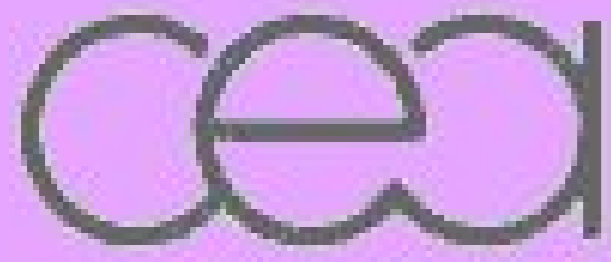


# Modélisation fine du changement de phase pour des

## écoulements compressibles

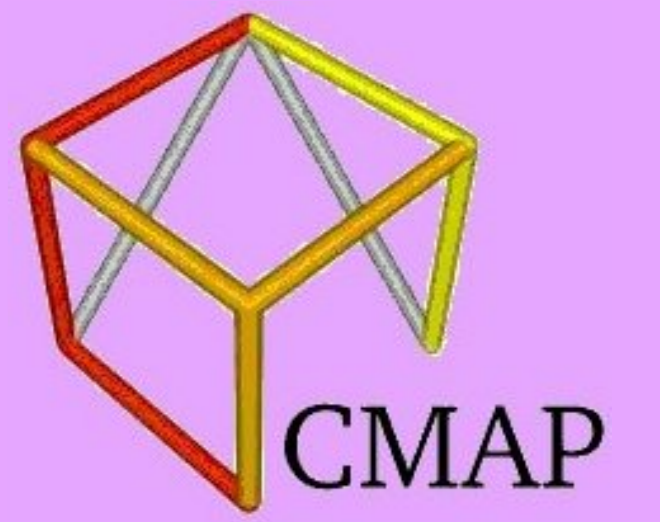


Gloria Faccanoni Samuel Kokh Grégoire Allaire

SFME/LETR, CEA Saclay 91191 Gif-Sur-Yvette Cedex

CMAP, École Polytechnique 91128 Palaiseau Cedex

gloria.faccanoni@cea.fr samuel.kokh@cea.fr allaire@cmap.polytechnique.fr



### Résumé

Ce travail porte sur la modélisation mathématique et la simulation numérique directe du changement de phase liquide-vapeur pour des écoulements de fluides compressibles. Nous utilisons un modèle diphasique à interface diffuse et nous montrons que par un processus de relaxation on peut obtenir une loi d'état complète pour le mélange liquide-vapeur à saturation. Cette étape de relaxation est consistante avec d'une part la description thermodynamique classique des équilibres liquide-vapeur et d'autre part l'optimisation d'une fonctionnelle convexe des espaces des états. Une analyse mathématique des propriétés de cette loi d'état permet de montrer que le système des équations d'Euler fermées par cette loi d'état est strictement hyperbolique. Nous proposons donc un schéma d'approximation numérique consistante avec cette approche.

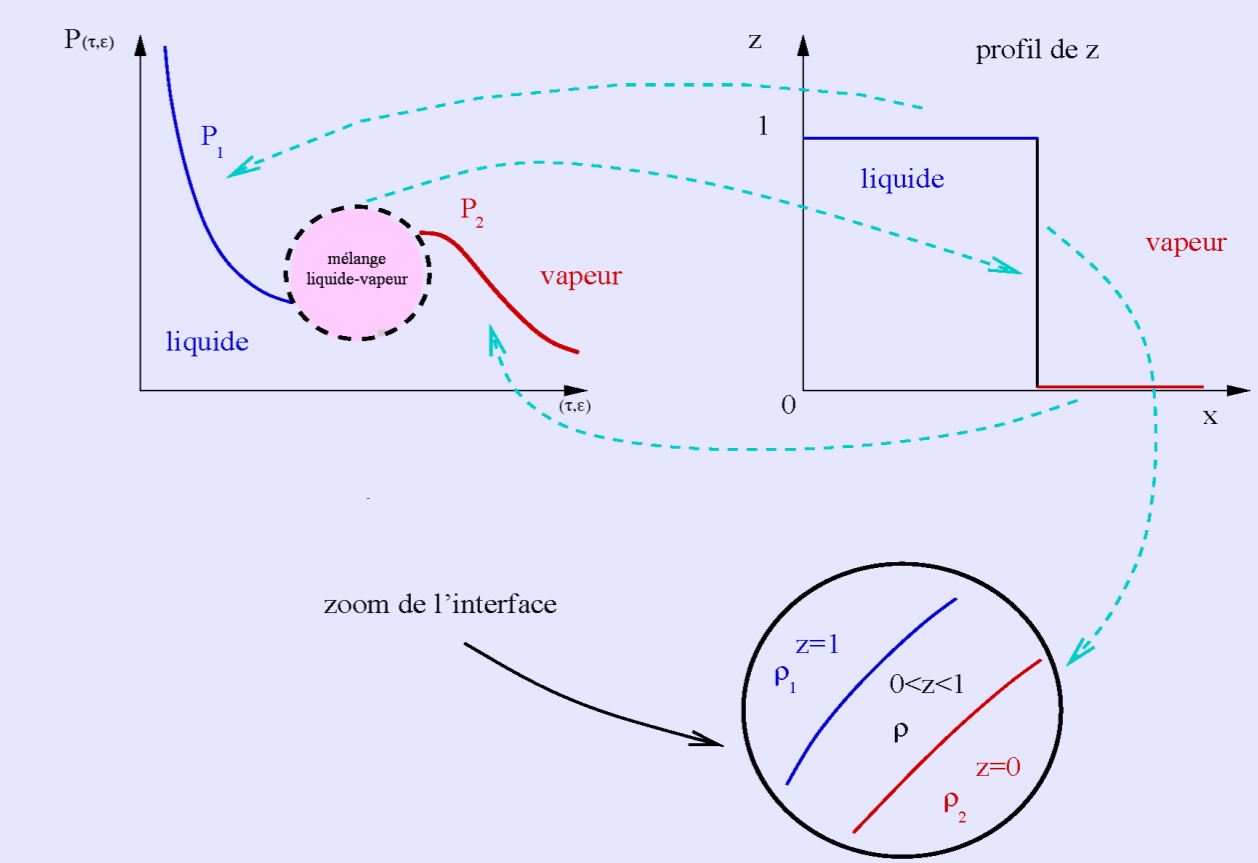
### 1. Position du problème : cadre diphasique avec interface diffuse

Deux lois d'état pour chaque PHASE PURE  $\alpha = 1, 2$  :

- $\tau_\alpha$  volume,  $\varepsilon_\alpha$  énergie interne ;
- $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha$  entropie (avec hessienne déf. strict. nég.) ;
- $T_\alpha := \left( \frac{\partial s_\alpha}{\partial \varepsilon_\alpha} \right)^{-1}$  température,  $P_\alpha := T_\alpha \frac{\partial s_\alpha}{\partial \tau_\alpha}$  pression ;
- $(P_\alpha, T_\alpha) \mapsto g_\alpha := \varepsilon_\alpha + P_\alpha \tau_\alpha - T_\alpha s_\alpha$  enthalpie libre (de Gibbs) ;
- $e_\alpha := \varepsilon_\alpha + \frac{u_\alpha^2}{2}$  énergie totale.

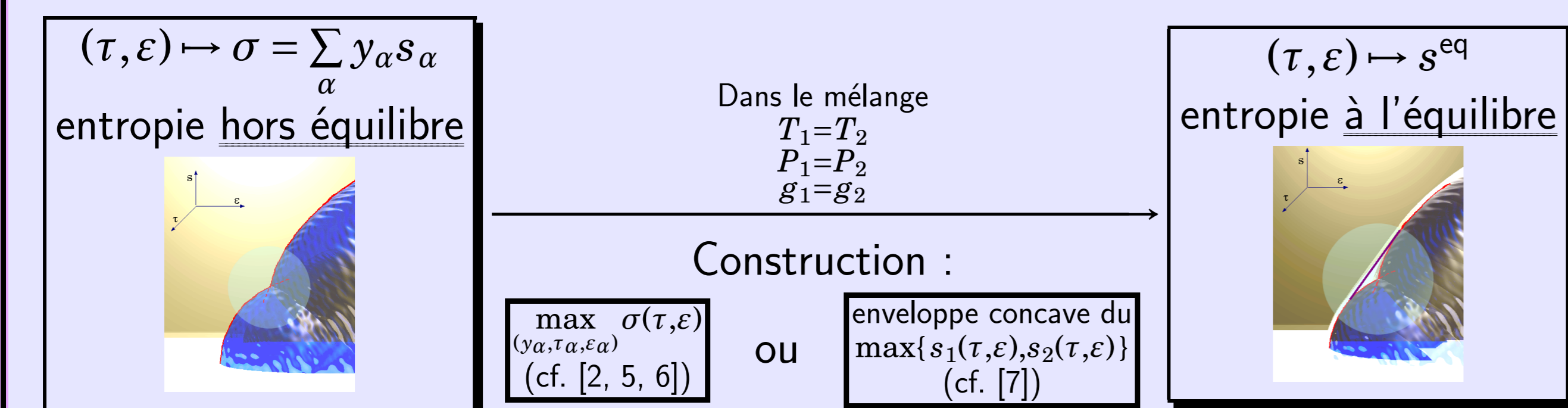
Une loi d'état pour le MÉLANGE HORS ÉQUILIBRE :

- $y_\alpha$  fractions massiques,  $\sum_\alpha y_\alpha = 1$  ;
- $z_\alpha$  fractions volumiques,  $\sum_\alpha z_\alpha = 1$  ;
- $\tau := \sum_\alpha y_\alpha \tau_\alpha$  volume,  $\frac{1}{\tau} = \rho = \sum_\alpha z_\alpha \rho_\alpha$  densité ;
- $\varepsilon := \sum_\alpha y_\alpha \varepsilon_\alpha$  énergie interne ;
- $(\tau, \varepsilon) \mapsto \sigma := \sum_\alpha y_\alpha s_\alpha(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha)$  entropie hors équilibre ;
- $e := \varepsilon + \frac{u^2}{2}$  énergie totale.



$z \in [0, 1]$  donne la position de l'interface  
 $\Gamma(t) := \{(x, t) \text{ tels que } 0 < z(x, t) < 1\}$

### 2. Changement de phase du 1<sup>er</sup> ordre : équilibre thermique, mécanique et chimique



Par conséquent  $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$  a hessienne définie strictement négative dans les phases pures, négative non strictement dans le mélange.

### Exemple : étude complète du cas Gaz Parfait / Gaz Parfait

Soit  $(\tau_\alpha, \varepsilon_\alpha) \mapsto s_\alpha := c_{v\alpha} \ln(\varepsilon_\alpha \tau_\alpha^{\gamma_\alpha - 1})$  avec

$c_{v1}(\gamma_1 - 1) \neq c_{v2}(\gamma_2 - 1)$ ,  $c_{v1} \neq c_{v2}$  et  $c_{v1}\gamma_1 \neq c_{v2}\gamma_2$  (cf. [3, p.228]).

Le calcul de  $s^{\text{eq}}$  est ramené au problème  $f(T) = 0$  où  $f : (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$  s'écrit

$$f(T) := \left\{ c_{v1} \left[ 1 - \frac{(\gamma_1 - 1)}{(\gamma_2 - 1)} \right] \left[ \frac{(c_{v2})^{c_{v2}}}{(c_{v1})^{c_{v1}}} \frac{(\gamma_2 - 1)c_{v2}}{(\gamma_1 - 1)c_{v1}} \exp(c_{v1}\gamma_1 - c_{v2}\gamma_2) \right] T^{(c_{v2} - c_{v1})} \right\}^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{v1} - (\gamma_2 - 1)c_{v2}}} + \left\{ \varepsilon \left[ \frac{(\gamma_1 - 1)c_{v1}}{(\gamma_2 - 1)c_{v2}} - 1 \right] \left[ \frac{(c_{v2})^{c_{v2}}}{(c_{v1})^{c_{v1}}} \frac{(\gamma_2 - 1)c_{v2}}{(\gamma_1 - 1)c_{v1}} \exp(c_{v1}\gamma_1 - c_{v2}\gamma_2) \right] T^{(\gamma_2 c_{v2} - \gamma_1 c_{v1})} \right\}^{\frac{1}{(\gamma_1 - 1)c_{v1} - (\gamma_2 - 1)c_{v2}}} + \left[ \tau (c_{v2} - c_{v1}) \right].$$

### 3. Système hydro-thermo-dynamique à l'équilibre instantané

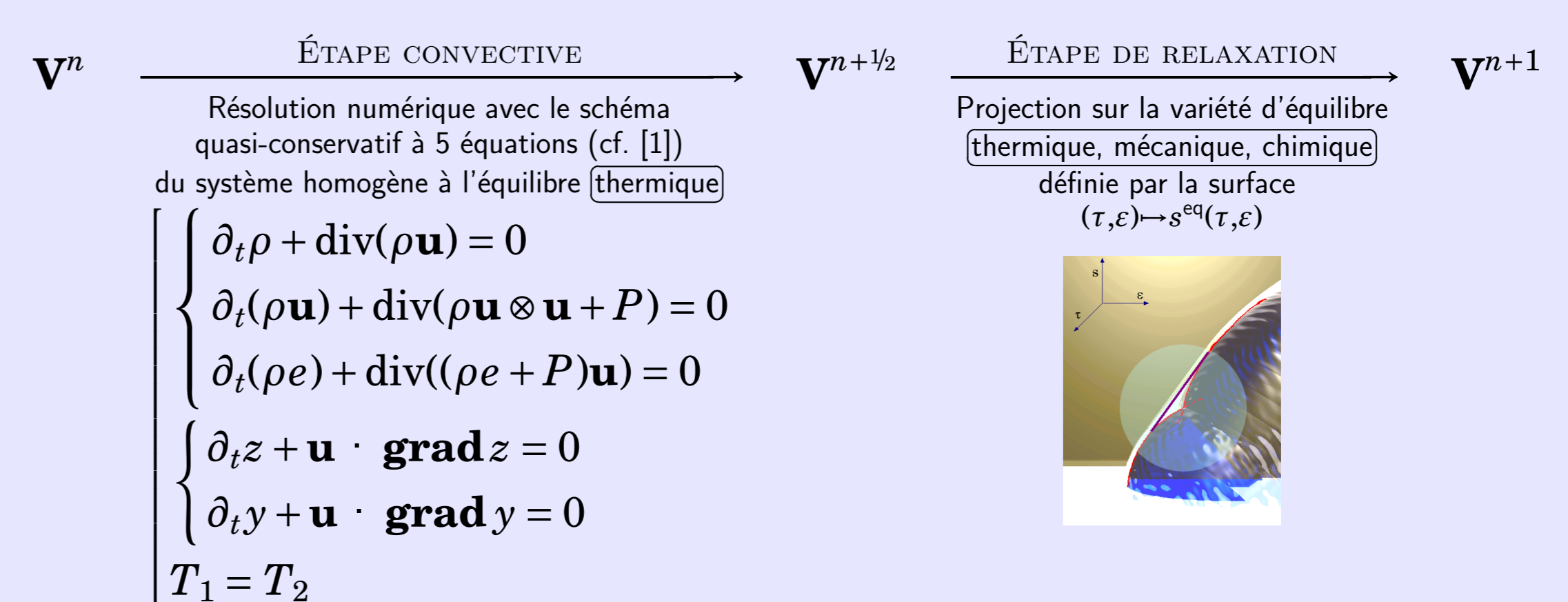
$$\begin{cases} \partial_t \rho + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \text{div}(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P) = 0 \\ \partial_t(\rho e) + \text{div}((\rho e + P)\mathbf{u}) = 0 \end{cases} \quad \text{avec} \quad P(\rho, \varepsilon) = \frac{\partial \tau}{\partial s^{\text{eq}}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau}$$

Nous avons prouvé que

1 le système des équations d'Euler muni de la loi d'état  $(\tau, \varepsilon) \mapsto s^{\text{eq}}$  est **strictement hyperbolique**,

2 la vitesse du son  $(\tau, \varepsilon) \mapsto c := -\tau^2 T \left( P^2 \frac{\partial^2 s^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon^2} - 2P \frac{\partial^2 s^{\text{eq}}}{\partial \varepsilon \partial \tau} + \frac{\partial^2 s^{\text{eq}}}{\partial \tau^2} \right)$  est  $\mathcal{C}^0$  par morceaux.

### 4. Résolution numérique : schéma à pas fractionnaires



### 5. Un exemple monodimensionnel

On suppose qu'il y a 3 bulles de vapeur immergées dans le liquide. Les deux phases sont initialement immobiles. On crée artificiellement une compression en imposant une vitesse fictive sur les mailles à gauche du domaine afin de simuler le mouvement d'un piston. On observe que ce mouvement va générer une onde se déplaçant de la gauche vers la droite. Lorsqu'elle atteint une bulle, elle va perturber l'équilibre thermo-mécanique et les bulles de vapeur vont se liquéfier.

#### Données initiales du problème de Riemann

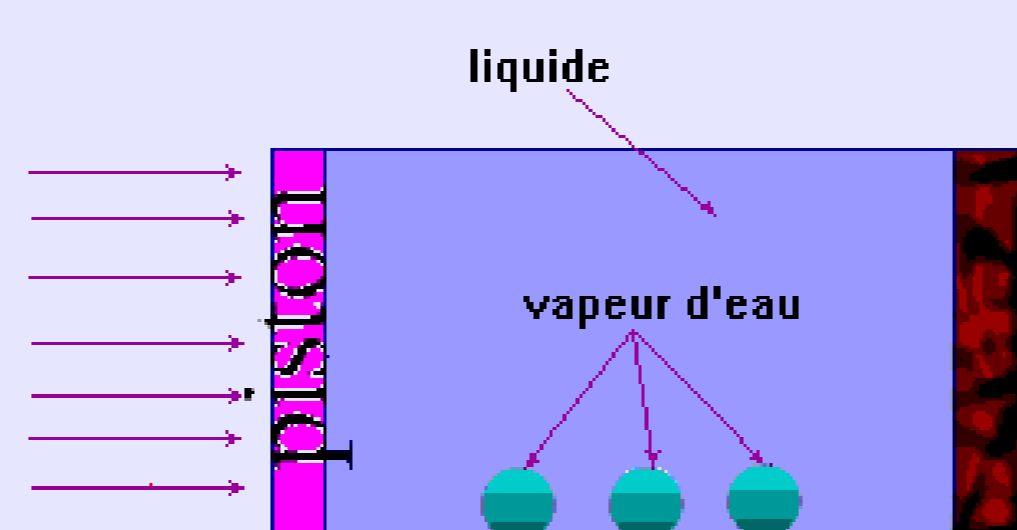
1D : un domaine de 1 m de longueur,  
 caractéristiques des fluides :

|   | LIQUIDE | VAPEUR  |
|---|---------|---------|
| $c_v$ [ $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ] | 1816.2  | 1040.14 |
| $\gamma$ ( $= c_p/c_v$ )                                      | 2.35    | 1.43    |

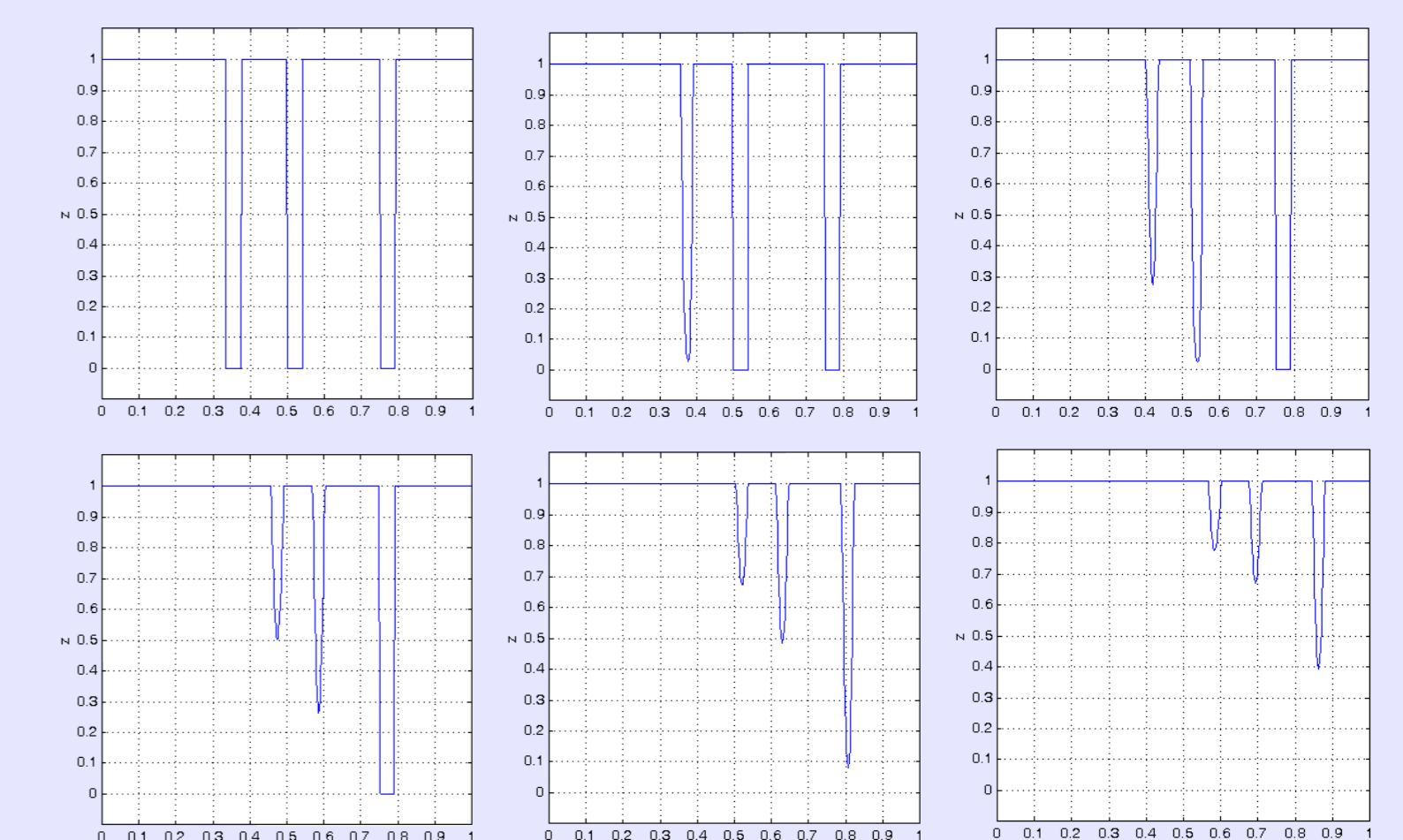
$u|_{t=0} = 0$  m/s de chaque coté de l'interface,  
 $T|_{t=0} = 400$  K dans tout le domaine,  
 $(P, \tau_1, \tau_2)|_{t=0}(T)$  tels qu'il y a ÉQUILIBRE.

#### Géométrie

Droite : mur,  
 Gauche : piston  $u_{\text{piston}} = +200$  m/s.



#### Profil de l'interface



### Références

[1] G. ALLAIRE, S. CLERC et S. KOKH : A five-equation model for the simulation of interfaces between compressible fluids. *J. Comput. Phys.*, 181(2):577–616, 2002.  
 [2] T. BARBERON et P. HELLY : Finite volume simulations of cavitating flows. In *Finite volumes for complex applications, III*, p. 441–448 (electronic). Lab. Anal. Topol. Probab. CNRS, Marseille, 2002.  
 [3] H. B. CALLEN : *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*. Jhon Wiley & sons, second éd., 1985. ISBN 0-471-86256-8.  
 [4] F. CARO : *Modélisation et simulation numérique des transitions de phase liquide-vapeur*. Thèse de doctorat, École Polytechnique, 24 novembre 2004.  
 [5] P. HELLY et N. SEGUIN : Relaxation model of phase transition flows. To appear, 2006.  
 [6] P. HELLY : Quelques exemples de méthodes numériques récentes pour le calcul des écoulements multiphasiques. Mémoire d'habilitation à diriger des recherches, 2005.  
 [7] S. JAOUEN : *Étude mathématique et numérique de stabilité pour des modèles hydrodynamiques avec transition de phase*. Thèse de doctorat, Université Paris 6, 2001.