}((1-z)\rho_2 u) & = & -S_y, \\ \partial_t(\rho u) & + & \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P \operatorname{Id}) & = & 0, \\ \partial_t(\rho(\varepsilon + |u|^2/2)) & + & \operatorname{div}((\rho(\varepsilon + |u|^2/2) + P) u) & = & 0, \\ \partial_t z & + & u \cdot \operatorname{grad} z & = & S_z, \end{array}$$

### fermeture isotherme

$$T_1 = T_2,$$
  

$$P = \sum_{\alpha} Z_{\alpha} P_{\alpha},$$
  

$$S_y = \lambda (g_2 - g_1),$$
  

$$S_z = \kappa (P_1 - P_2),$$

fermeture isobare (gaz parfaits)

$$P = P_1 = P_2,$$

$$S_{y} = \lambda (h_{2} - h_{1}), S_{z} = \kappa (\rho_{1} s_{1} T_{1} - \rho_{2} s_{2} T_{2}).$$

Equations :

$$\begin{array}{rcl} \partial_t(z\rho_1) & + & \operatorname{div}(z\rho_1 u) & = & \mathcal{S}_y, \\ \partial_t((1-z)\rho_2) & + & \operatorname{div}((1-z)\rho_2 u) & = & -\mathcal{S}_y, \\ \partial_t(\rho u) & + & \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P \operatorname{Id}) & = & 0, \\ \partial_t(\rho(\varepsilon + |u|^2/2)) & + & \operatorname{div}((\rho(\varepsilon + |u|^2/2) + P) u) & = & 0, \\ \partial_t z & + & u \cdot \operatorname{grad} z & = & \mathcal{S}_z, \end{array}$$

#### fermeture isotherme

$$T_1 = T_2,$$
  

$$P = \sum_{\alpha} z_{\alpha} P_{\alpha},$$
  

$$S_y = \lambda (g_2 - g_1),$$
  

$$S_z = \kappa (P_1 - P_2),$$

$$\begin{split} \partial_t(\rho s) + \operatorname{div}(\rho u s) &= \\ &= \frac{\left(S_z(P_1 - P_2) + S_y(g_2 - g_1)\right)}{T} \ge 0\\ S_y &= \lambda(g_2 - g_1),\\ S_z &= \kappa(P_1 - P_2). \end{split}$$

#### Introduction

Modélisation du changement de phase

- Modélisation statique
- Modélisation dynamique



- Approximation
- Tests numériques

## Modèle MTT-équilibre

$$\begin{cases} \partial_t(z\rho_1) &+ \operatorname{div}(z\rho_1u) &= \lambda(g_2 - g_1) \\ \partial_t((1 - z)\rho_2) &+ \operatorname{div}((1 - z)\rho_2u) &= -\lambda(g_2 - g_1) \\ \partial_t(\rho u) &+ \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P) &= 0 \\ \partial_t(\rho(\varepsilon + |u|^2/2)) &+ \operatorname{div}((\rho(\varepsilon + |u|^2/2) + P)u) &= 0 \\ \partial_t z &+ u \cdot \operatorname{grad} z &= k(P_2 - P_1) \end{cases}$$

## Modèle MTT-équilibre

$$\begin{cases} \partial_t(z\rho_1) &+ \operatorname{div}(z\rho_1 u) &= \lambda(g_2 - g_1) \\ \partial_t((1 - z)\rho_2) &+ \operatorname{div}((1 - z)\rho_2 u) &= -\lambda(g_2 - g_1) \\ \partial_t(\rho u) &+ \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P) &= 0 \\ \partial_t(\rho(\varepsilon + |u|^2/2)) &+ \operatorname{div}((\rho(\varepsilon + |u|^2/2) + P) u) &= 0 \\ \partial_t z &+ u \cdot \operatorname{grad} z &= k(P_2 - P_1) \end{cases}$$

#### $\kappa = \lambda = +\infty$

#### trouver $\rho_{\alpha}^* \ge 0$ et $z^* \in ]0, 1[$

 $\begin{cases} T_1 = T_2 & (\text{fermeture isotherme}) \\ P_1(\rho_1, T_1) = P_2(\rho_2, T_2) & (k \to +\infty) & (\text{éq. mécanique}) \\ g_1(\rho_1, T_1) = g_2(\rho_2, T_2) & (\lambda \to +\infty) & (\text{éq. thermodynamique}) \end{cases}$ sous la contrainte  $\begin{cases} \rho \varepsilon = z^* \rho_1^* \varepsilon_1 + (1 - z^*) \rho_2^* \varepsilon_2 \\ \rho = z^* \rho_1^* + (1 - z^*) \rho_2^* \end{cases}$ 

## Modèle MTT-équilibre

$$\begin{cases} \partial_t(z\rho_1) &+ \operatorname{div}(z\rho_1 u) &= \lambda(g_2 - g_1) \\ \partial_t((1 - z)\rho_2) &+ \operatorname{div}((1 - z)\rho_2 u) &= -\lambda(g_2 - g_1) \\ \partial_t(\rho u) &+ \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P) &= 0 \\ \partial_t(\rho(\varepsilon + |u|^2/2)) &+ \operatorname{div}((\rho(\varepsilon + |u|^2/2) + P) u) &= 0 \\ \partial_t z &+ u \cdot \operatorname{grad} z &= k(P_2 - P_1) \end{cases}$$

#### $\kappa = \lambda = +\infty$

trouver  $\rho_{\alpha}^* \ge 0$  et  $z^* \in ]0, 1[$ 

$$\begin{cases} T_1 = T_2 & (\text{fermeture isotherme}) \\ P_1(\rho_1, T_1) = P_2(\rho_2, T_2) & (k \to +\infty) & (\text{éq. mécanique}) \\ g_1(\rho_1, T_1) = g_2(\rho_2, T_2) & (\lambda \to +\infty) & (\text{éq. thermodynamique}) \end{cases}$$
  
sous la contrainte 
$$\begin{cases} \rho \varepsilon = z^* \rho_1^* \varepsilon_1 + (1 - z^*) \rho_2^* \varepsilon_2 \\ \rho = z^* \rho_1^* + (1 - z^*) \rho_2^* \end{cases}$$

## Schéma de décomposition

#### ÉTAPE CONVECTIVE :

on résout numériquement le système homogène

$$\mathbf{V}_{i}^{n} \quad \frac{\text{Schéma quasi-conservatif}}{\text{à 5 équations}} \quad \widehat{\mathbf{V}}_{i}^{\prime}$$

#### <sup>(2)</sup> ÉTAPE DE RELAXATION : on projette cette solution $\widehat{\mathbf{V}}_i^n$ sur la variété MTT-équilibre *i.e.* on résout le problème de maximisation.

## Schéma de décomposition

#### ÉTAPE CONVECTIVE :

on résout numériquement le système homogène

$$\mathbf{V}_{i}^{n} \quad \frac{\text{Schéma quasi-conservatif}}{\text{à 5 équations}} \quad \widehat{\mathbf{V}}_{i}^{r}$$

#### ÉTAPE DE RELAXATION :

on projette cette solution  $\widehat{\mathbf{V}}_{i}^{n}$  sur la variété MTT-équilibre *i.e.* on résout le problème de maximisation.

## 2 : projection

#### Premièrement on utilise le fait que

$$\begin{cases} \partial_t \rho &= 0\\ \partial_t (\rho u) &= 0\\ \partial_t (\rho e) &= 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{pour definir}} \begin{cases} \rho_i^{n+1} = \rho_i^n,\\ (\rho u)_i^{n+1} = (\widehat{\rho u})_i^n,\\ (\rho e)_i^{n+1} = (\widehat{\rho e})_i^n. \end{cases}$$

 on calcule les densités partielles ρ<sup>\*</sup><sub>α</sub>(ρ, ε) en optimisant l'entropie du mélange qui est équivalent à résoudre

$$\begin{cases} \partial_t(z\rho_1) &= (g_2 - g_1) \\ \partial_t z &= (P_1 - P_2) \end{cases} \text{ pour } t \to +\infty$$

• on utilise les  $(\rho_{\alpha}^*)_i^n$  pour actualiser  $z_i^{n+1}$  :

## 2 : projection

#### Premièrement on utilise le fait que

$$\begin{cases} \partial_t \rho &= 0\\ \partial_t (\rho u) &= 0\\ \partial_t (\rho e) &= 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{pour définir}} \begin{cases} \rho_i^{n+1} = \rho_i^n,\\ (\rho u)_i^{n+1} = (\widehat{\rho u})_i^n,\\ (\rho e)_i^{n+1} = (\widehat{\rho e})_i^n. \end{cases}$$

n 1

 on calcule les densités partielles ρ<sup>\*</sup><sub>α</sub>(ρ, ε) en optimisant l'entropie du mélange qui est équivalent à résoudre

$$\begin{cases} \partial_t(z\rho_1) &= (g_2 - g_1) \\ \partial_t z &= (P_1 - P_2) \end{cases} \text{ pour } t \to +\infty$$

• on utilise les  $(\rho_{\alpha}^*)_i^n$  pour actualiser  $z_i^{n+1}$  :

## 2 : projection

#### Premièrement on utilise le fait que

$$\begin{cases} \partial_t \rho &= 0\\ \partial_t (\rho u) &= 0\\ \partial_t (\rho e) &= 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{pour définir}} \begin{cases} \rho_i^{n+1} = \rho_i^n,\\ (\rho u)_i^{n+1} = (\widehat{\rho u})_i^n,\\ (\rho e)_i^{n+1} = (\widehat{\rho e})_i^n. \end{cases}$$

n 1

 on calcule les densités partielles ρ<sup>\*</sup><sub>α</sub>(ρ, ε) en optimisant l'entropie du mélange qui est équivalent à résoudre

$$\begin{cases} \partial_t(z\rho_1) &= (g_2 - g_1) \\ \partial_t z &= (P_1 - P_2) \end{cases} \text{ pour } t \to +\infty$$

• on utilise les  $(\rho_{\alpha}^*)_i^n$  pour actualiser  $z_i^{n+1}$  :

## 2 : étape de projection

$$(\rho_1^*)_i^n \le (\rho_2^*)_i^n \quad \Rightarrow \quad z_i^{n+1} = \begin{cases} 1 & \text{si } \rho_1^{n+1} < (\rho_1^*)_i^n, \\ \frac{\rho_i^{n+1} - (\rho_2^*)_i^n}{(\rho_1^*)_i^n - (\rho_2^*)_i^n} & \text{si } (\rho_1^*)_i^n < \rho_i^{n+1} < (\rho_2^*)_i^n, \\ 0 & \text{si } (\rho_2^*)_i^n < \rho_i^{n+1}. \end{cases}$$

$$(\rho_1^*)_i^n > (\rho_2^*)_i^n \quad \Rightarrow \quad z_i^{n+1} = \begin{cases} 0 & \text{si } \rho_i^{n+1} < (\rho_2^*)_i^n, \\ \frac{\rho_i^{n+1}(\rho_2^*)_i^n}{(\rho_1^*)_i^n - (\rho_2^*)_i^n} & \text{si } (\rho_2^*)_i^n < \rho_i^{n+1} < (\rho_1^*)_i^n, \\ 1 & \text{si } (\rho_1^*)_i^n < \rho_i^{n+1}. \end{cases}$$

## Étape de projection

Premièrement on utilise le fait que

$$\begin{cases} \partial_t \rho &= 0\\ \partial_t (\rho u) &= 0\\ \partial_t (\rho e) &= 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{pour definir}} \begin{cases} \rho_i^{n+1} = \rho_i^n,\\ (\rho u)_i^{n+1} = (\widehat{\rho u})_i^n,\\ (\rho e)_i^{n+1} = (\widehat{\rho e})_i^n. \end{cases}$$

• on calcule les densités partielles  $\rho_{\alpha}^{*}(\rho,\varepsilon)$  en optimisant l'entropie du mélange.

• on utilise les  $(\rho_{\alpha}^*)_i^n$  pour actualiser  $z_i^{n+1}$ .

Si on trouve l'unique couple ( $\rho_1^*, \rho_2^*$ ) solution du problème d'optimisation, on aura déterminé entièrement la variété MTT-equilibre.

## Étape de projection

Premièrement on utilise le fait que

$$\begin{cases} \partial_t \rho = 0 \\ \partial_t (\rho u) = 0 \\ \partial_t (\rho e) = 0 \end{cases} \xrightarrow{\text{pour définir}} \begin{cases} \rho_i^{n+1} = \rho_i^n, \\ (\rho u)_i^{n+1} = (\widehat{\rho u})_i^n, \\ (\rho e)_i^{n+1} = (\widehat{\rho e})_i^n. \end{cases}$$

- on calcule les densités partielles  $\rho_{\alpha}^{*}(\rho, \varepsilon)$  en optimisant l'entropie du mélange.
- on utilise les  $(\rho_{\alpha}^*)_i^n$  pour actualiser  $z_i^{n+1}$ .

Si on trouve l'unique couple ( $\rho_1^*, \rho_2^*$ ) solution du problème d'optimisation, on aura déterminé entièrement la variété MTT-equilibre.

## Lois d'états :

$$\begin{split} s_{\alpha} &= c_{v_{\alpha}} \log \Big( \varepsilon_{\alpha} \, (\tau_{\alpha})^{\gamma_{\alpha}-1} \Big) + s_{\alpha}^{0} \\ P_{\alpha} &= (\gamma_{\alpha}-1) \, \frac{\varepsilon_{\alpha}}{\tau_{\alpha}} \quad \text{avec} \quad \varepsilon_{\alpha} = c_{v_{\alpha}} T_{\alpha} \end{split}$$

 $s_{\alpha}^{0}$  : état thermodynamique de référence,

(dans cette exposé on supposera la normalisation  $s_{\alpha}^{0} = 0$ ).

## Lois d'états :

$$\begin{split} s_{\alpha} &= c_{v_{\alpha}} \log \Big( \varepsilon_{\alpha} \, (\tau_{\alpha})^{\gamma_{\alpha}-1} \Big) + s_{\alpha}^{0} \\ P_{\alpha} &= (\gamma_{\alpha}-1) \, \frac{\varepsilon_{\alpha}}{\tau_{\alpha}} \quad \text{avec} \quad \varepsilon_{\alpha} = c_{v_{\alpha}} T_{\alpha} \end{split}$$

 $s_{\alpha}^{0}$  : état thermodynamique de référence,

(dans cette exposé on supposera la normalisation  $s_{\alpha}^{0} = 0$ ).

## Lois d'états :

$$\begin{split} s_{\alpha} &= c_{v_{\alpha}} \log \Big( \varepsilon_{\alpha} \, (\tau_{\alpha})^{\gamma_{\alpha}-1} \Big) + s_{\alpha}^{0} \\ P_{\alpha} &= (\gamma_{\alpha}-1) \, \frac{\varepsilon_{\alpha}}{\tau_{\alpha}} \quad \text{avec} \quad \varepsilon_{\alpha} = c_{v_{\alpha}} T_{\alpha} \end{split}$$

 $s_{\alpha}^{0}$ : état thermodynamique de référence,

(dans cette exposé on supposera la normalisation  $s_{\alpha}^{0} = 0$ ).

#### On a donc à résoudre le système

$$\begin{cases} T_{1} = T_{2} \\ (\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}}\tau_{2} = (\gamma_{2} - 1)c_{v_{2}}\tau_{1} \\ c_{v_{1}}\left[\log\left(\varepsilon_{1} \tau_{1}^{\gamma_{1} - 1}\right) - \gamma_{1}\right] = c_{v_{2}}\left[\log\left(\varepsilon_{2} \tau_{2}^{\gamma_{2} - 1}\right) - \gamma_{2}\right] \end{cases}$$

avec les contraintes

$$\begin{cases} \varepsilon = y\varepsilon_1 + (1 - y)\varepsilon_2 \\ \tau = y\tau_1 + (1 - y)\tau_2 \end{cases}$$

Analyser séparément les 4 cas suivants :

Cas 1  $c_{v_1} = c_{v_2}$  et  $\gamma_1 \neq \gamma_2$ ; Cas 2  $c_{v_1} \neq c_{v_2}$  et  $c_{v_1}(\gamma_1 - 1) = c_{v_2}(\gamma_2 - 1)$ Cas 3  $c_{v_1} \neq c_{v_2}$  et  $c_{p_1} = c_{p_2}$ Cas 4  $c_{v_1} \neq c_{v_2}$  et  $c_{v_1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v_2}(\gamma_2 - 1)$ ,  $c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2$  Analyser séparément les 4 cas suivants :

$$\begin{array}{l} \text{Cas 1} \quad c_{v_1} = c_{v_2} \text{ et } \gamma_1 \neq \gamma_2 \text{ ;} \\ \text{Cas 2} \quad c_{v_1} \neq c_{v_2} \text{ et } c_{v_1}(\gamma_1 - 1) = c_{v_2}(\gamma_2 - 1) \\ \text{Cas 3} \quad c_{v_1} \neq c_{v_2} \text{ et } c_{p_1} = c_{p_2} \\ \text{Cas 4} \quad c_{v_1} \neq c_{v_2} \text{ et } c_{v_1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v_2}(\gamma_2 - 1), \ c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2 \end{array}$$

Analyser séparément les 4 cas suivants :

Cas 1  $c_{v_1} = c_{v_2}$  et  $\gamma_1 \neq \gamma_2$ ; Cas 2  $c_{v_1} \neq c_{v_2}$  et  $c_{v_1}(\gamma_1 - 1) = c_{v_2}(\gamma_2 - 1)$ Cas 3  $c_{v_1} \neq c_{v_2}$  et  $c_{p_1} = c_{p_2}$ Cas 4  $c_{v_1} \neq c_{v_2}$  et  $c_{v_1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v_2}(\gamma_2 - 1)$ ,  $c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2$ 

Cas 1 : 
$$c_{v_1} = c_{v_2}$$

$$\begin{cases} \rho_1^* = \exp(-1) \left( \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_1 - 1} \right)^{\frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2 - \gamma_1}} \\ \rho_2^* = \exp(-1) \left( \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_1 - 1} \right)^{\frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_2 - \gamma_1}} \end{cases}$$

Courbe de saturation pour le mélange liquide-vapeur :

$$P = \begin{cases} (\gamma_1 - 1)\rho_1\varepsilon_1, & \text{pour } \rho < \rho_1^* \\ \Gamma^*\varepsilon, & \text{pour } \rho_1^* \le \rho \le \rho_2^* \\ (\gamma_2 - 1)\rho_2\varepsilon_2, & \text{pour } \rho > \rho_2^* \end{cases}$$

ОÙ

$$\Gamma^* := \exp(-1) \left( \frac{(\gamma_2 - 1)^{(\gamma_2 - 1)}}{(\gamma_1 - 1)^{(\gamma_1 - 1)}} \right)^{\frac{1}{(\gamma_2 - 1) - (\gamma_1 - 1)}}$$

Remarque :  $P \in C^0$ , mais  $\notin C^1$ .

Cas 1 : 
$$c_{v_1} = c_{v_2}$$

$$\left( \begin{array}{c} \rho_1^* = \exp(-1) \left( \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_1 - 1} \right)^{\frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2 - \gamma_1}} \\ \rho_2^* = \exp(-1) \left( \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_1 - 1} \right)^{\frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_2 - \gamma_1}} \end{array} \right)^{\frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_2 - \gamma_1}}$$

Courbe de saturation pour le mélange liquide-vapeur :

$$P = \begin{cases} (\gamma_1 - 1)\rho_1\varepsilon_1, & \text{pour } \rho < \rho_1^* \\ \Gamma^*\varepsilon, & \text{pour } \rho_1^* \le \rho \le \rho_2^* \\ (\gamma_2 - 1)\rho_2\varepsilon_2, & \text{pour } \rho > \rho_2^* \end{cases}$$

où

$$\Gamma^* := \exp(-1) \left( \frac{(\gamma_2 - 1)^{(\gamma_2 - 1)}}{(\gamma_1 - 1)^{(\gamma_1 - 1)}} \right)^{\frac{1}{(\gamma_2 - 1) - (\gamma_1 - 1)}}$$

**Remarque** :  $P \in C^0$ , mais  $\notin C^1$ .

Cas 1 : 
$$c_{v_1} = c_{v_2}$$

$$\left( \begin{array}{c} \rho_{1}^{*} = \exp(-1) \left( \frac{\gamma_{2} - 1}{\gamma_{1} - 1} \right)^{\frac{\gamma_{2} - 1}{\gamma_{2} - \gamma_{1}}} \\ \rho_{2}^{*} = \exp(-1) \left( \frac{\gamma_{2} - 1}{\gamma_{1} - 1} \right)^{\frac{\gamma_{1} - 1}{\gamma_{2} - \gamma_{1}}} \end{array} \right)$$

Courbe de saturation pour le mélange liquide-vapeur :

$$P = \begin{cases} (\gamma_1 - 1)\rho_1\varepsilon_1, & \text{pour } \rho < \rho_1^* \\ \Gamma^*\varepsilon, & \text{pour } \rho_1^* \le \rho \le \rho_2^* \\ (\gamma_2 - 1)\rho_2\varepsilon_2, & \text{pour } \rho > \rho_2^* \end{cases}$$

où

$$\Gamma^* := \exp(-1) \left( \frac{(\gamma_2 - 1)^{(\gamma_2 - 1)}}{(\gamma_1 - 1)^{(\gamma_1 - 1)}} \right)^{\frac{1}{(\gamma_2 - 1) - (\gamma_1 - 1)}}$$

Remarque :  $P \in C^0$ , mais  $\notin C^1$ .

# Cas général : $c_{v_1} \neq c_{v_2}$ avec $c_{v_1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v_2}(\gamma_2 - 1)$ et $c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2$

$$\tau_{\alpha}^* = A_{\alpha}(T^*)^B$$

où

$$\begin{aligned} B &= \frac{c_{v_2} - c_{v_1}}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1} - (\gamma_2 - 1)c_{v_2}} \\ A_1 &= \left[ \frac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}} \left( \frac{(\gamma_2 - 1)c_{v_2}}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1}} \right)^{(\gamma_2 - 1)c_{v_2}} \exp(c_{v_1}\gamma_1 - c_{v_2}\gamma_2) \right]^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1} - (\gamma_2 - 1)c_{v_2}}} \\ A_2 &= \left[ \frac{(c_{v_2})^{c_{v_2}}}{(c_{v_1})^{c_{v_1}}} \left( \frac{(\gamma_2 - 1)c_{v_2}}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1}} \right)^{(\gamma_1 - 1)c_{v_1}} \exp(c_{v_1}\gamma_1 - c_{v_2}\gamma_2) \right]^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{v_1} - (\gamma_2 - 1)c_{v_2}}} \end{aligned}$$

et  $T^*(\tau, \varepsilon)$  est la température d'équilibre définie comme la racine de la fonction...

# Cas général : $c_{v_1} \neq c_{v_2}$ avec $c_{v_1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v_2}(\gamma_2 - 1)$ et $c_{v_1}\gamma_1 \neq c_{v_2}\gamma_2$

$$\tau_{\alpha}^* = A_{\alpha}(T^*)^B$$

où

$$\begin{cases}
B = \frac{c_{V_2} - c_{V_1}}{(\gamma_1 - 1)c_{V_1} - (\gamma_2 - 1)c_{V_2}} \\
A_1 = \left[\frac{(c_{V_2})^{c_{V_2}}}{(c_{V_1})^{c_{V_1}}} \left(\frac{(\gamma_2 - 1)c_{V_2}}{(\gamma_1 - 1)c_{V_1}}\right)^{(\gamma_2 - 1)c_{V_2}} \exp(c_{V_1}\gamma_1 - c_{V_2}\gamma_2)\right]^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{V_1} - (\gamma_2 - 1)c_{V_2}}} \\
A_2 = \left[\frac{(c_{V_2})^{c_{V_2}}}{(c_{V_1})^{c_{V_1}}} \left(\frac{(\gamma_2 - 1)c_{V_2}}{(\gamma_1 - 1)c_{V_1}}\right)^{(\gamma_1 - 1)c_{V_1}} \exp(c_{V_1}\gamma_1 - c_{V_2}\gamma_2)\right]^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{V_1} - (\gamma_2 - 1)c_{V_2}}}$$

et  $T^*(\tau, \varepsilon)$  est la température d'équilibre définie comme la racine de la fonction...

$$\begin{array}{rcl} f:(0,+\infty) & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ T & \longmapsto & a_3 T^B + a_2 T^{B-1} + a_1 \end{array}$$

où

$$\begin{cases} a_{1} := \tau \left( c_{v_{2}} - c_{v_{1}} \right), \\ a_{2} := \varepsilon \left[ \frac{(\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}}}{(\gamma_{2} - 1)c_{v_{2}}} - 1 \right] \left[ \frac{(c_{v_{2}})^{c_{v_{2}}}}{(c_{v_{1}})^{c_{v_{1}}}} \left( \frac{(\gamma_{2} - 1)c_{v_{2}}}{(\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}}} \right)^{(\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}}} \exp(c_{v_{1}}\gamma_{1} - c_{v_{2}}\gamma_{2}) \right]^{\frac{1}{(\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}} - (\gamma_{2} - 1)c_{v_{2}}}} \\ a_{3} := c_{v_{1}} \left[ 1 - \frac{(\gamma_{1} - 1)}{(\gamma_{2} - 1)} \right] \left[ \frac{(c_{v_{2}})^{c_{v_{2}}}}{(c_{v_{1}})^{c_{v_{1}}}} \left( \frac{(\gamma_{2} - 1)c_{v_{2}}}{(\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}}} \right)^{(\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}}} \exp(c_{v_{1}}\gamma_{1} - c_{v_{2}}\gamma_{2}) \right]^{\frac{1}{(\gamma_{1} - 1)c_{v_{1}} - (\gamma_{2} - 1)c_{v_{2}}}} \end{cases}$$

## Cas général





## Cas général
















## Equation de la courbe de saturation est :

$$P^{*} = (T^{*})^{\frac{(c_{V_{2}}\gamma_{2}-c_{V_{1}}\gamma_{1})}{(c_{V_{2}}(\gamma_{2}-1)-c_{V_{1}}(\gamma_{1}-1))}} \left[ \frac{\left( (\gamma_{2}-1)^{(\gamma_{2}-1)}c_{V_{2}}^{\gamma_{2}} \right)^{c_{V_{2}}}}{\left( (\gamma_{1}-1)^{(\gamma_{1}-1)}c_{V_{1}}^{\gamma_{1}} \right)^{c_{V_{1}}}} \exp \left( c_{V_{1}}\gamma_{1} - c_{V_{2}}\gamma_{2} \right) \right]^{\frac{1}{(c_{V_{2}}(\gamma_{2}-1)-c_{V_{1}}(\gamma_{1}-1))}}$$



- $T|_{t=0} = 400$  K dans tout le domaine
- $(P, \rho_1, \rho_2)|_{t=0} (T)$  tels qu'il y a équilibre.

• 
$$c_{v}$$
 J·kg<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> Liquide VAPEUR  
 $\gamma$  (=  $c_{p}/c_{v}$ ) 1816.2 1040.14  
2.35 1.43

- $T|_{t=0} = 400$  K dans tout le domaine
- $(P, \rho_1, \rho_2)|_{t=0} (T)$  tels qu'il y a équilibre.

• 
$$c_{v}$$
 J·kg<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> Liquide VAPEUR  
 $\gamma$  (=  $c_{\rho}/c_{v}$ ) 2.35 1.43

- $T|_{t=0} = 400$  K dans tout le domaine
- $(P, \rho_1, \rho_2)|_{t=0} (T)$  tels qu'il y a équilibre.

• 
$$c_{v}$$
 J·kg<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup> Liquide VAPEUR  
 $\gamma$  (=  $c_{\rho}/c_{v}$ ) 2.35 1.43

- $T|_{t=0} = 400$  K dans tout le domaine
- $(P, \rho_1, \rho_2)|_{t=0}(T)$  tels qu'il y a équilibre.

- u = 100 m/s de chaque coté de l'interface
- conditions limites : infinie

- u = 100 m/s de chaque coté de l'interface
- conditions limites : infinie

- *u* = 100 m/s de chaque coté de l'interface
- conditions limites : infinie

- *u* = 100 m/s de chaque coté de l'interface
- conditions limites : infinie

- u = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston
    - $u_{\text{piston}} = -100 \text{ m/s}$

- u = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- o conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston
    - $u_{\text{piston}} = -100 \text{ m/s}$

- *u* = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- o conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston
     u<sub>piston</sub> = -100 m/s



- u = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- o conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston

 $u_{\text{piston}} = -100 \text{ m/s}$ 

- u = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- o conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston
    - $u_{\text{piston}} =$ +200 m/s

- u = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston

 $u_{\text{piston}} =$ +200 m/s

- u = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- o conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston

 $u_{\text{piston}} =$ +200 m/s



- u = 0 m/s de chaque coté de l'interface
- o conditions limites :
  - Droite : Mur
  - Gauche : Piston

 $u_{\rm piston} =$ +200 m/s