

Aix Marseille Université
Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels
- UMR CNRS 7343 -

THESE
pour obtenir le grade de
DOCTEUR D'AIX-MARSEILLE UNIVERSITÉ
Discipline : Mécanique et Physique des Fluides
Ecole Doctorale 353 : Sciences pour l'Ingénieur
présentée et soutenue publiquement par

Sarah HANK
le 16 Novembre 2012

**Modélisation et Simulation de la Dispersion de Fluide en Milieu
Fortement Hétérogène**

Directeur de thèse : Eric Daniel - IUSTI - Aix Marseille Université
Co-directeur de thèse : Olivier Le Métayer - IUSTI - Aix Marseille
Université

JURY

Paola Cinnella	Professeur-DynFluid-Universités Arts et Métiers ParisTech
Frédéric Lagoutière	Professeur-Faculté des Sciences d'Orsay-Paris-Sud
Lounes Tadrist	Professeur-IUSTI-Université Aix-Marseille
Olivier Lemétayer	Maître de conférence-IUSTI-Université Aix-Marseille
Emmanuel Lapébie	Ingénieur de recherche CEA/DAM Gramat

Avant-Propos

Je tiens à remercier chacun des membres de l'équipe SMASH. Olivier Le Métayer qui m'a encadrée et supportée pendant ces 3 années pour sa patience et sa disponibilité. Richard Saurel, qui m'a accueillie et formée au sein de son équipe et qui a toujours su me motiver. Il m'a permis de travailler sur des sujets variés, je le remercie pour la confiance qu'il m'a accordée. Je remercie également Eric Daniel pour son aide et ses conseils, Nicolas Favrie et Fabien Petitpas qui ont toujours été disponibles pour m'aider et qui de plus, sont de très bonne compagnie. Je remercie spécialement le professeur Serguei Gavriluk qui m'a donné l'envie de faire ce métier et sans qui, je ne serai probablement pas arrivée jusqu'à l'IUSTI! Sa ténacité, sa rigueur et son humour font qu'il restera pour moi un modèle. Je remercie particulièrement le Grand Jacques Massoni, pour son aide constante et son humour grinçant. Celui-ci a toujours su m'aider aussi bien scientifiquement qu'humainement et grâce à qui, chacun des cafés pris au laboratoire furent un délice.

Je remercie également Paola Cinnella ainsi que Frédéric Lagoutière qui ont accepté de rapporter sur mon manuscrit. Lounès Tadrist pour m'avoir accueillie au sein du laboratoire IUSTI et pour avoir accepté de participer à mon jury de thèse. Je remercie spécialement Emmanuel Lapébie pour son aide, ses conseils, son dynamisme et son humour légendaire. Je tiens à remercier les doctorants et ex-doctorants qui ont partagé mon quotidien et ont supporté mes sauts d'humeurs ainsi que mes nombreux jurons : Julien, Marcos, Grégory Hubert, Grégoire Charrier, Alice, Vincent, Sébastien, Serge, Damien F, et bien entendu l'improbable mais néanmoins adorable Eliam Hérichon. D'autre part, je remercie Pascal Campion pour son aide administrative (indispensable) et sa bonne humeur quotidienne.

Je veux remercier mes parents, ma m^ôman pour son inconditionnel soutien et ses encouragements, mon regretté papa qui m'a donné goût à la compétition. Ma grande soeur Anissa, qui est et restera mon plus grand soutien. Mes petites soeurs Morgane, Laurie ainsi que mon petit frère Diégo sans oublier Sylvie. Ils sont pour moi ce que j'ai de plus chère. Je remercie chacun des membres de ma nombreuse famille, mes oncles, mes tantes ainsi que tout mes cousins et cousines. En particulier, les marseillais qui m'ont accueillie chez eux en septembre 2002 (tata saida, tonton doc, tata béa et ma petite Charlotte). Je remercie évidemment mes beaux parents, Françoise et Maurice qui m'ont accueillie et traitée comme leur propre fille, ma reconnaissance pour eux est infinie!

Je remercie mes amis qui m'ont permis de me détendre et de m'amuser malgré la pression

et le stress qui me caractérise. Ils sont pour moi une bouffée d'air. Sylvain alias *Vernon*, Fabien, René, Caroline (Corse Power!), Eliam et Sam. Je ne saurais oublier le meilleur d'entre nous, Christophe alias *le Champion* qui m'a toujours soutenue, encouragée et poussée à faire d'autres choses, il m'a aidé et m'aide toujours à ne pas me laisser submerger par le travail et le stress (ce qui est un exploit!) pour tout cela, je le remercie sincèrement ainsi que le clan Albertini : Clément, Céline, Guillaume et Doumé!

Enfin, je remercie celui qui partage ma vie, le seul et l'unique Bastien Di Pierro qui m'a supportée tout au long de mes études supérieures (ce qui en soit est une prouesse). Il a toujours été présent, même lorsque je fut insupportable et de mauvaise fois évidente. Son aide précieuse, sa patience et sa tendresse m'ont permis de mener à bien ces travaux.

Table des matières

Nomenclature	7
Introduction Générale	9
I Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène	19
I.1 Les Equations de la Dynamique des Gaz	20
I.1.1 Propriétés Principales	20
I.1.2 Problème de Riemann des Equations d'Euler	25
I.2 Modèle d'Ecoulement en Milieu Hétérogène	28
I.2.1 Intégration de l'Equation de Conservation de la Masse	29
I.2.2 Intégration de l'Equation de Conservation de la Quantité de Mou- vement	32
I.2.3 Intégration de l'Equation de Conservation de l'Energie Totale	34
I.2.4 Récapitulatif du Modèle d'Ecoulement en Milieu Hétérogène	36
I.3 Validations Expérimentales	36
I.4 Prise en Compte de la Topographie	40
I.4.1 Fichiers Initiaux	40
I.4.2 Procédure d'Interpolation	41
I.4.3 Exemples	43
I.4.4 Maillage et Domaine de Calcul	45
II Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion	47
II.1 Les Equations d'Euler Multi-Espèces	48
II.1.1 Hypothèses	48
II.1.2 Variables de Mélange	48
II.1.3 Equations d'évolution des fractions massiques	49
II.1.4 Equation d'Evolution de l'Entropie de Mélange	50
II.1.5 Problème de Riemann pour les Equations d'Euler Multi-Espèces	51
II.1.6 Intégration sur le Volume Hétérogène	51
II.1.7 Limitations du Modèle Multi-espèces	52
II.2 Un Schéma d'Ordre Elevé pour le Transport des Concentrations : Schéma ADER	54
II.2.1 Problème de Riemann Généralisé	54
II.2.2 Reconstruction	56

II.2.3	Algorithme de Résolution	58
II.3	Utilisation du Schéma ADER pour les Concentrations des Espèces	60
II.4	Effets Diffusifs	62
II.4.1	Introduction des Termes de Diffusion Moléculaire	62
II.4.2	Equation d'Evolution de l'Entropie Spécifique de Mélange	63
II.4.3	Intégration des Termes Diffusifs sur le Volume de Contrôle Hétérogène	65
II.4.4	Calcul du Coefficient d'Echange aux Parois : h_m	69
II.4.5	Cas Tests Unidimensionnels	70
II.5	Modélisation des Echanges Thermiques	72
II.5.1	Intégration sur le Volume de Contrôle	72
II.5.2	Calcul du Coefficient d'Echange à la Paroi	74
II.5.3	Cas Test Unidimensionnel	75
III	Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques	77
III.1	Limites "d'Entrée"	78
III.1.1	Limite d'Entrée Réservoir	78
III.1.2	Limite d'entrée de type injection	82
III.2	Limites de Sortie	83
III.2.1	Limite de Sortie Subsonique	84
III.2.2	Sortie Supersonique : "absorption généralisée"	85
III.3	Limite de type "Vitesse Imposée"	86
III.4	Limite de Type "Paroi"	87
III.5	Validation des Conditions aux Limites	88
III.6	Conditions d'Ecoulements Atmosphériques	92
III.6.1	Prise en compte de la gravité	92
III.6.2	Généralités sur la Couche Limite Atmosphérique	93
III.6.3	Profil de Vitesse du Vent	96
III.6.4	Couche d'Inversion Thermique	98
IV	Modèles d'Ecoulements Diphasiques	101
IV.1	Hypothèses des Milieux Dilués	102
IV.2	Modèle sans Pression	103
IV.2.1	Equations pour la Phase Porteuse	103
IV.2.2	Equations pour la Phase Dispersée	103
IV.2.3	Termes d'interactions : Force de Traînée Visqueuse et Echange Thermique	105
IV.2.4	Récapitulatif et Propriétés du Modèle Diphasique Dilué	107
IV.3	Modèle Turbulent	110
IV.3.1	Obtention du Modèle	110
IV.3.2	Propriétés du Modèle et Problème de Riemann pour la phase dispersée	114
IV.3.3	Propriétés du Modèle et Problème de Riemann pour la Phase Gazeuse	116
IV.3.4	Termes Dissipatifs et Création d'Entropie	117
IV.3.5	Récapitulatif du Modèle Diphasique Turbulent	119
IV.4	Validations et Comparaison avec le Modèle sans Pression	120

TABLE DES MATIÈRES

IV.4.1 Configuration Unidimensionnelle	120
IV.4.2 Configurations Bidimensionnelles	125
V Résultats Numériques	131
V.1 Simulation d’ondes de souffle “Blast wave”	131
V.1.1 Evolution d’une onde de choc dans un canyon urbain	131
V.1.2 Interaction d’une Onde de Choc avec un Obstacle Parallélépipédique	134
V.2 Transport et Diffusion d’Espèces Chimiques	138
V.2.1 De la Bonne Utilisation du Schéma ADER	138
V.2.2 Transport Multidimensionnel d’espèces	139
V.2.3 Eclatement d’un Réservoir en Présence d’Obstacles	142
V.3 Simulation d’explosion en milieu urbain en présence de particules solides .	145
V.3.1 Evolution au Temps Court	146
V.3.2 Evolution au Temps plus long	148
V.4 Dispersion à Très Grande Echelle	150
VI Sur la Formation de Jets de Particules	155
VI.1 Difficultés des Simulations Multi-Dimensionnelles	156
VI.2 Stabilité d’un cylindre creux soumis à un gradient de pression	159
VI.2.1 Solution de référence	159
VI.2.2 Linéarisation des Equations	161
VI.2.3 Équations d’Amplitude	163
VI.2.4 Synthèse du Modèle Intégro-Différentiel	167
VI.2.5 Choix des Données Initiales	168
VI.2.6 Notion de stabilité de l’interface	170
VI.2.7 Sélection du Nombre d’Onde	172
VI.2.8 Résultats Numériques	174
VI.3 Etude en Configuration Sphérique	177
VI.3.1 Synthèse du Modèle Intégro Différentiel et Conditions Initiales . . .	178
VI.3.2 Résultats Numériques	179
VI.4 Conclusion	182
Conclusion et Perspectives	183
A Production d’Entropie due aux Termes de Diffusion Massique	191
B Stabilité d’une Couche de Fluide dans le Cas Sphérique.	195
B.1 Ecoulement de base : Cas d’une sphère creuse	195
B.2 Linéarisation	197
B.3 Solution de l’équation de Laplace	199
B.4 Equations d’amplitude	200
B.5 Conditions initiales	202

TABLE DES MATIÈRES

Nomenclature

Quantités	Symboles	Unités
Capacité calorifique à volume constant	C_v	$J/kg/K$
Capacité calorifique à pression constante	C_p	$J/kg/K$
Energie interne massique	e	J/kg
Enthalpie massique	$h = e + Pv$	J/kg
Entropie massique	s	$J/kg/K$
Enthalpie libre (énergie libre de Gibbs)	$g = h - Ts$	J/kg
Masse volumique	ρ	kg/m^3
Pression	P	Pa
Température	T	K
Fraction massique	Y	
Vitesse du son	c	m/s
Vitesse matérielle (direction x)	u	m/s
Vitesse matérielle (direction y)	v	m/s
Vitesse matérielle (direction z)	w	m/s
Viscosité dynamique	μ	$kg/m/s$
Viscosité cinématique	ν	m^2/s

Vecteurs

Quantités	Symboles
Champ de vitesse	$\mathbf{u}$
Vecteur des variables conservatives	$\mathbf{U}_c$
Vecteur des variables primitives	$\mathbf{W}$
Vecteur normal sortant	$\mathbf{n}$
Vecteur unitaire (direction x)	$\mathbf{i}$
Vecteur unitaire (direction y)	$\mathbf{j}$
Vecteur unitaire (direction z)	$\mathbf{l}$

Indices

Quantités	Symboles
Relatif aux particule	p
Relatif aux surfaces fluides	F
Relatif aux surfaces solides	S
Relatif à l'espèce k	k

Exposants

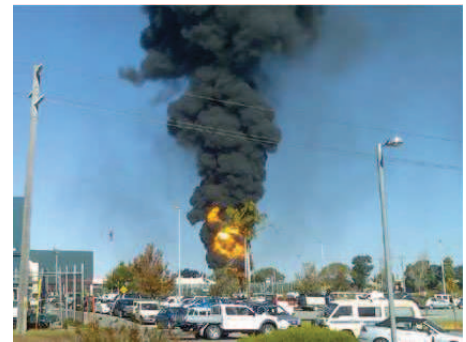
Quantités	Symboles
Relatif aux surfaces internes	0
Etat solution du problème de Riemann	*

Introduction Générale

Contexte

Ce travail porte sur la réalisation d'un outil de simulation capable de traiter la physique de la dispersion d'une source d'émission en présence d'obstacles simultanément en champs proche et lointain. On peut rencontrer ce type de phénomènes dans plusieurs scénarii d'accidents :

- Attentats ou explosions accidentelles survenant en zone peuplée.
- Fuites de produits toxiques gazeux ou liquides contenus initialement dans des enceintes ayant subi des dommages importants.
- Éclatements de réservoirs ou containers remplis de gaz liquéfié sous pression en terrain vallonné parsemé d'obstacles.



Afin de prédire les risques induits, le développement d'outils de simulation est indispensable. La difficulté essentielle provient du caractère fortement hétérogène de l'écoulement, notamment de la présence de nombreux obstacles de différentes natures, ainsi que d'un vent d'orientation et d'intensité variables. L'objectif est donc l'élaboration d'un outil de simulation basé sur un modèle de milieu hétérogène, nous permettant ainsi de traiter des phénomènes dont les durées et les distances associées peuvent être très grandes.

Il s'agit également d'élaborer un code de simulation tridimensionnel prenant en compte la topographie du milieu et permettant le suivi des champs de concentration. La résolution du modèle étant basée sur le problème de Riemann des équations de la dynamique des



Figure 1 – A gauche, accident de la route impliquant un camion citerne transportant des gaz liquéfiés. A droite, explosion de l’usine AZF à Toulouse en 2001.

gaz, nous serons amenés à constituer une bibliothèque de solveurs de Riemann pour les différentes configurations d’écoulement. Il en sera de même concernant le traitement des conditions aux limites. Des phénomènes supplémentaires tels que la gravité, les échanges avec le sol et les différents obstacles ou encore la diffusion turbulente du nuage de polluant, devront être pris en compte par le modèle. Les écoulements associés aux phénomènes étudiés sont susceptibles de contenir des nuages de particules (ou gouttelettes), ce qui implique l’implémentation d’un modèle d’écoulement multiphasique.



Figure 2 – Explosion d’une charge hémisphérique dans un lit de particules.

D’autres aspects de la dispersion liés à la présence de particules aux abords d’une explosion seront discutés. Lorsqu’une charge explose dans un lit de particules, la “surface libre” se déstabilise et il se forme ce que l’on appelle des “Fingers de particules” (Figure 2). Ceux-ci ont un impact direct sur l’évolution du nuage de particules formé, dont la croissance est pilotée par l’instabilité (surtout dans les premiers instants). Le mécanisme conduisant à la déstabilisation de l’écoulement est à ce jour inconnu. C’est pourquoi des travaux ont

été réalisés sur ces aspects de la dispersion, afin de progresser dans la compréhension de cette instabilité.

Modélisation de la Dispersion

La dispersion est un mécanisme regroupant les phénomènes d'advection et de diffusion moléculaire. Il existe différentes techniques pour la modélisation de la dispersion que nous allons résumer ci-après. Deux familles de modèles existent. Premièrement, on peut citer les modèles résolvant les équations de la dynamique des gaz (Navier-Stokes ou Euler), auxquelles on ajoutent des équations pour le transport de polluants. C'est le cas des modèles de type **DNS**, **LES** ou encore **RANS**. L'autre famille implique des modèles décrivant uniquement l'écoulement du polluant, en faisant l'hypothèse que celui-ci n'a aucune influence sur l'écoulement global, les champs météorologiques étant alors pré-calculés par un autre code. C'est le cas des modèles gaussiens ou des modèles eulériens de chimie-transport.

Modèles Gaussiens

Les modèles les plus simples associés aux phénomènes de dispersion sont les modèles gaussiens largement documentés, notamment dans [4,30,40]. La méthodologie associée à ces modèles est décrite ci-après. Soit $C(x,y,z,t)$ un scalaire passif émis par une source ponctuelle dans un champ de vent $\mathbf{u}$ constant tel que,

$$\mathbf{u} = (u, 0, 0)^t$$

Considérons un modèle eulérien pour ce scalaire passif, l'équation d'advection-diffusion s'écrit,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla C = \nabla \cdot (\underline{\underline{K}} \nabla C) \quad (1)$$

où $\underline{\underline{K}}$ est une matrice de diffusion turbulente, celle-ci est supposée diagonale. Dans le cas d'un champ de vent unidirectionnel constant on obtient,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (2)$$

Pour une source ponctuelle et instantanée émise à l'origine, on définit la condition initiale suivante pour la concentration C

$$C(x, y, z, 0) = C_0 \delta(x, y, z),$$

où $\delta(x, y, z)$ correspond à la distribution de Dirac à l'origine. La solution de (2) satisfaisant la condition initiale précédente correspond à une distribution gaussienne :

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} e^{\left\{ -\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right\}}$$

Les écarts types de dispersion sont reliés aux coefficients de diffusion turbulente par les relations suivantes,

$$\sigma_x^2 = 2K_x t, \quad \sigma_y^2 = 2K_y t \quad \text{et} \quad \sigma_z^2 = 2K_z t.$$

L'une des difficultés associées à ce type de modèle provient de la paramétrisation des écarts types, qui nécessite l'utilisation de relations empiriques. Celles-ci ont fait l'objet de nombreux travaux, par exemple [11], [21] ou [52]. La répartition du polluant suit donc une loi gaussienne dont l'étalement dépend du temps écoulé depuis l'émission de la source. Cette description correspond à la base des modèles gaussiens. De nombreuses situations sont alors envisageables suivant la source et le type d'écoulements. Ces modèles sont valides sur plusieurs kilomètres autour des sources.

Modèles Gaussiens Rectilignes

On parlera de “modèle rectiligne” dans le cas d'un écoulement stationnaire mettant en jeu une source continue en temps, de débit Q , dans un champ de vent unidirectionnel avec une hauteur d'émission effective égale à H (voir Figure 3).

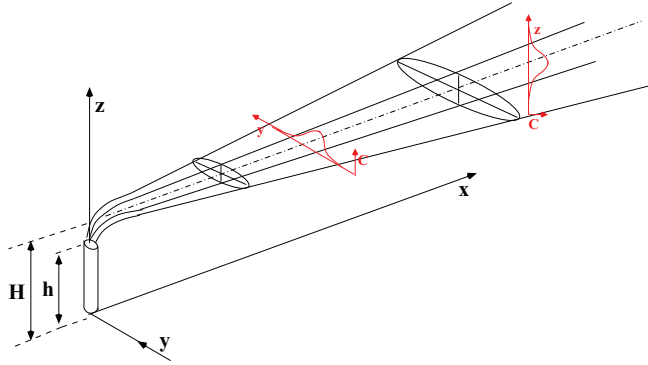


Figure 3 – Distributions gaussiennes à l'intérieur d'un panache, dans les deux directions (y, z) dans le cas d'un vent prépondérant dans la direction x .

Dans ce cas, la concentration de polluant est donnée par l'expression (3).

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)u\sigma_y\sigma_z} e^{\left\{-\frac{(y)^2}{2\sigma_y^2}\right\}} \left[e^{\left\{-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right\}} + e^{\left\{-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right\}} \right] \quad (3)$$

Les modèles gaussiens rectilignes restent très limités dans leurs applications, notamment par la difficulté de placer des obstacles dans l'écoulement. D'autre part, le champ de vent doit être uniforme et de direction constante. Ils sont contraints par les hypothèses de stationnarité de l'écoulement mais également de continuité de la source. Il existe néanmoins des méthodes de paramétrisation permettant la prise en compte des reliefs.

Modèles Gaussiens “à bouffées”

Les modèles gaussiens “à bouffées” ont été développés afin de tenir compte de la variation temporelle des émissions de la source ainsi que des variations des champs météorologiques. Un nombre N de bouffées ponctuelles sont émises successivement, chacune pendant un intervalle de temps déterminé (Δt^i). Celles-ci évoluent de manière indépendante selon un modèle gaussien. On somme les concentrations de chacune des bouffées pour obtenir la concentration en un point.

$$C(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^N \frac{C_{0i} \Delta t^i}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} e^{\left\{ -\frac{(y-y_c^i(t))^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(x-x_c^i(t))^2}{2\sigma_x^2} \right\}} \left[e^{\left\{ -\frac{(z-z_c^i(t)-H)^2}{2\sigma_z^2} \right\}} + e^{\left\{ -\frac{(z-z_c^i(t)+H)^2}{2\sigma_z^2} \right\}} \right],$$

où $x_c^i(t)$, $y_c^i(t)$ et $z_c^i(t)$ représentent les coordonnées du centre de la bouffée i à l’instant t (voir Figure 4).

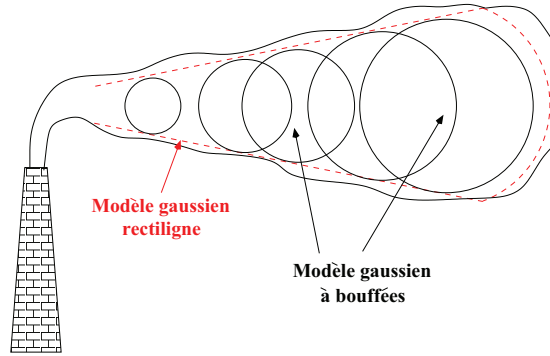


Figure 4 – Modèle “gaussien rectiligne” et modèle gaussien “à bouffées ” discrétisant le panache comme une succession de bouffées émises à intervalles réguliers.

Ces modèles sont très utilisés car ils requièrent peu de puissance de calcul. Cependant, ils reposent sur une représentation simplifiée des concentrations ainsi que des écoulements alentours. De plus, les coefficients de dispersion doivent être calibrés grâce à des expériences. Un grand nombre de corrélations existent et peuvent conduire à des résultats très différents. Enfin, la prise en compte des obstacles s’avère quasiment impossible (en dehors des limites supérieures et inférieures).

Modèles Intégraux

Dans le cas où le polluant rejeté est susceptible de modifier l’écoulement, l’emploi des modèles gaussiens est inadapté car ces derniers ne tiennent pas compte des effets physiques tels que la flottabilité, la gravité, ou encore les effets de turbulence dynamique dus à la vitesse d’émission des polluants qui peut être élevée. Les modèles intégraux permettent de modéliser ces phénomènes. Ils se basent sur les équations simplifiées de la dynamique des gaz, c’est à dire que l’on utilise des paramètres représentant les mécanismes non modélisés.

La simplification des équations dépend du phénomène étudié.

Ces modèles impliquent des terrains sans trop de reliefs, voire plats. L'utilisation d'équations simplifiées ne permet pas la prise en compte d'obstacles. En effet, les caractéristiques du relief sont traitées par une unique hauteur de rugosité et le champ de vent est uniforme. D'autre part, à l'instar des modèles gaussiens, les modèles intégraux ne considèrent pas en général la variation verticale du vent ou des autres variables de l'écoulement. Au delà d'une certaine distance, les résultats issus de ces modèles ne sont plus valables, car des phénomènes supplémentaires de turbulence ou de diffusion entrent alors en jeu.

Ces modèles nécessitent l'utilisation de paramètres qui doivent également être évalués au moyen d'expériences. La qualité de ce type de formulation est conditionnée par le choix de ces paramètres. Des précisions sur ce type de modèles peuvent être obtenues dans [82].

Modèles Simplifiés

Modèles de “boîtes”

Ces modèles sont extrêmement simplifiés. Ils considèrent des domaines de grandes dimensions dans lesquels les concentrations sont homogènes. Il est possible de connecter ces boîtes entre elles, en traitant les flux mis en jeu d'une boîte à l'autre. Les modèles de boîtes lagrangiens négligent les effets de turbulence et résolvent les équations de la cinétique des gaz ainsi que le dépôt et le lessivage le long des caractéristiques de l'écoulement. Ces modèles ne sont presque plus utilisés.

Les “screening models”

Ces modèles utilisent de simples corrélations ou des équations linéaires empiriques pour modéliser la dispersion. Leur utilité s'arrête à des études préliminaires, ils ne peuvent donner qu'une première approximation et ne permettent en aucun cas une étude complète de dispersion sur de grandes échelles.

Modèles d'Écoulements Tridimensionnels

Les modèles d'écoulement tridimensionnels traitent la totalité des phénomènes intervenant de façon significative dans l'écoulement. Ils résolvent directement les équations d'évolution des variables gouvernant la physique de la dispersion. Ainsi, les phénomènes de turbulence thermique ou dynamique sont naturellement pris en compte. Les obstacles ou le relief peuvent être pris en compte. Ces méthodes sont basées sur la résolution de systèmes d'équations aux dérivées partielles composés des lois de conservations suivantes

(ici les équations d'Euler pour la dynamique des fluides compressibles),

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}) = 0 \quad (k = 1, \dots, N) & \Leftarrow \text{conservation de la masse de l'espece } k, \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 & \Leftarrow \text{conservation de la masse de melange,} \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) = 0 & \Leftarrow \text{conservation de la quantite de mouvement,} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u}) = 0 & \Leftarrow \text{conservation de l'energie totale.} \end{array} \right.$$

Le système est fermé par une loi d'état thermodynamique. Il est évident que le second membre du système n'est pas forcément nul. Par exemple dans le cas où des réactions chimiques sont présentes comme lors de la combustion d'espèces. On peut distinguer trois familles de modèles :

- Les modèles **LES** (Large Eddy Simulation) : Seules les grandes échelles de la turbulence sont résolues, alors que les petites structures sont paramétrées par des modèles statistiques appelés modèles "de sous maille" ([56],[60]). Les équations de la dynamique des fluides sont "filtrées" pour ne conserver que les faibles nombres d'onde. Cela nécessite l'introduction d'une "échelle de séparation" (correspondant à un filtre passe bas [60]). Le spectre d'énergie est filtré, de telle sorte que seules les échelles ayant une influence sur la dispersion des espèces présentes soient simulées.
- Les modèles **RANS** (Reynolds Averaged Navier-Stokes) : Ils ont pour but, la résolution des équations moyennées au sens de Reynolds et nécessitent l'utilisation d'une loi de fermeture pour les flux turbulents apparaissant dans le système d'équations lors du processus de moyenne. Ces flux peuvent être décrit soit par de nouvelles équations (fermeture au second ordre [48]), soit par des corrélations impliquant l'une ou l'autre des grandeurs moyennes déjà calculées (fermeture au premier ordre [43],[81]).
- Les modèles **DNS** (Direct numerical simulation) : Il s'agit de résoudre explicitement les équations de la dynamique des gaz, en prenant en compte toutes les échelles de la turbulence. Ce sont les plus coûteux numériquement car nécessitant des maillages très fins afin de balayer toutes les échelles de la turbulence. Ils sont donc nettement moins adaptés aux écoulements à grande échelles que les deux familles précédentes.

Ces modèles permettent l'étude détaillée d'écoulements stationnaires se produisant sur des géométries complexes et donnent accès à l'évolution spatio temporelle de toutes les variables de l'écoulement (pression, densité, température concentration, champs de vitesse ...). On peut ainsi traiter des configurations d'écoulements variés, allant des faibles vitesses (phénomènes de dispersion) aux écoulements très rapides (ondes de choc, ondes acoustiques). Ces modèles sont les plus précis mais sont néanmoins plus coûteux numériquement.

Notre Approche

L'approche que nous avons choisi peut s'apparenter aux modèles précédents car les équations aux dérivées partielles régissant l'écoulement sont résolues explicitement. La différence fondamentale par rapport aux modèles classiques, provient du fait que notre approche est basée sur un modèle homogénéisé de milieu hétérogène compressible [47]. Le point clé de cette méthode est l'intégration directe des équations de la dynamique des gaz sur un volume de contrôle hétérogène susceptible de contenir simultanément une partie fluide et une partie solide. Ce volume est représenté sur la Figure 5. Ainsi, les obstacles internes sont pris en compte par le modèle à travers le volume qu'ils occupent au sein de la cellule.

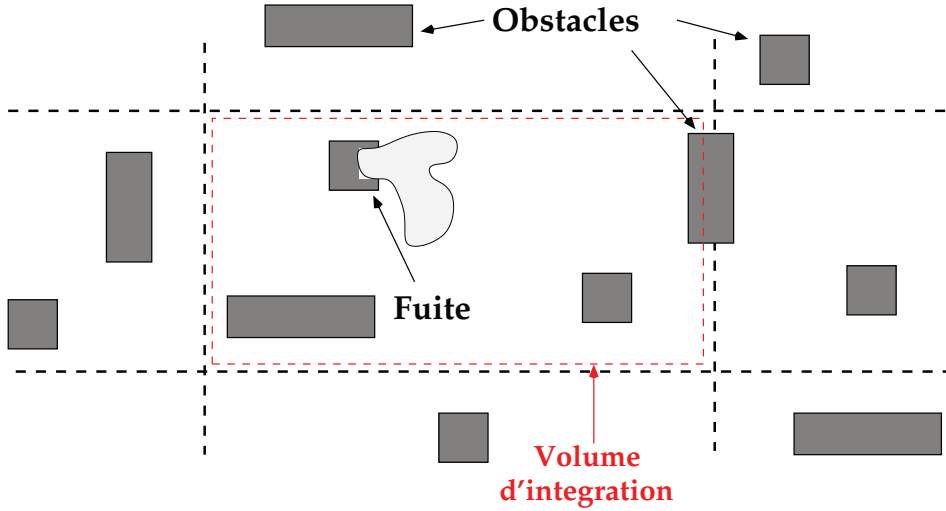


Figure 5 – Volume de contrôle contenant un nombre arbitraire d'obstacles de différentes natures (représenté en 2 dimensions).

Ainsi des obstacles internes solides éventuellement perméables (présence de fuite,...) peuvent être intégrés dans une maille de calcul. Cela nous permet de simuler des termes sources, en connectant ces obstacles internes à une condition aux limites adaptée. Cette approche nous permet ainsi de modéliser des géométries complexes et de traiter des phénomènes sur des échelles de temps et d'espace pouvant être très grandes.

Plan du Manuscrit

Nous partirons de la dérivation du modèle et ajouterons un à un les effets physiques nécessaires à la modélisation des phénomènes de dispersion dans le cas monophasique. Nous introduirons ensuite le modèle d'écoulement diphasique. Des validations sur des solutions exactes ou des résultats expérimentaux seront présentés à chaque étape supplémentaire. Une étude liée à la dispersion de particules soumises à de fortes explosions et dont l'évolution n'est pas triviale est proposée et vient clore ce mémoire. Le manuscrit est divisé en 6 chapitres résumés ci-après.

- Le modèle d'écoulement étant basé sur une approche de type volumes finis, le premier chapitre introduit les propriétés importantes des équations de la dynamique des gaz. Ceci est indispensable pour la compréhension et la résolution du problème de Riemann pour les équations d'Euler. Le système d'équations est intégré sur un volume de contrôle, ce qui nous conduit à l'obtention du modèle d'écoulement en milieu hétérogène. La prise en compte de la topographie des milieux considérés via l'utilisation de données d'élévation numériques termine ce chapitre.
- Le chapitre suivant traite des aspects multi-espèces de l'écoulement et en particulier du suivi de l'évolution des concentrations. Un schéma numérique d'ordre élevé (Schéma ADER) est introduit pour limiter la diffusion numérique induit par l'utilisation de maillages grossiers ainsi que par l'utilisation d'un schéma à l'ordre un. Les phénomènes diffusifs sont ensuite explicités. Notamment un modèle de diffusion entre espèces sera utilisé pour modéliser la diffusion turbulente.
- Les simulations numériques nécessitent le traitement rigoureux des conditions aux limites ainsi que des conditions initiales. Ceci fait l'objet du chapitre 3, dans lequel sont détaillés les différents types de conditions aux limites pour lesquelles des solveurs de Riemann "spéciaux" doivent être utilisés. Par ailleurs, nous verrons comment tenir compte des classes de stabilité atmosphérique pour les conditions initiales (profils verticaux complexes de température, de vitesse,...).
- Les phénomènes de dispersion dans l'atmosphère mettent souvent en jeu des particules ou des gouttelettes. Nous sommes donc amené à implémenter un modèle d'écoulement diphasique impliquant une phase porteuse (le gaz) ainsi qu'une phase dispersée (les particules). Dans le chapitre 4 nous présentons les équations d'Euler sans pression associées à la phase diluée. Ce modèle présentant quelques défauts (notamment il n'admet pas les chocs de particules), un modèle d'écoulement diphasique turbulent strictement hyperbolique et ne comportant qu'un seul paramètre a été développé et est également décrit dans ce chapitre. Des comparaisons et des validations y sont présentées.
- Le chapitre 5 contient des résultats numériques prenant en compte tous les aspects développés dans les chapitres précédents. Il contient des validations pour le code de calcul, notamment des confrontations avec des résultats expérimentaux. On pourra y apprécier les aptitudes du code de calcul dans des configurations variées de dispersion à grande échelle.
- La présence d'une seconde phase dans le modèle nous conduit à la question de la dispersion de particules soumises à de fortes explosions. Les "Fingers de Particules" qui se forment alors ont des conséquences sur le devenir du nuage formé et pilote sa dispersion. Le mécanisme responsable de cette instabilité étant inconnu, nous présentons un modèle semi-analytique développé dans le but de progresser dans l'explication de ce phénomène. Ceci fait l'objet du chapitre 6.

Chapitre I

Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène

Nous souhaitons élaborer un outil de simulation avancé pour des écoulements à caractère fortement hétérogène, instationnaires et multi-dimensionnels. Cet outil doit pouvoir traiter la physique de la dispersion d'une source d'émission en présence d'obstacles. Ces derniers pouvant être très nombreux, on ne souhaite pas résoudre les équations de la dynamique des gaz sur une géométrie aussi complexe. En effet, sur ce type de géométrie (milieu urbain, industriel ou encore vallonné), les simulations 3D instationnaires s'avèrent complexes car coûteuses en moyens informatiques et en temps de calcul. Ceci n'est pas approprié dans le cas de situations d'urgence nécessitant des réponses rapides. Par ailleurs, les méthodes basées sur un nombre restreint de volumes de contrôle présentent des difficultés dues à la topographie des milieux, qui dans ce cas, est difficilement reproductible mais également pour le traitement des conditions aux limites. Nous avons donc choisi d'utiliser un modèle équivalent pouvant être résolu sur des volumes de grandes dimensions contenant éventuellement plusieurs obstacles.

Dans ce chapitre, nous présentons le modèle d'écoulement hétérogène. Celui-ci est présenté dans [47], il repose sur les équations d'Euler des fluides compressibles qui sont directement intégrées sur des mailles hétérogènes contenant des volumes solides, eux-mêmes susceptibles d'éclater. Il appartient à la classe des méthodes numériques moyennées, à l'image des modèles d'écoulements multiphasiques décrits dans [3] et [46]. Cependant, il ne comporte qu'une seule phase : l'autre phase correspond aux volumes solides contenus dans les mailles de calcul. Le modèle tient compte du volume occupé par les obstacles à travers des conditions limites adaptées (parois imperméables, conditions limites de type réservoir). Ainsi, celui-ci se rapproche des méthodes de type "cut cells" ([15],[37] et [83]) quant à la description géométrique, ou du moins conceptuellement. La première difficulté associée à cette description provient du caractère fortement hétérogène du milieu. Les obstacles présents sont solides et immobiles. On tient compte de leur présence à travers le volume qu'ils occupent et les surfaces de contact avec le fluide environnant. Certains obstacles peuvent également subir des éclatements (fuites, ruptures, etc ...), les parois associées deviennent dans ce cas perméables. La formulation présentée dans ce chapitre

est donc basée sur l'intégration des équations de la dynamique des gaz sur des mailles hétérogènes contenant des obstacles solides et/ou perméables. Avant de procéder à la description de l'intégration du système d'équations, nous allons au préalable rappeler les propriétés fondamentales des équations de la dynamique des gaz, ainsi que le processus de résolution du problème de Riemann associé à ces équations.

I.1 Les Equations de la Dynamique des Gaz

Nous allons étudier les propriétés fondamentales des équations d'Euler dans le cas d'écoulements multidimensionnels. Cette étude nous permettra de déterminer les relations nécessaires pour la résolution du problème de Riemann des équations d'Euler (relations de saut à travers les ondes de choc, relations de passage à travers les "ondes élémentaires").

I.1.1 Propriétés Principales

Les équations d'Euler des fluides compressibles traduisent les propriétés de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale d'un système physique. Ces équations admettent deux types de solutions, les solutions classiques appelées ondes élémentaires, correspondant à des solutions continues mais également des solutions discontinues appelées solutions faibles. Ces équations peuvent être formulées de plusieurs manières,

- La formulation en **variables conservatives** est utile pour l'obtention des relations de saut à travers les ondes de choc. Le vecteur des variables conservatives est constitué de la densité ρ , du vecteur quantité de mouvement $\rho\mathbf{u}$, ainsi que de l'énergie totale du système ρE . A ces variables conservatives sont associés des flux. Ainsi :

$$\mathbf{U}_c = (\rho, \rho\mathbf{u}, \rho E)^t \quad \mathbf{F} = (\rho\mathbf{u}, \rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P\mathbb{I}, \rho E\mathbf{u} + P\mathbf{u})^t$$

Le système sous la forme conservative s'écrit,

$$\frac{\partial \mathbf{U}_c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{F}) = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P\mathbb{I}) = 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E\mathbf{u} + P\mathbf{u}) = 0 \end{cases} \quad (\text{I.1})$$

Avec E , l'énergie totale telle que :

$$E = e(P, \rho) + \frac{\|\mathbf{u}\|^2}{2}$$

Le système est fermé grâce à une loi d'état reliant les variables thermodynamiques entre elles. Dans le cas présent, la loi d'état des gaz parfaits est utilisée,

$$e(P, \rho) = \frac{P}{\rho(\gamma - 1)} \quad (\text{I.2})$$

I.1. Les Equations de la Dynamique des Gaz

- La formulation en **variables primitives** est utile pour l'obtention des relations à travers les ondes élémentaires du système (ondes caractéristiques). Le vecteur des variables primitives noté $\mathbf{W}$, est constitué de la densité ρ , du champ de vitesse $\mathbf{u}$ et de la pression P . D'autres jeux de variables peuvent être choisis, on peut notamment remplacer la pression P par l'entropie spécifique s .

$$\mathbf{W} = (\rho, \mathbf{u}, P)^t$$

Elle correspond à la forme quasi-linéaire des équations et permet l'obtention des solutions auto-similaires du système.

• Vitesses d'Onde

Nous utilisons ici la formulation en variables primitives pour obtenir les vitesses des ondes élémentaires, intrinsèques au système ainsi que les invariants de Riemann. Écrivons le système (I.1) sous la forme quasi-linéaire,

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \underline{\underline{A}}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} + \underline{\underline{B}}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial y} + \underline{\underline{C}}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial z} = 0, \quad (\text{I.3})$$

où $\mathbf{W}$ est le vecteur des variables primitives,

$$\mathbf{W} = (\rho, u, v, w, P)^t$$

$\underline{\underline{A}}(\mathbf{W})$, $\underline{\underline{B}}(\mathbf{W})$ et $\underline{\underline{C}}(\mathbf{W})$ sont les matrices de propagation associées au système. Ces matrices s'écrivent :

$$\underline{\underline{A}}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 0 & 1/\rho \\ 0 & 0 & u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & \rho c^2 & 0 & 0 & u \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{B}}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} v & 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & 1/\rho \\ 0 & 0 & 0 & v & 0 \\ 0 & 0 & \rho c^2 & 0 & v \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{C}}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} w & 0 & 0 & \rho & 0 \\ 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w & 1/\rho \\ 0 & 0 & 0 & \rho c^2 & w \end{pmatrix},$$

où $c^2 = \left. \frac{\partial P}{\partial \rho} \right|_s$ est la vitesse du son dans le gaz. Les vitesses des ondes émises correspondent aux valeurs propres des matrices de propagation précédemment introduites. Ainsi, pour chacune des trois matrices, on cherche les valeurs de λ vérifiant :

$$\det(\underline{\underline{A}} - \lambda \mathbb{I}) = 0, \quad \det(\underline{\underline{B}} - \lambda \mathbb{I}) = 0 \quad \text{et} \quad \det(\underline{\underline{C}} - \lambda \mathbb{I}) = 0.$$

Chacune des matrices admet trois valeurs propres réelles et distinctes dont l'une est de multiplicité 3.

- Pour la matrice $\underline{\underline{A}}(\mathbf{W})$: $\lambda_0 = u$, $\lambda_- = u - c$ et $\lambda_+ = u + c$.
- Pour la matrice $\underline{\underline{B}}(\mathbf{W})$: $\lambda_0 = v$, $\lambda_- = v - c$ et $\lambda_+ = v + c$.
- Pour la matrice $\underline{\underline{C}}(\mathbf{W})$: $\lambda_0 = w$, $\lambda_- = w - c$ et $\lambda_+ = w + c$.

Cela signifie que si une perturbation est présente, trois ondes élémentaires sont émises dans chaque direction d'espace (Figure I.1). Les courbes $\frac{dx}{dt} = \lambda_i$ sont appelées courbes caractéristiques du système.

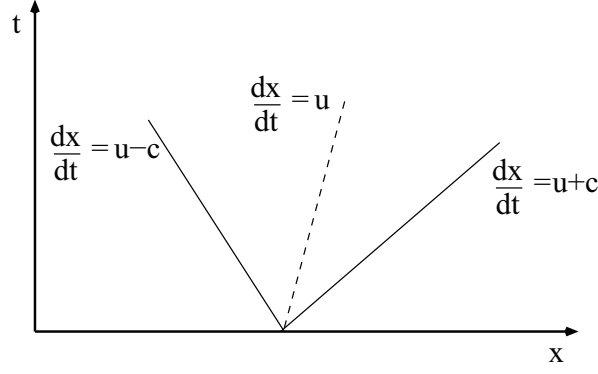


Figure I.1 – Diagramme d'ondes représentant les trajectoires des ondes élémentaires émises dans le plan (x, t) . On obtient le même type de diagramme dans les deux autres directions d'espace.

• Relations Caractéristiques

Les invariants de Riemann sont des grandeurs se conservant le long des trajectoires privilégiées que sont les courbes caractéristiques. Pour obtenir ces grandeurs, nous devons préalablement déterminer la base des vecteurs propres des matrices de propagation, afin d'obtenir les relations caractéristiques associées au système. Les vecteurs propres à gauche, L_i^t vérifient la relation suivante :

$$L_i^t \underline{\underline{A}}(\mathbf{W}) = \lambda_i L_i^t.$$

Après calcul, on obtient les vecteurs propres suivants pour la matrice $\underline{\underline{A}}(\mathbf{W})$:

$$L_{01}^t = (-c^2, 0, 0, 0, 1), L_{02}^t = (0, 0, 1, 0, 0), L_{03}^t = (0, 0, 0, 1, 0), \\ L_+^t = (0, \rho c, 0, 0, 1), L_-^t = (0, -\rho c, 0, 0, 1).$$

Identiquement, pour la matrice $\underline{\underline{B}}(\mathbf{W})$:

$$L_{01}^t = (-c^2, 0, 0, 0, 1), L_{02}^t = (0, 1, 0, 0, 0), L_{03}^t = (0, 0, 0, 1, 0), \\ L_+^t = (0, 0, \rho c, 0, 1), L_-^t = (0, 0, -\rho c, 0, 1).$$

Et enfin, pour la matrice $\underline{\underline{C}}(\mathbf{W})$, les vecteurs propres à gauche sont :

$$L_{01}^t = (-c^2, 0, 0, 0, 1), L_{02}^t = (0, 1, 0, 0, 0), L_{03}^t = (0, 0, 1, 0, 0), \\ L_+^t = (0, 0, 0, \rho c, 1), L_-^t = (0, 0, 0, -\rho c, 1).$$

Il est utile de remarquer que chaque matrice de propagation admet 5 valeurs propres réelles et 5 vecteurs propres linéairement indépendants. Ainsi, par définition le système est strictement **hyperbolique** dans chaque direction d'espace.

Le système étudié est invariant par rotation, ce qui nous permet d'étudier le système dans **une direction donnée** de l'espace. Les relations caractéristiques obtenues pourront être

I.1. Les Equations de la Dynamique des Gaz

étendues aux deux autres directions. Plaçons nous dans la direction $\mathbf{x}$ et supposons que les variations dans les deux directions transverses sont nulles. Le système peut alors être réduit :

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \underline{A}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0$$

En multipliant ce système par les vecteurs propres à gauche précédemment exprimés, nous obtenons les relations caractéristiques le long des trajectoires. Rappelons que celles-ci sont valides dans le cas des ondes acoustiques et de détente.

$$L_i^t \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + L_i^t \underline{A}(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = L_i^t \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} \right) = 0$$

Soit $\left. \frac{\partial(\cdot)}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial(\cdot)}{\partial x} \right|_{\lambda_i}$ la dérivée directionnelle le long de la courbe caractéristique $\frac{dx}{dt} = \lambda_i$.

Alors,

$$L_{0i}^t \left. \frac{dW}{dt} \right|_u = 0 \quad (i = 1, 2, 3), \quad L_+^t \left. \frac{dW}{dt} \right|_{u+c} = 0, \quad \text{et} \quad L_-^t \left. \frac{dW}{dt} \right|_{u-c} = 0.$$

Finalement, on obtient un système d'équations différentielles ordinaires le long des trajectoires privilégiées :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho c \left. \frac{du}{dt} \right|_{u+c} + \left. \frac{dP}{dt} \right|_{u+c} = 0 \\ \left. \frac{dP}{dt} \right|_u - c^2 \left. \frac{d\rho}{dt} \right|_u = 0 \\ \left. \frac{dv}{dt} \right|_u = 0, \quad \left. \frac{dw}{dt} \right|_u = 0 \\ -\rho c \left. \frac{du}{dt} \right|_{u-c} + \left. \frac{dP}{dt} \right|_{u-c} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{I.4})$$

Remarquons que la seconde relation du système (I.4) peut se mettre sous la forme suivante, où s représente l'entropie spécifique du système :

$$\left. \frac{ds}{dt} \right|_u = 0$$

Ces relations s'intègrent aisément pour donner les relations caractéristiques le long des trajectoires, valables dans le cas d'un écoulement isentropique,

$$\left\{ \begin{array}{l} u + \frac{2c}{\gamma - 1} = \text{Constante}, \quad \text{le long de } \frac{dx}{dt} = u + c. \\ u - \frac{2c}{\gamma - 1} = \text{Constante}, \quad \text{le long de } \frac{dx}{dt} = u - c. \\ \frac{P}{\rho^\gamma} = \text{Constante}, \quad \text{le long de } \frac{dx}{dt} = u. \end{array} \right. \quad (\text{I.5})$$

Il est évident que l'on doit ajouter à ce système les équations portant sur les vitesses transverses, celles-ci ont une solution triviale. En effet, les vitesses transverses sont invariantes le long des courbes caractéristiques. Les solutions ainsi obtenues sont appelées

ondes simples centrées et ne dépendent que du rapport x/t . On les qualifie de “solutions auto-similaires”.

• Solutions Faibles et Relations de Saut

Les équations de la dynamique des gaz admettent les solutions discontinues appelées “solutions faibles”, [27,33,45]. Nous allons rappeler brièvement ce que sont ces solutions. Pour cela, on utilise la formulation conservative des équations,

$$\frac{\partial \mathbf{U}_c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = 0 \quad (\text{I.1})$$

Soit $\varphi(x, t)$, une fonction à support compact dans $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ s'annulant au bord du domaine. Soit C , un contour fermé dans le plan (x, t) délimitant D , c'est à dire, $\partial D = C$ (Figure I.2 à gauche). La formulation faible est obtenue en intégrant le système (I.1) pondéré par la fonction test $\varphi(x, t)$ sur le domaine D .

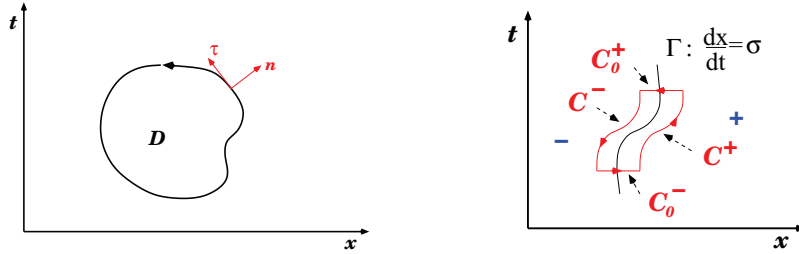


Figure I.2 – A gauche : représentation du domaine d'intégration D . A droite : représentation de la courbe de discontinuité Γ

$$\int_D \left(\frac{\partial \mathbf{U}_c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} \right) \varphi(x, t) dx dt = \int_D \left(\frac{\partial \varphi \mathbf{U}_c}{\partial t} + \frac{\partial \varphi \mathbf{F}}{\partial x} \right) dx dt - \int_D (\mathbf{U}_c \varphi_t + \mathbf{F} \varphi_x) dx dt = 0,$$

soit :

$$\int_D \left(\frac{\partial \mathbf{U}_c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} \right) \varphi(x, t) dx dt = \int_C \left(\begin{pmatrix} \mathbf{F} \varphi \\ \mathbf{U}_c \varphi \end{pmatrix} \cdot \mathbf{n} dl \right) - \int_D (\mathbf{U}_c \varphi_t + \mathbf{F} \varphi_x) dx dt = 0$$

Où dl est l'élément différentiel de longueur associé au contour C . La définition de la fonction test φ nous permet d'annuler l'intégrale portant sur le bord du domaine, ce qui implique donc :

$$\int_D (\mathbf{U}_c \varphi_t + \mathbf{F} \varphi_x) dx dt = 0. \quad (\text{I.6})$$

Les solutions satisfaisant simultanément les systèmes (I.1) et (I.6) correspondent aux solutions classiques étudiées précédemment. On appelle solutions faibles, les solutions qui vérifient (I.6) uniquement. Cette formulation nous permet de définir des solutions discontinues et d'obtenir les relations de Rankine-Hugoniot.

I.1. Les Equations de la Dynamique des Gaz

Soit une courbe de discontinuité Γ séparant deux milieux et se propageant à la vitesse arbitraire σ ,

$$\Gamma : \frac{dx}{dt} = \sigma,$$

On choisit un contour fermé C délimitant un domaine D , comme indiqué sur la Figure I.2 à droite. Le système (I.1) est intégré le long de ce contour. Précisons que dans le cas d'une étude unidimensionnelle, l'intégration peut s'opérer directement, sans introduire la fonction test.

$$\int_D \left(\frac{\partial \mathbf{U}_c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} \right) dx dt = \oint_C (-\mathbf{U}_c dx + \mathbf{F} dt) = 0.$$

Le contour C est séparé en plusieurs parties,

$$C = C^+ \cup C_0^+ \cup C^- \cup C_0^-$$

Les courbes C_0^+ et C_0^- sont de longueur " δ ". Pour ce calcul, nous nous plaçons dans la limite $\delta \rightarrow 0$. Ceci entraîne le fait que les contributions des intégrales sur les contours C_0^+ et C_0^- tendent vers zéro. Il reste alors,

$$\begin{aligned} \int_{C^+} (-\mathbf{U}_c dx + \mathbf{F} dt) + \int_{C^-} (-\mathbf{U}_c dx + \mathbf{F} dt) &= 0 \\ \int_{C^+} \left(-\mathbf{U}_c \frac{dx}{dt} + \mathbf{F} \right) dt + \int_{C^-} \left(-\mathbf{U}_c \frac{dx}{dt} + \mathbf{F} \right) dt &= 0 \\ \int_{t_1}^{t_2} \left(-\mathbf{U}_c^+ \frac{dx}{dt} + \mathbf{F}^+ \right) dt - \int_{t_1}^{t_2} \left(-\mathbf{U}_c^- \frac{dx}{dt} + \mathbf{F}^- \right) dt &= 0 \\ \int_{t_1}^{t_2} \left[-\mathbf{U}_c \frac{dx}{dt} + \mathbf{F} \right]_-^+ dt &= 0. \end{aligned}$$

Ceci implique finalement :

$$\left[-\mathbf{U}_c \frac{dx}{dt} + \mathbf{F} \right]_-^+ = 0.$$

Or, $\frac{dx}{dt} = \sigma$. On obtient les relations de Rankine-Hugoniot pour les équations d'Euler :

$$\mathbf{F} - \sigma \mathbf{U}_c = \text{constante} \quad (\text{I.7})$$

Ces relations traduisent les propriétés de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale à travers une onde de discontinuité se propageant à la vitesse arbitraire σ .

I.1.2 Problème de Riemann des Equations d'Euler

Nous nous plaçons dans le cas unidimensionnel pour la description et la résolution du problème de Riemann. Celui-ci est constitué des équations d'Euler des fluides compressibles auxquelles s'ajoutent les conditions initiales suivantes,

$$\mathbf{W} = \begin{cases} \mathbf{W}_l & si \quad x < 0 \\ \mathbf{W}_r & si \quad x > 0 \end{cases}, \quad \text{avec } \mathbf{W}_i = (\rho_i, u_i, P_i)^t$$

I. Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène

Une discontinuité sépare initialement deux états distincts du gaz. Après rupture de la membrane fictive ($t > 0$), trois ondes sont émises créant deux états intermédiaires issus du passage des deux ondes extrêmes (Figure I.3). On notera ces états $\mathbf{W}_L^*$ et $\mathbf{W}_R^*$, ceux-ci sont séparés par l'onde centrale appelée discontinuité de contact, c'est une onde matérielle se propageant à la vitesse du gaz perturbé. On note σ_L , la vitesse de l'onde faisant face à gauche et σ_R , la vitesse de l'onde faisant face à droite.

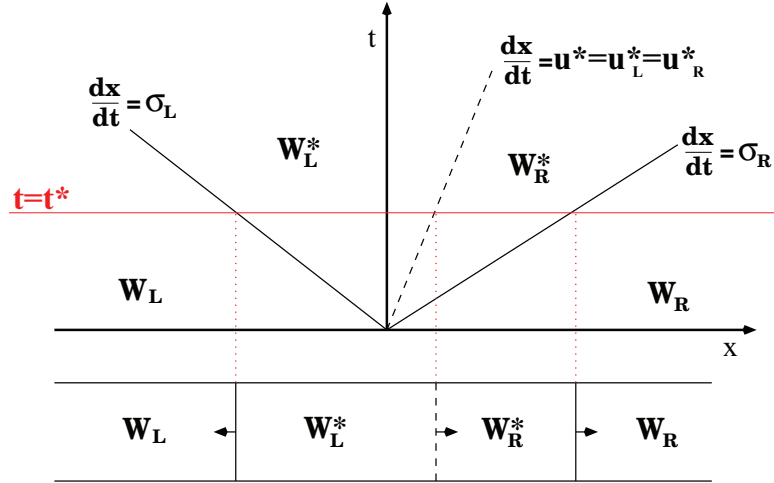


Figure I.3 – Diagramme d'onde représentant les trajectoires des différentes ondes émises dans le plan (x,t) . On peut voir les 4 états distincts du gaz séparés par les différentes ondes. L'état du gaz est également représenté à un instant donné $t = t^*$ (en dessous du diagramme d'ondes).

La résolution du problème de Riemann consiste en l'obtention des états $\mathbf{W}_L^*$ et $\mathbf{W}_R^*$ représentés sur la Figure I.3. Les ondes émises peuvent être de différentes natures (ondes de choc, ondes de détente, surface de discontinuité). Dans chaque cas, il faudra utiliser les relations appropriées. Dans le cas de la propagation d'une onde de choc, on utilise les relations de Rankine-Hugoniot (I.7). Pour un faisceau d'ondes de détente, on considère les relations isentropiques (I.5).

• Cas des Ondes de Détentes

Prenons l'exemple d'un faisceau d'ondes de détente faisant face à gauche (Figure I.4). À travers chacune des ondes élémentaires, les relations suivantes sont vérifiées :

$$u + \frac{2c}{\gamma - 1} = \text{Constante} \quad \text{et} \quad \frac{P}{\rho^\gamma} = \text{Constante}$$

Ce sont les invariants de Riemann, valides à travers un faisceau d'ondes de détente faisant face à gauche.

Dans le cas d'un faisceau d'ondes de détente faisant face à droite, les relations vérifiées à travers les ondes élémentaires sont,

I.1. Les Equations de la Dynamique des Gaz

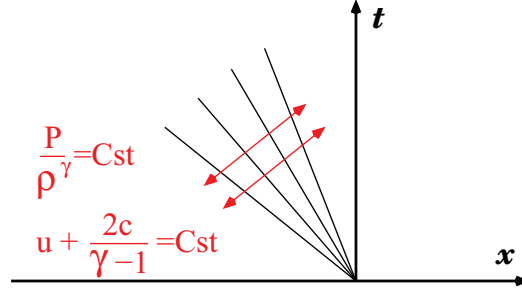


Figure I.4 – Diagramme d'ondes représentant un faisceau d'ondes de détente faisant face à gauche. Trajectoires des ondes élémentaires dans le plan (x, t) .

$$u - \frac{2c}{\gamma - 1} = \text{Constante} \quad \text{et} \quad \frac{P}{\rho^\gamma} = \text{Constante}$$

Il est utile de rappeler que dans le cas multidimensionnel, on adjoint les relations sur les vitesses transverses ($dv = 0$, $dw = 0$).

• Cas des Discontinuités

Dans ce cas, nous disposons des relations de Rankine-Hugoniot (I.7) qui s'écrivent dans le cas d'une discontinuité se propageant à une vitesse arbitraire σ .

$$\begin{aligned} \rho(u - \sigma) &= \rho_0(u_0 - \sigma), \\ \rho u(u - \sigma) + P &= \rho_0 u_0(u_0 - \sigma) + P_0, \\ \rho v(u - \sigma) &= \rho_0 v_0(u_0 - \sigma), \\ \rho w(u - \sigma) &= \rho_0 w_0(u_0 - \sigma), \\ \rho E(u - \sigma) + Pu &= \rho_0 E_0(u_0 - \sigma) + P_0 u_0. \end{aligned} \tag{I.8}$$

1. Si la discontinuité est une **discontinuité de contact** ($\sigma = u$). Dans ce cas, on retrouve les conditions d'interface classiques. La première relation de (I.8) donne $u = \sigma = u_0$. Cela implique également l'égalité des pressions de part et d'autre de la discontinuité de contact : $P = P_0$. Les relations mettant en jeu les vitesses transverses et l'énergie n'apportent pas d'information supplémentaire. Ainsi aucun saut de pression ni de vitesse normale n'est observé à travers une discontinuité de contact.
2. Si la discontinuité est une **onde de choc** ($\sigma \neq u$). Seules les relations concernant les vitesses transverses peuvent être simplifiées ($v = v_0$, $w = w_0$). Trois relations restent disponibles. Le système comportant 5 inconnues, on utilise la loi d'état ainsi qu'une donnée supplémentaire, issue par exemple d'une condition aux limites, pour calculer les états solutions.

Nous disposons maintenant de tous les outils nécessaires à la résolution du problème de Riemann. Voyons rapidement l'exemple d'un tube à choc.

I. Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène

Le tube à choc est une installation permettant de générer des ondes de choc. Initialement, un diaphragme sépare une chambre haute pression d'une chambre basse pression. Après rupture de ce diaphragme, une onde de choc se propage dans la chambre basse pression suivie de la discontinuité de contact alors qu'un faisceau d'ondes de détente se propage dans la chambre haute pression. Le diagramme d'onde correspondant est présenté sur la Figure I.5 (à gauche), ainsi que les conditions initiales.

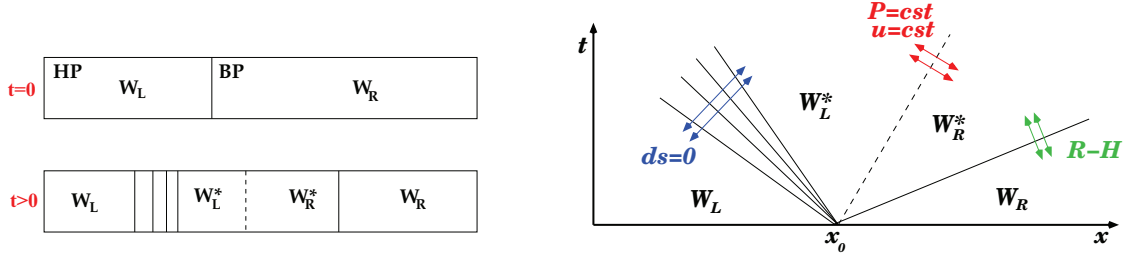


Figure I.5 – A gauche : schématisation du tube à choc à $t = 0$ et $t \neq 0$. On a représenté à droite le diagramme d'ondes associé au cas du tube à choc.

Sur la Figure I.6, on a représenté les profils de pression, vitesse et densité à $t = 5ms$ correspondant à la solution exacte du problème de Riemann.

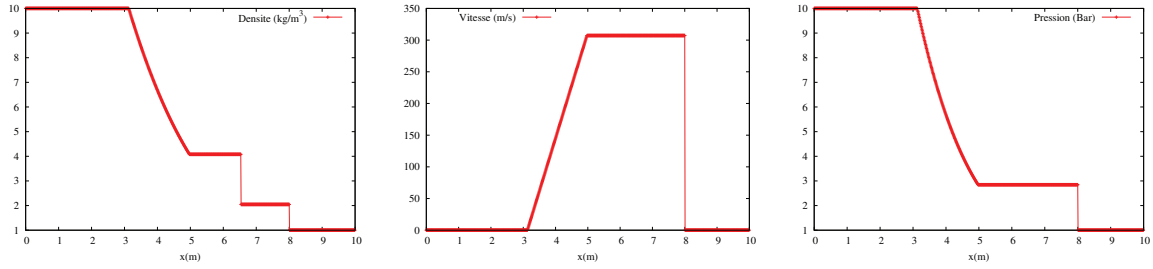


Figure I.6 – Profils de densité, vitesse et pression obtenus après la résolution exacte du problème de Riemann entre les états $W_l = (10 \text{ kg/m}^3, 0 \text{ m/s}, 10^6 \text{ Pa})^t$ et $W_r = (1 \text{ kg/m}^3, 0 \text{ m/s}, 10^5 \text{ Pa})^t$, utilisant la loi d'état des gaz parfaits avec $\gamma = 1.4$. La discontinuité initiale est ici positionnée au milieu du domaine.

I.2 Modèle d'Écoulement en Milieu Hétérogène

Nous souhaitons traiter la dispersion de fluides en milieu fortement hétérogène comme mentionné préalablement. Les difficultés principales associées à cette étude proviennent de la géométrie complexe dans laquelle ces écoulements ont lieu, ainsi que des échelles de temps et d'espace associées qui peuvent être très étendues (plusieurs centaines de mètres sur des temps de plusieurs minutes). Le point clé de la méthode développée dans [47] est l'intégration directe des équations de la dynamique des gaz sur un volume de contrôle

I.2. Modèle d'Écoulement en Milieu Hétérogène

hétérogène.

En chaque point, le gaz obéit aux équations d'Euler des fluides compressibles dont nous avons étudié les propriétés fondamentales précédemment dans ce chapitre. Il s'agit d'intégrer le système (I.1) sur un volume de contrôle spécial pouvant contenir des volumes solides perméables ou non et sur un pas de temps Δt . Le volume de contrôle typique est représenté sur la Figure I.7.

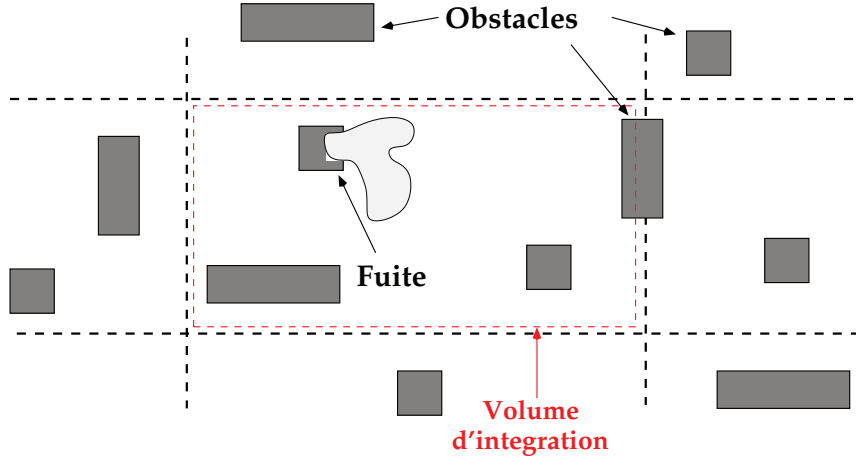


Figure I.7 – Volume de contrôle contenant un nombre arbitraire d'obstacles de différentes natures (représenté en 2 dimensions).

$$\int_{\Delta t} \int_V \left\{ \frac{\partial \mathbf{U}_c}{\partial t} + \nabla \mathbf{F} \right\} dV dt = 0$$

Lorsque le système est intégré sur un volume de contrôle quelconque V (privé du volume occupé par les obstacles solides) délimité par la surface S et de normale sortante $\mathbf{n}$ (Figure I.8), l'intégrale devient (en utilisant le théorème de la divergence) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV dt + \int_{\Delta t} \int_S \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt = 0 \\ \int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} dV dt + \int_{\Delta t} \int_S \rho \mathbf{u} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS dt + \int_{\Delta t} \int_S P \mathbf{n} dS dt = 0 \\ \int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho E}{\partial t} dV dt + \int_{\Delta t} \int_S \rho E \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt + \int_{\Delta t} \int_S P \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt = 0 \end{array} \right. \quad (\text{I.9})$$

Nous allons intégrer une à une les équations du système (I.9)

I.2.1 Intégration de l'Equation de Conservation de la Masse

• Intégration du terme temporel

Le volume de contrôle étant fixe dans le temps, on peut permuter la dérivée temporelle et l'intégrale en volume. L'intégration du terme en temps ne présente alors aucune

difficulté.

$$\int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV dt = \int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \rho dV \right) dt$$

L'intégration s'opère entre les itérations n et $n + 1$. Le volume de contrôle correspond à la maille de calcul d'indices i, j et l . En utilisant la définition de la moyenne volumique d'une variable quelconque a :

$$\bar{a} = \frac{1}{V} \int_V a dV \quad (\text{I.10})$$

on obtient :

$$\int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV dt = (\bar{\rho}V)_{i,j,l}^{n+1} - (\bar{\rho}V)_{i,j,l}^n.$$

Il est à noter que V est le volume fluide contenu dans le volume de contrôle, il ne correspond donc pas forcément au volume total de la maille.

• Intégration des flux

L'intégration des flux est plus complexe, car elle concerne et prend en compte des surfaces de différentes natures. En effet, les surfaces en bords de mailles peuvent comporter une partie fluide et une partie solide. D'autre part, des surfaces internes dues à la présence éventuelle de volumes solides sont à prendre en compte. Notons que ces surfaces internes peuvent être perméables ou non.

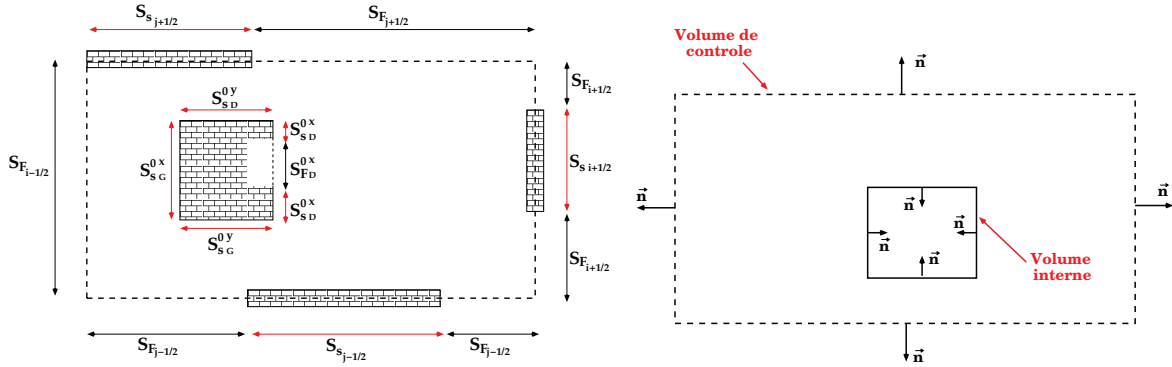


Figure I.8 – À gauche : représentation des surfaces d'intégration (en 2 dimensions). À droite, représentation des normales sortantes du volume fluide.

Les différentes surfaces d'intégration sont schématisées sur la Figure I.8 à gauche. Soient S_S et S_F respectivement les surfaces solides et fluides situées aux bords de maille et S_F^0 et S_S^0 , respectivement les surfaces fluides et solides internes au volume de contrôle. Dans ce cas, la surface d'intégration s'écrit,

$$S = S_F + S_S + S_F^0 + S_S^0.$$

I.2. Modèle d'Écoulement en Milieu Hétérogène

Sur un volume de contrôle tridimensionnel représenté par la cellule $V_{i,j,l}$, on peut exprimer :

$$\begin{aligned} S_F &= S_{F,i+\frac{1}{2}} + S_{F,i-\frac{1}{2}} + S_{F,j+\frac{1}{2}} + S_{F,j-\frac{1}{2}} + S_{F,l+\frac{1}{2}} + S_{F,l-\frac{1}{2}} \\ S_S &= S_{S,i+\frac{1}{2}} + S_{S,i-\frac{1}{2}} + S_{S,j+\frac{1}{2}} + S_{S,j-\frac{1}{2}} + S_{S,l+\frac{1}{2}} + S_{S,l-\frac{1}{2}} \\ S_F^0 &= S_{FG}^{0x} + S_{FD}^{0x} + S_{FG}^{0y} + S_{Fd}^{0y} + S_{FG}^{0z} + S_{FD}^{0z} \\ S_S^0 &= S_{SG}^{0x} + S_{SD}^{0x} + S_{SG}^{0y} + S_{SD}^{0y} + S_{SG}^{0z} + S_{SD}^{0z} \end{aligned}$$

Les indices “ g ” et “ d ” correspondent à “gauche” et “droite” respectivement. Ainsi, par exemple, S_{FG}^{0x} correspond à la surface interne fluide à gauche normale à la direction $\mathbf{x}$ (Figure I.8 à gauche). Soient $\mathbf{i}$, $\mathbf{j}$ et $\mathbf{l}$, les vecteurs unitaires dans les directions $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ et $\mathbf{z}$, et N_{V0} , le nombre de volumes internes présents dans le volume de contrôle. L'équation de conservation de la masse s'exprime alors de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \int_{\Delta t} \int_S \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt &= \Delta t \int_S \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS \\ \int_{\Delta t} \int_S \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt &= \Delta t \left\{ \begin{aligned} &\int_{S_{i+\frac{1}{2}}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{i} dS - \int_{S_{i-\frac{1}{2}}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{i} dS + \int_{S_{j+\frac{1}{2}}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{j} dS \\ &- \int_{S_{j-\frac{1}{2}}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{j} dS + \int_{S_{l+\frac{1}{2}}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{l} dS - \int_{S_{l-\frac{1}{2}}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{l} dS \\ &+ \sum_{N_{V0}} \int_{S^{0x}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS + \sum_{N_{V0}} \int_{S^{0y}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS + \sum_{N_{V0}} \int_{S^{0z}} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS \end{aligned} \right\}. \end{aligned}$$

L'intégration des flux sur un pas de temps est immédiate, car on fait l'hypothèse que ces flux sont constants durant un pas de temps. Ceci reste vrai tant que la condition CFL est satisfaite [16] (Dans l'hypothèse d'un écoulement unidimensionnel). Il ne doit pas y avoir d'interaction entre les ondes dans une maille de calcul pendant un pas de temps (Le schéma d'intégration étant un schéma explicite, une condition de stabilité pour celui-ci est nécessaire). La contribution des flux sur les surfaces solides est nulle. En effet, la condition de glissement impose l'annulation du produit scalaire “ $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ ” au niveau des parois. Dans ces conditions, l'intégration des flux associés à l'équation de conservation de la masse donne :

$$\int_{\Delta t} \int_S \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt = \Delta t \left\{ \begin{aligned} &\{(\rho u)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho u)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} + \{(\rho v)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho v)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \\ &+ \{(\rho w)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho w)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} + \\ &\sum \left[(\rho u)^* S_{FG}^{0x} - (\rho u)^* S_{FD}^{0x} + (\rho v)^* S_{FG}^{0y} - (\rho v)^* S_{FD}^{0y} + (\rho w)^* S_{FG}^{0z} - (\rho w)^* S_{FD}^{0z} \right] \end{aligned} \right\}.$$

Dans l'expression précédente, on a écrit en rouge les termes résultant de la présence d'obstacles internes au volume de contrôle. En rappelant que seules les surfaces fluides de ces obstacles ont une contribution. La sommation s'opère sur le nombre de volumes internes présents. Les autres termes correspondent aux flux classiques traversant les bords de maille dans les trois directions d'espace.

• Bilan pour l'équation de conservation de la masse

Par la suite, on remplacera la notation $\bar{\rho}$, par ρ afin d'alléger l'écriture, de même que pour les autres variables. Finalement, le schéma obtenu pour l'équation de conservation de la masse est le suivant :

$$(\rho V)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho V)_{i,j,l}^n - \Delta t \left\{ \begin{aligned} & \{(\rho u)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho u)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} + \{(\rho v)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} \\ & - \{(\rho v)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} + \{(\rho w)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho w)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \\ & + \sum \left[(\rho u)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho u)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho v)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho v)^* S_{Fd}^{0y} \right] \\ & + \sum \left[(\rho w)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho w)^* S_{Fd}^{0z} \right] \end{aligned} \right\} \quad (\text{I.11})$$

Les variables admettent maintenant l'exposant “*”, cela signifie qu'elles sont évaluées au niveau des surfaces d'intégration. L'obtention de ces grandeurs nécessite la résolution de problèmes de Riemann (voir de demi problème de Riemann). Il est intéressant de noter que seules les surfaces fluides contribuent au bilan des flux pour cette équation. Ce n'est pas le cas de l'équation de conservation de la quantité de mouvement que nous allons maintenant traiter.

I.2.2 Intégration de l'Equation de Conservation de la Quantité de Mouvement

Nous devons calculer :

$$\int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} dV dt + \int_{\Delta t} \int_S \rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) dS dt + \int_{\Delta t} \int_S P \mathbf{n} dS dt = 0.$$

L'intégration de la dérivée temporelle ne présente pas de difficulté majeure, comme précédemment, on utilise la définition de la valeur moyenne volumique (relation (I.10)) :

$$\int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} dV dt = \int_{\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \rho \mathbf{u} \right) dV = (\rho \mathbf{u} V)_{i,j,l}^{n+1} - (\rho \mathbf{u} V)_{i,j,l}^n$$

Nous devons maintenant intégrer les flux sur les différentes surfaces contenues dans le volume de contrôle.

• Intégration sur les surfaces $S_{i+\frac{1}{2}}$ et $S_{i-\frac{1}{2}}$ (direction “x”)

$$\begin{aligned} \Delta t \int_{S_x} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS &= \Delta t \left(\int_{S_{i+\frac{1}{2}}} (\rho u \mathbf{u} + P \mathbf{i}) dS - \int_{S_{i-\frac{1}{2}}} (\rho u \mathbf{u} + P \mathbf{i}) dS \right) \\ &= \Delta t \left\{ \begin{aligned} & \left(\{(\rho u^2 + P)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho u^2 + P)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{i} \\ & + (P_s^* S_S)_{i+\frac{1}{2}} - (P_s^* S_S)_{i-\frac{1}{2}} \\ & + \left(\{(\rho uv)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho uv)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{j} \\ & + \left(\{(\rho uw)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho uw)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{l} \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

I.2. Modèle d'Écoulement en Milieu Hétérogène

• Intégration sur les surfaces $S_{j+\frac{1}{2}}$ et $S_{j-\frac{1}{2}}$ (direction “y”)

$$\begin{aligned} \Delta t \int_{S_y} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS &= \Delta t \left(\int_{S_{j+\frac{1}{2}}} (\rho v \mathbf{u} + P \mathbf{j}) dS - \int_{S_{j-\frac{1}{2}}} (\rho v \mathbf{u} + P \mathbf{j}) dS \right) \\ &= \Delta t \left\{ \begin{aligned} &\left(\{(\rho uv)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho uv)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{i} \\ &+ \left(\{(\rho v^2 + P)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho v^2 + P)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + (P_s^* S_S)_{j+\frac{1}{2}} - (P_s^* S_S)_{j-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{j} \\ &+ \left(\{(\rho vw)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho vw)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{l} \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

• Intégration sur les surfaces $S_{l+\frac{1}{2}}$ et $S_{l-\frac{1}{2}}$ (direction “z”)

$$\begin{aligned} \Delta t \int_{S_z} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS &= \Delta t \left(\int_{S_{l+\frac{1}{2}}} (\rho w \mathbf{u} + P \mathbf{l}) dS - \int_{S_{l-\frac{1}{2}}} (\rho w \mathbf{u} + P \mathbf{l}) dS \right) \\ &= \Delta t \left\{ \begin{aligned} &\left(\{(\rho uw)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho uw)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{i} \\ &+ \left(\{(\rho vw)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho vw)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{j} \\ &+ \left(\{(\rho w^2 + P)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho w^2 + P)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \right. \\ &\quad \left. + (P_s^* S_S)_{l+\frac{1}{2}} - (P_s^* S_S)_{l-\frac{1}{2}} \right) \mathbf{l} \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

Nous avons obtenu le bilan des flux traversant les bords de mailles dans les trois directions d'espace. Procédons maintenant à l'intégration des flux sur les surfaces internes au volume de contrôle, en tenant compte du fait que ces surfaces peuvent comporter une partie fluide et une partie solide. Rappelons également qu'un volume de contrôle peut contenir un nombre arbitraire d'objets.

• Intégration sur les surfaces internes

Il faut exprimer l'intégrale suivante,

$$\begin{aligned} \Delta t \int_{S^0} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS &= \Delta t \int_{S^{0x}} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS + \Delta t \int_{S^{0y}} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS \\ &\quad + \Delta t \int_{S^{0z}} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS \end{aligned}$$

Soit, directement :

$$\Delta t \int_{S^0} (\rho \mathbf{u}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) + P \mathbf{n}) dS = \Delta t \left(\begin{aligned} &\left\{ \begin{aligned} &\sum ((\rho u^2 + P)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho u^2 + P)^* S_{Fd}^{0x} + P_s^* S_{Sg}^{0x} - P_s^* S_{Sd}^{0x}) \\ &+ \sum ((\rho uv)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho uv)^* S_{Fd}^{0y} + (\rho uw)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho uw)^* S_{Fd}^{0z}) \end{aligned} \right\} \mathbf{i} \\ &\left\{ \begin{aligned} &\sum ((\rho v^2 + P)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho v^2 + P)^* S_{Fd}^{0y} + P_s^* S_{Sg}^{0y} - P_s^* S_{Sd}^{0y}) \\ &+ \sum ((\rho uv)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho uv)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho vw)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho vw)^* S_{Fd}^{0z}) \end{aligned} \right\} \mathbf{j} \\ &\left\{ \begin{aligned} &\sum ((\rho w^2 + P)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho w^2 + P)^* S_{Fd}^{0z} + P_s^* S_{Sg}^{0z} - P_s^* S_{Sd}^{0z}) \\ &+ \sum ((\rho uv)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho uv)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho vw)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho vw)^* S_{Fd}^{0y}) \end{aligned} \right\} \mathbf{l} \end{aligned} \right). \end{aligned}$$

I. Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène

Dans la relation précédente, les termes rouges représentent les termes issus de l'intégration des flux sur les surfaces solides des obstacles internes, les termes en bleus sont eux associés aux surfaces fluides (ou perméables) des obstacles. Les flux y sont calculés grâce à l'emploi d'une condition limite adaptée.

• Bilan pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement

En regroupant l'ensemble des termes calculés précédemment, nous pouvons écrire le bilan pour l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$(\rho \mathbf{u} V)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho \mathbf{u} V)_{i,j,l}^n - \Delta t \left(\begin{array}{l} \left\{ \begin{array}{l} \{(\rho u^2 + P)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho u^2 + P)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} + (P_s^* S_S)_{i+\frac{1}{2}} \\ - (P_s^* S_S)_{i-\frac{1}{2}} + \{(\rho uv)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho uv)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \\ + \{(\rho uw)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho uw)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \\ + \sum ((\rho u^2 + P)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho u^2 + P)^* S_{Fd}^{0x} + P_s^* S_{Sg}^{0x} - P_s^* S_{Sd}^{0x}) \\ + \sum ((\rho uv)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho uv)^* S_{Fd}^{0y} + (\rho uw)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho uw)^* S_{Fd}^{0z}) \end{array} \right\} \mathbf{i} \\ \left\{ \begin{array}{l} \{(\rho v^2 + P)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho v^2 + P)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} + (P_s^* S_S)_{j+\frac{1}{2}} \\ - (P_s^* S_S)_{j-\frac{1}{2}} + \{(\rho uv)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho uv)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} \\ + \{(\rho vw)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho vw)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \\ + \sum ((\rho v^2 + P)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho v^2 + P)^* S_{Fd}^{0y} + P_s^* S_{Sg}^{0y} - P_s^* S_{Sd}^{0y}) \\ + \sum ((\rho uv)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho uv)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho vw)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho vw)^* S_{Fd}^{0z}) \end{array} \right\} \mathbf{j} \\ \left\{ \begin{array}{l} \{(\rho w^2 + P)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho w^2 + P)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} + (P_s^* S_S)_{l+\frac{1}{2}} \\ - (P_s^* S_S)_{l-\frac{1}{2}} + \{(\rho uw)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho uw)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} \\ + \{(\rho vw)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho vw)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \\ + \sum ((\rho w^2 + P)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho w^2 + P)^* S_{Fd}^{0z} + P_s^* S_{Sg}^{0z} - P_s^* S_{Sd}^{0z}) \\ + \sum ((\rho uw)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho uw)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho vw)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho vw)^* S_{Fd}^{0y}) \end{array} \right\} \mathbf{l} \end{array} \right).$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement est maintenant discrétisée, notons qu'il s'agit ici d'une équation vectorielle.

I.2.3 Intégration de l'Equation de Conservation de l'Energie Totale

L'équation de conservation de l'énergie totale étant une équation scalaire, à l'instar de l'équation de conservation de la masse, l'intégration s'avère plus aisée. On procède de manière similaire à ce qui a été réalisé précédemment.

$$\int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho E}{\partial t} dV dt + \int_{\Delta t} \int_S (\rho E + P) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt = 0$$

L'utilisation de la définition de la valeur moyenne dans une cellule nous permet d'exprimer l'intégrale de la dérivée temporelle :

$$\int_{\Delta t} \int_V \frac{\partial \rho E}{\partial t} dV dt = (\rho E V)_{i,j,l}^{n+1} - (\rho E V)_{i,j,l}^n$$

I.2. Modèle d'Écoulement en Milieu Hétérogène

• Intégration des flux sur les surfaces aux bords de maille

L'intégration des flux sur les surfaces en bords de maille dans les trois directions d'espace donne :

$$\int_{\Delta t} \int_{S_S + S_F} (\rho E + P) \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt = \Delta t \left\{ \begin{array}{l} (\rho E u + P u)^* S_{F,i+\frac{1}{2}} - (\rho E u + P u)^* S_{F,i-\frac{1}{2}} \\ + (\rho E v + P v)^* S_{F,j+\frac{1}{2}} - (\rho E v + P v)^* S_{F,j-\frac{1}{2}} \\ + (\rho E w + P w)^* S_{F,l+\frac{1}{2}} - (\rho E w + P w)^* S_{F,l-\frac{1}{2}} \end{array} \right\}$$

• Intégration des flux sur les surfaces internes

$$\int_{\Delta t} \int_{S_s^0 + S_f^0} \rho E \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS dt = \Delta t \left\{ \begin{array}{l} \sum ((\rho E u + P u)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho E u + P u)^* S_{Fd}^{0x}) \\ + \sum ((\rho E v + P v)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho E v + P v)^* S_{Fd}^{0y}) \\ + \sum ((\rho E w + P w)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho E w + P w)^* S_{Fd}^{0z}) \end{array} \right\}$$

Les flux s'annulent au niveau des parois solides en raison de la condition de glissement. Ainsi, seules les surfaces perméables contribuent au bilan des flux.

• Bilan pour l'Equation de Conservation de l'Energie Totale

$$(\rho EV)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho EV)_{i,j,l}^n - \Delta t \left\{ \begin{array}{l} (\rho E u + P u)^* S_{F,i+\frac{1}{2}} - (\rho E u + P u)^* S_{F,i-\frac{1}{2}} \\ + (\rho E v + P v)^* S_{F,j+\frac{1}{2}} - (\rho E v + P v)^* S_{F,j-\frac{1}{2}} \\ + (\rho E w + P w)^* S_{F,l+\frac{1}{2}} - (\rho E w + P w)^* S_{F,l-\frac{1}{2}} \\ + \sum ((\rho E u + P u)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho E u + P u)^* S_{Fd}^{0x}) \\ + \sum ((\rho E v + P v)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho E v + P v)^* S_{Fd}^{0y}) \\ + \sum ((\rho E w + P w)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho E w + P w)^* S_{Fd}^{0z}) \end{array} \right\}.$$

On rappelle que les grandeurs ayant l'exposant “*” correspondent aux solutions du problème de Riemann entre deux états (par exemple entre deux mailles successives dans une direction donnée). Pour les flux en bords de maille, on calcule la solution du problème de Riemann classique, en utilisant un solveur exact ou encore un solveur approché, par exemple le solveur HLLC [73],[74]. En ce qui concerne les volumes internes aux mailles, les flux solutions seront calculés en utilisant la condition limite appropriée. Un “demi-problème de Riemann” sera résolu dans le cas où le volume interne comporte des parois solides. Il sera connecté à une condition limite de type réservoir si les surfaces sont perméables, dans ce cas, un “problème de Riemann spécial” sera résolu. Nous définirons en détail les demi-problèmes de Riemann. ainsi que les problèmes de Riemann spéciaux dans le chapitre consacré aux conditions limites.

I.2.4 Récapitulatif du Modèle d'Écoulement en Milieu Hétérogène

Nous résumons ci-après les équations discrétisées obtenues après intégration du système (I.1) sur un volume de contrôle quelconque (maille (i, j, l) du domaine discrétisé).

$$\left\{ \begin{array}{l}
 (\rho V)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho V)_{i,j,l}^n - \Delta t \left(\begin{array}{l}
 \{(\rho u)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho u)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} + \{(\rho v)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} \\
 - \{(\rho v)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} + \{(\rho w)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho w)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \\
 + \sum \left[(\rho u)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho u)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho v)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho v)^* S_{Fd}^{0y} \right] \\
 + \sum \left[(\rho w)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho w)^* S_{Fd}^{0z} \right]
 \end{array} \right) \\
 (\rho u V)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho u V)_{i,j,l}^n - \Delta t \left(\begin{array}{l}
 \{(\rho u^2 + P)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho u^2 + P)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} + (P_s^* S_S)_{i+\frac{1}{2}} \\
 - (P_s^* S_S)_{i-\frac{1}{2}} + \{(\rho uv)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho uv)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \\
 + \{(\rho uw)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho uw)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \\
 + \sum \left((\rho u^2 + P)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho u^2 + P)^* S_{Fd}^{0x} + P_s^* S_{Sg}^{0x} - P_s^* S_{Sd}^{0x} \right) \\
 + \sum \left((\rho uv)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho uv)^* S_{Fd}^{0y} + (\rho uw)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho uw)^* S_{Fd}^{0z} \right)
 \end{array} \right) \\
 (\rho v V)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho v V)_{i,j,l}^n - \Delta t \left(\begin{array}{l}
 \{(\rho v^2 + P)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho v^2 + P)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} + (P_s^* S_S)_{j+\frac{1}{2}} \\
 - (P_s^* S_S)_{j-\frac{1}{2}} + \{(\rho uv)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho uv)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} \\
 + \{(\rho vw)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho vw)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} \\
 + \sum \left((\rho v^2 + P)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho v^2 + P)^* S_{Fd}^{0y} + P_s^* S_{Sg}^{0y} - P_s^* S_{Sd}^{0y} \right) \\
 + \sum \left((\rho uv)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho uv)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho vw)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho vw)^* S_{Fd}^{0z} \right)
 \end{array} \right) \\
 (\rho w V)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho w V)_{i,j,l}^n - \Delta t \left(\begin{array}{l}
 \{(\rho w^2 + P)^* S_F\}_{l+\frac{1}{2}} - \{(\rho w^2 + P)^* S_F\}_{l-\frac{1}{2}} + (P_s^* S_S)_{l+\frac{1}{2}} \\
 - (P_s^* S_S)_{l-\frac{1}{2}} + \{(\rho uw)^* S_F\}_{i+\frac{1}{2}} - \{(\rho uw)^* S_F\}_{i-\frac{1}{2}} \\
 + \{(\rho vw)^* S_F\}_{j+\frac{1}{2}} - \{(\rho vw)^* S_F\}_{j-\frac{1}{2}} \\
 + \sum \left((\rho w^2 + P)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho w^2 + P)^* S_{Fd}^{0z} + P_s^* S_{Sg}^{0z} - P_s^* S_{Sd}^{0z} \right) \\
 + \sum \left((\rho uw)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho uw)^* S_{Fd}^{0x} + (\rho vw)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho vw)^* S_{Fd}^{0y} \right)
 \end{array} \right) \\
 (\rho EV)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho EV)_{i,j,l}^n - \Delta t \left(\begin{array}{l}
 (\rho Eu + Pu)^* S_{F,i+\frac{1}{2}} - (\rho Eu + Pu)^* S_{F,i-\frac{1}{2}} \\
 + (\rho Ev + Pv)^* S_{F,j+\frac{1}{2}} - (\rho Ev + Pv)^* S_{F,j-\frac{1}{2}} \\
 + (\rho Ew + Pw)^* S_{F,l+\frac{1}{2}} - (\rho Ew + Pw)^* S_{F,l-\frac{1}{2}} \\
 + \sum \left((\rho Eu + Pu)^* S_{Fg}^{0x} - (\rho Eu + Pu)^* S_{Fd}^{0x} \right) \\
 + \sum \left((\rho Ev + Pv)^* S_{Fg}^{0y} - (\rho Ev + Pv)^* S_{Fd}^{0y} \right) \\
 + \sum \left((\rho Ew + Pw)^* S_{Fg}^{0z} - (\rho Ew + Pw)^* S_{Fd}^{0z} \right)
 \end{array} \right)
 \end{array} \right. \quad (I.12)$$

I.3 Validations Expérimentales

Afin de valider notre modèle, nous confrontons ici des résultats expérimentaux obtenus par l'équipe DTF de l'IUSTI, dirigé par le professeur L. Houas, avec les résultats numériques issus du code de calcul 3D sur les mêmes configurations (les signaux expérimentaux sont issus de [38]). Nous étudions l'interaction d'ondes de choc de différentes amplitudes générées dans un tube à choc de section carrée sur quatre plaques planes de sections variables. Le dispositif expérimental est schématisé sur la Figure I.9. Le tube à choc de section carrée $8\text{cm} \times 8\text{cm}$ possède deux chambres de longueurs respectives 0.75 m (chambre haute pression) et 3 m (chambre basse pression). Quatre capteurs de pression (désignés par C_1 , C_2 , C_3 et C_4) sont disposés de la manière suivante dans le tube à choc :

$$x_{C1} = 2.63\text{m}, \quad x_{C2} = 2.97\text{m}, \quad x_{C3} = 3.19\text{m} \quad \text{et} \quad x_{C4} = 3.52\text{m}.$$

I.3. Validations Expérimentales

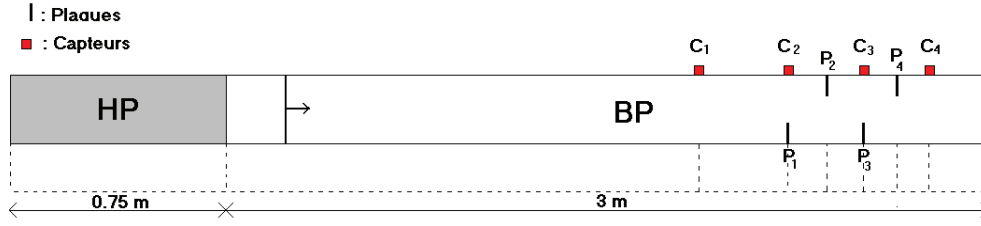


Figure I.9 – Schéma du dispositif expérimental. La chambre haute pression est désignée par “HP”, la chambre basse pression par “BP”.

D’autres capteurs sont utilisés afin de déterminer la vitesse du son dans la chambre haute pression ainsi que la vitesse du choc incident, permettant de calculer le nombre de Mach de ce dernier. Ces diverses grandeurs permettent de calculer les états initiaux servant de conditions initiales au code de calcul. Les positions des plaques sont les suivantes :

$$x_{P1} = 2.97\text{m}, \quad x_{P2} = 3.08\text{m}, \quad x_{P3} = 3.19\text{m} \quad \text{et} \quad x_{P4} = 3.41\text{m}.$$

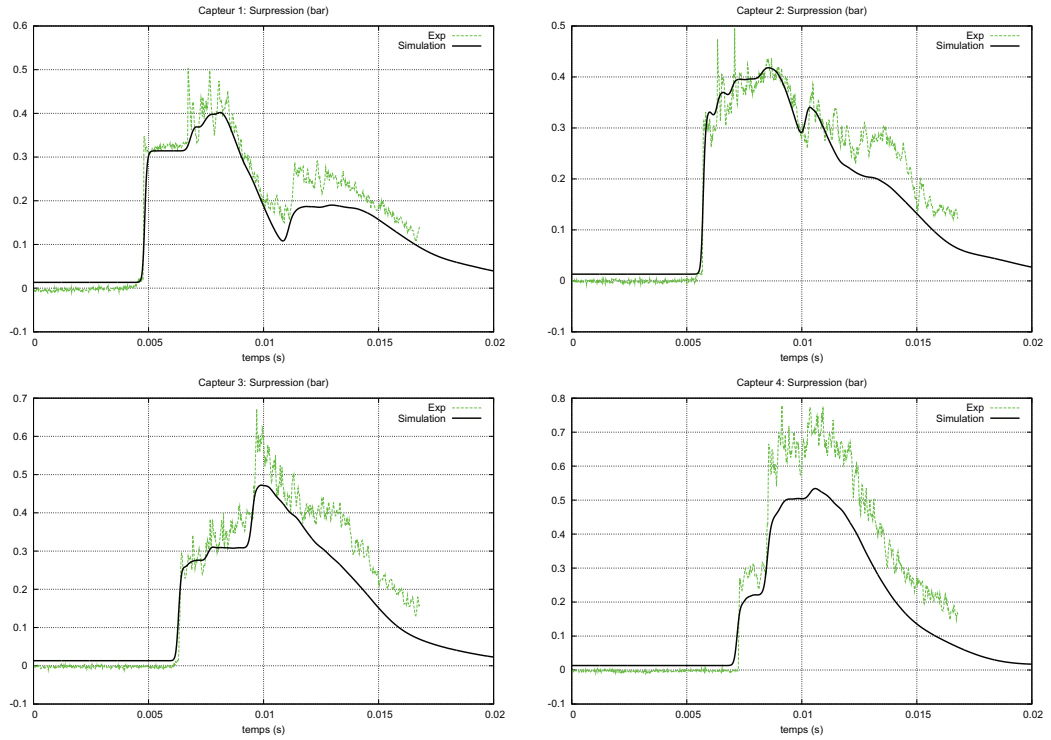


Figure I.10 – Signaux de surpression mesurés au niveau des capteurs 1,2,3 et 4. Dans la configuration A0.5 et $M_{ODC} = 1.1$. En rose, sont représentés les signaux expérimentaux. En bleu, les signaux résultant de la simulation numérique. Le temps total d’intégration est ici de 20 ms (temps physique)

I. Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène

Sur les Figures I.10 et I.11, sont représentés les résultats obtenus pour deux amplitudes différentes de choc : $M_{ODC} = 1.1$, $M_{ODC} = 1.5$ et deux tailles de plaques : A0.25 (un quart de la section du tube à choc) et A0.5 (la moitié de la section du tube à choc). La configuration étudiée nous permet l'utilisation d'un maillage bidimensionnel comportant 750×16 cellules pour ce calcul.

Pour chaque configuration étudiée, nous présentons quatre graphes illustrant l'évolution temporelle de la pression relative par rapport à la pression atmosphérique mesurée au niveau de chaque capteur. En raison de la faible épaisseur des plaques, celles-ci sont modélisées par des obstacles internes aux mailles de calcul.

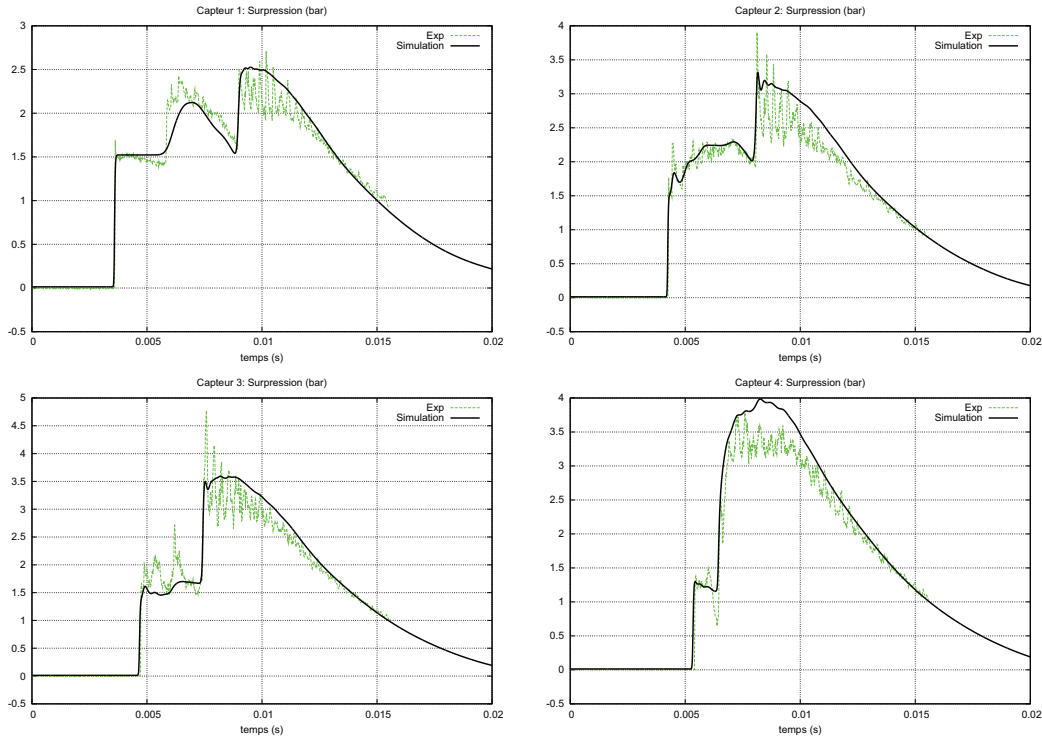


Figure I.11 – Signaux de surpression mesurés au niveau des capteurs 1,2,3 et 4. Dans la configuration A0.25 et $M_{ODC} = 1.5$. En rose, sont représentés les signaux expérimentaux. En vert, les signaux résultant de la simulation numérique. Le temps total d'intégration est ici de 20 ms (temps physique)

On constate un excellent accord entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques sur l'ensemble des configurations. La dynamique des ondes se propageant dans le milieu est correctement reproduite par les simulations effectuées. Des différences sont néanmoins visibles, elles sont essentiellement dues au processus de moyenne effectués dans les cellules de calcul. En effet, les signaux de pression mesurés expérimentalement correspondent à des pressions locales (au niveau des parois), alors que les signaux numériques correspondent à des signaux moyennés, par définition.

I.3. Validations Expérimentales

Nous allons cependant étudier les signaux obtenus pour différents maillages, ainsi que ceux obtenus lorsque l'on choisit de mailler les obstacles. Cette comparaison est présentée sur la Figure I.12 et effectuée pour l'une des deux configurations.

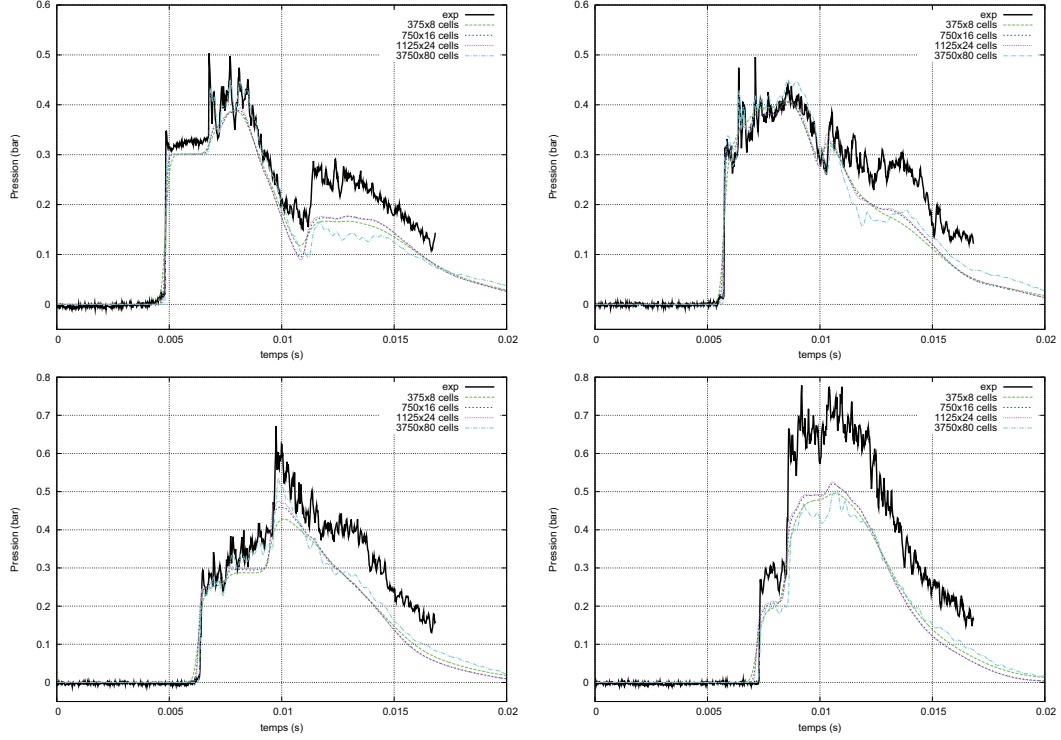


Figure I.12 – Signaux de surpression mesurés au niveau des capteurs 1,2,3 et 4 obtenus avec 4 maillages différents. Dans la configuration A0.5 et $M_{ODC} = 1.1$

La Figure I.12 nous permet d'apprécier l'influence du maillage sur les signaux de surpression. On constate que pour les 3 maillages les plus grossiers, les signaux ne présentent que très peu de différences (pour les niveaux de pression). Pour le maillage le plus fin, les plaques ne sont pas modélisées par des obstacles internes aux mailles de calcul, mais par des mailles solides (afin de s'approcher d'un calcul DNS). Quelque soit le maillage utilisé, les signaux de surpression obtenus au niveau du capteur 4 sont en deçà de la réalité.

La formulation (I.12) nous permet de travailler sur des géométries complexes sans être contraint d'utiliser des maillages très fins, ni de modéliser complètement tous les obstacles. Ceci nous permet de travailler sur de larges échelles de temps et d'espace. La topographie des milieux pourra être prise en compte. En particulier, des données d'élévation numériques pourront être employées pour modéliser la topographie d'un site. Des précisions sur la manière dont sont traitées ces données d'élévations sont exposées dans ce qui suit.

I.4 Prise en Compte de la Topographie

La topographie du terrain est un élément pouvant modifier catégoriquement la dispersion d'espèces gazeuses, liquides ou solides. Une méthodologie a donc été élaborée afin de prendre en compte facilement la topographie du domaine considéré. Un utilitaire de prétraitement a donc été développé, celui-ci permet la transformation de fichiers ASCII contenant des données numériques d'élévation en fichiers lisibles par le code de calcul. Il devra être capable de reproduire les différentes topographies sur n'importe quel maillage cartésien. Sur la figure I.13, un diagramme présente les différentes étapes nécessaires au traitement de la topographie.

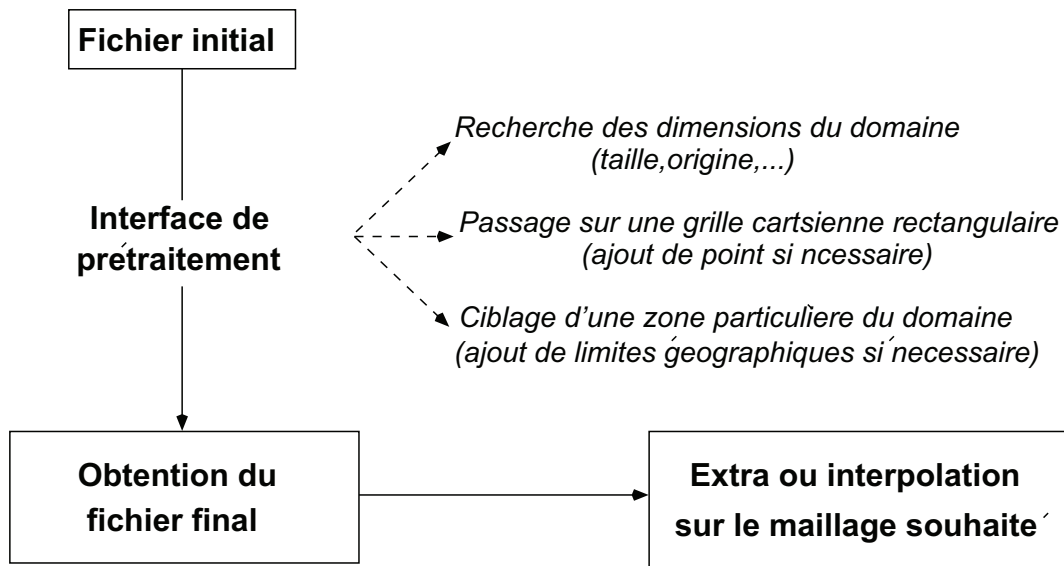


Figure I.13 – Diagramme résumant les étapes de traitement des fichiers contenant les données numériques d'élévation.

I.4.1 Fichiers Initiaux

Deux types de fichiers peuvent être transformés par l'utilitaire. Premièrement, on peut utiliser des fichiers disponibles gratuitement sur le site de l'Institut Géographique National. Ces fichiers contiennent les données d'élévation associées à la France métropolitaine et d'outre mer, le pas d'espace variant de 250 m à 1 km, nous les appellerons "*fichier.xyz*". Il est également possible d'utiliser des fichiers "*dem*" (digital elevation model), qui sont largement disponibles sur le web (par exemple sur le site de l'USGS (U.S. Geological Survey), dont le pas d'espace peut varier de 1 seconde d'arc (environ 30 m) à 3 secondes d'arc (soit 92.5 m). Cependant, si l'on choisit ce type de fichier, il est nécessaire de les exporter au préalable sous un autre format (ASCII). La première étape consiste en la reconstruction du fichier (ajout de points si nécessaire) et suit la méthodologie suivante :

I.4. Prise en Compte de la Topographie

- Le fichier d’entrée est lu une première fois afin d’obtenir les dimensions et les valeurs extrêmes de x et y .
- Il est ensuite possible de choisir des limites géographiques différentes et ainsi de cibler une zone particulière de la carte.
- Le fichier est lu une seconde fois afin de cibler les endroits où des points seraient manquants afin de les y ajouter.
- Enfin le fichier contenant la carte réduite est écrit par l’utilitaire.

Le fichier ainsi obtenu est lisible par le code de calcul tridimensionnel qui procédera à l’interpolation (ou extrapolation) des points sur sa propre grille.

I.4.2 Procédure d’Interpolation

Nous disposons à ce stade d’un fichier contenant les altitudes $h(x, y)$, ainsi que le nombre de points ($\mathbf{n}_x$, $\mathbf{n}_y$) dans les directions x et y respectivement. Notre but est d’obtenir les altitudes $h(x, y)$ sur un nouveau maillage ($\mathbf{Im}$, $\mathbf{Jm}$).

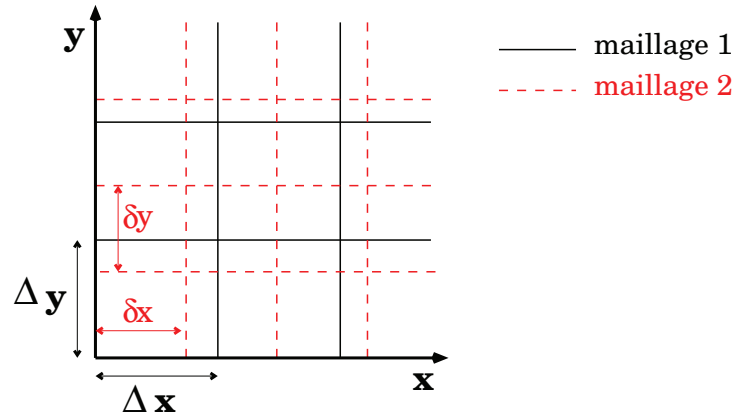


Figure I.14 – Représentation des **maillage 1** et **maillage 2**

On procède de la façon suivante :

- Ouverture des fichiers contenant les coordonnées (x, y) de chaque point et les altitudes associées.
 1. Lecture des entiers $\mathbf{n}_x$ et $\mathbf{n}_y$ correspondant aux nombres de points dans les deux directions.
 2. Lecture des coordonnées de chaque point $(x_{iu,ju}, y_{iu,ju}$ et $z_{iu,ju})$,

$$iu = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{n}_x \quad \text{et} \quad ju = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{n}_y.$$

I. Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène

3. L'origine du repère ne se trouvant pas forcément en $(0,0)$, il est nécessaire de rechercher cette origine et de décaler notre repère de façon à se ramener au cas $(x_0, y_0)=(0,0)$.

- Géométrie du *nouveau* maillage.

1. Connaissant les coordonnées des points sur l'*ancien* maillage, il est aisé d'obtenir les dimensions totales du domaines L_x et L_y , ce qui nous permet d'avoir accès au pas d'espace associé à l'*ancien* maillage. Nous appellerons **maillage 1**, l'*ancien* maillage et **maillage 2** le *nouveau* maillage (illustré sur la figure I.14).

$$\textbf{Maillage 1 : } \Delta x = L_x / \mathbf{n}_x \quad \Delta y = L_y / \mathbf{n}_y$$

$$\textbf{Maillage 2 : } \delta x = L_x / \mathbf{i} \mathbf{m} \quad \delta y = L_y / \mathbf{j} \mathbf{m}$$

2. Nous sommes ainsi en mesure de calculer les positions $xx_{i,j}$ et $yy_{i,j}$ associées au **maillage 2**

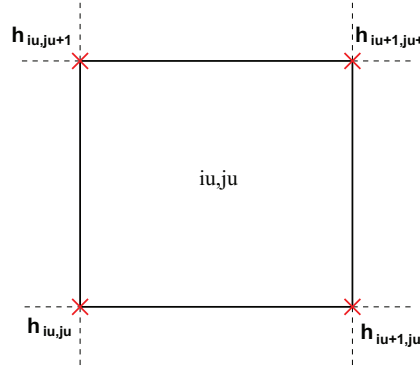


Figure I.15 – Représentation d'une maille du **maillage 1**. On connaît les altitudes à chaque noeud sur ce maillage.

- Interpolation des altitudes sur le **maillage 2**.

1. Calcul des pentes dans les directions x et y . Pour chaque couple (iu, ju) , on calcule deux pentes par direction,

$$\begin{aligned} a_{1,x} &= \frac{h_{iu+1,ju+1} - h_{iu,ju+1}}{\Delta x}, & a_{2,x} &= \frac{h_{iu+1,ju} - h_{iu,ju}}{\Delta x}, \\ a_{1,y} &= \frac{h_{iu+1,ju+1} - h_{iu+1,ju}}{\Delta y}, & a_{2,y} &= \frac{h_{iu,ju+1} - h_{iu+1,ju}}{\Delta y}, \\ & iu = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{n}_x \text{ et } ju = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{n}_y. \end{aligned}$$

Un limiteur de pente est utilisé choisissant la pente la plus faible des deux (notées $\alpha_{iu,ju}$ dans la direction $\mathbf{x}$ et $\beta_{iu,ju}$ dans la direction $\mathbf{y}$)

I.4. Prise en Compte de la Topographie

2. Nous pouvons procéder à l'interpolation des altitudes sur le **maillage 2**. Pour chaque couple (i, j) avec,

$$i = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{im} \quad \text{et} \quad j = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{jm},$$

on cherche les indices (iu, ju) avec,

$$iu = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{n}_x \quad \text{et} \quad ju = 1, 2, 3, \dots, \mathbf{n}_y,$$

tels que,

$$\begin{aligned} x_{iu,ju} &< xx_{i,j} < x_{iu+1,ju}, \\ y_{iu,ju} &< yy_{i,j} < y_{iu,ju+1}. \end{aligned}$$

Nous pourrions alors calculer $alt(i, j)$, correspondant à l'altitude interpolée au noeud (i, j) ,

$$alt(i, j) = h_{iu,ju} + \alpha_{iu,ju}(xx_{i,j} - x_{iu,ju}) + \beta_{iu,ju}(yy_{i,j} - y_{iu,ju}).$$

3. Pour obtenir l'altitude au centre de maille, il suffit de faire la moyenne des altitudes calculées au niveau des quatre noeuds associés à chacune des mailles de calcul.

$$HH_{i,j} = \frac{alt(i, j) + alt(i, j + 1) + alt(i + 1, j) + alt(i + 1, j + 1)}{4}$$

I.4.3 Exemples

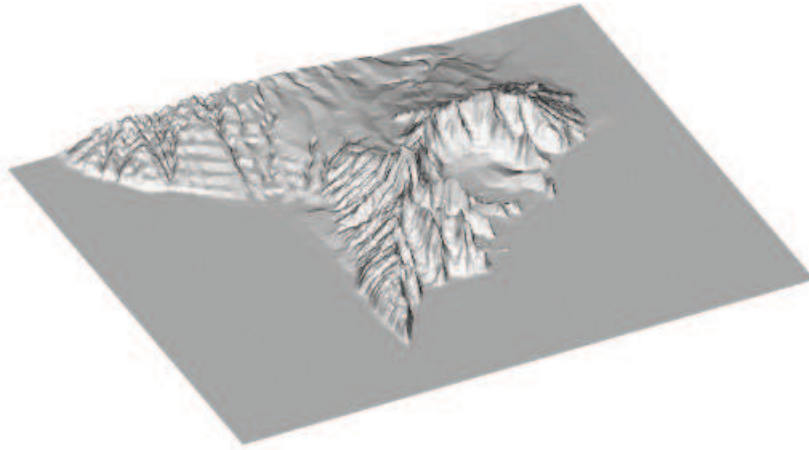


Figure I.16 – Représentation des altitudes extrapolées d'une partie de l'île de Oahu, sur un maillage plus grossier que le maillage original, $Im = 135$, $Jm = 97$. ($\mathbf{Im} = \mathbf{n}_x/4$, $\mathbf{Jm} = \mathbf{n}_y/4$)

Dans cette section, nous présentons quelques résultats obtenus sur différents maillages, les figures I.16 et I.17 présentent une partie de l'île d'Oahu (de l'archipel de Hawaï) que l'on a représenté après traitement, sur un maillage plus grossier ainsi que sur un maillage plus

I. Modèle d'Écoulement Compressible en Milieu Hétérogène

fin. La totalité de la carte a été représentée, nous n'avons pas ciblé de zone particulière. Ceci nous permet d'illustrer le traitement de la topographie, celui ci peut être assez long (plusieurs minutes suivant le nombre de points contenu dans le fichier *altitude.out*), mais cette étape fait partie de l'initialisation et ne s'opère donc qu'une seule fois au cours du calcul.

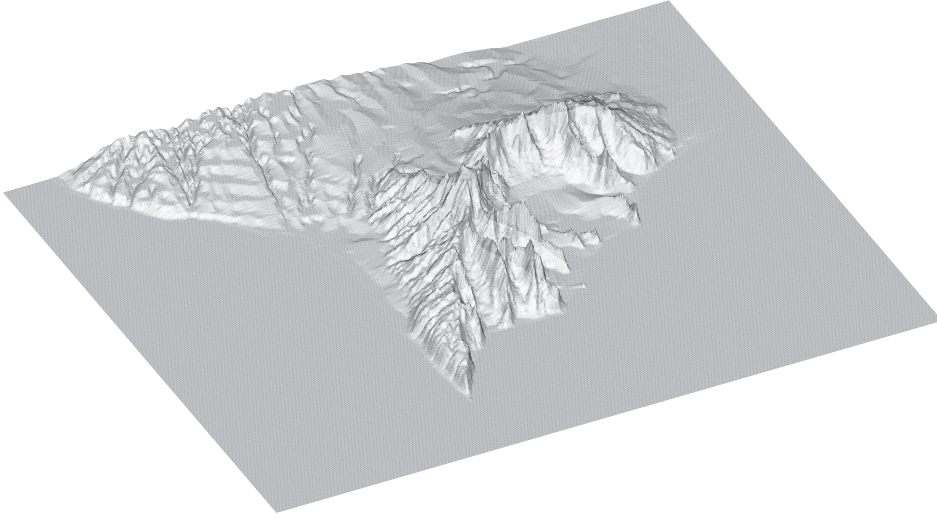


Figure I.17 – Représentation des altitudes interpolées d'une partie de l'île de Oahu, sur un maillage plus fin que le maillage original, $I_m = 1082$, $J_m = 682$. ($\mathbf{I}_m = 2\mathbf{n}_x$, $\mathbf{J}_m = 2\mathbf{n}_y$)

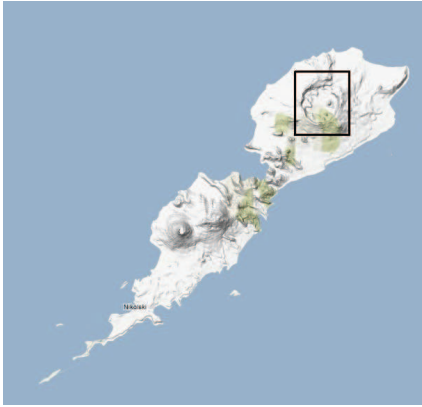


Figure I.18 – Ile d'Umnak, nous avons encadré en noir, la zone sur laquelle nous voulons zoomer.

Comme nous l'avons notifié plus haut, il est possible de ne cibler qu'une partie de la carte. C'est ce qui est fait sur la figure I.19. Nous avons utilisé le fichier associé à l'île d'Umnak (Alaska, U.S.A). Sur la figure I.18, nous présentons l'île entière, ainsi que la zone que l'on souhaite représenter. Celle-ci est représentée sur 3 maillages différents, sur le maillage original, sur un maillage plus fin ainsi que sur un maillage plus grossier.

I.4. Prise en Compte de la Topographie

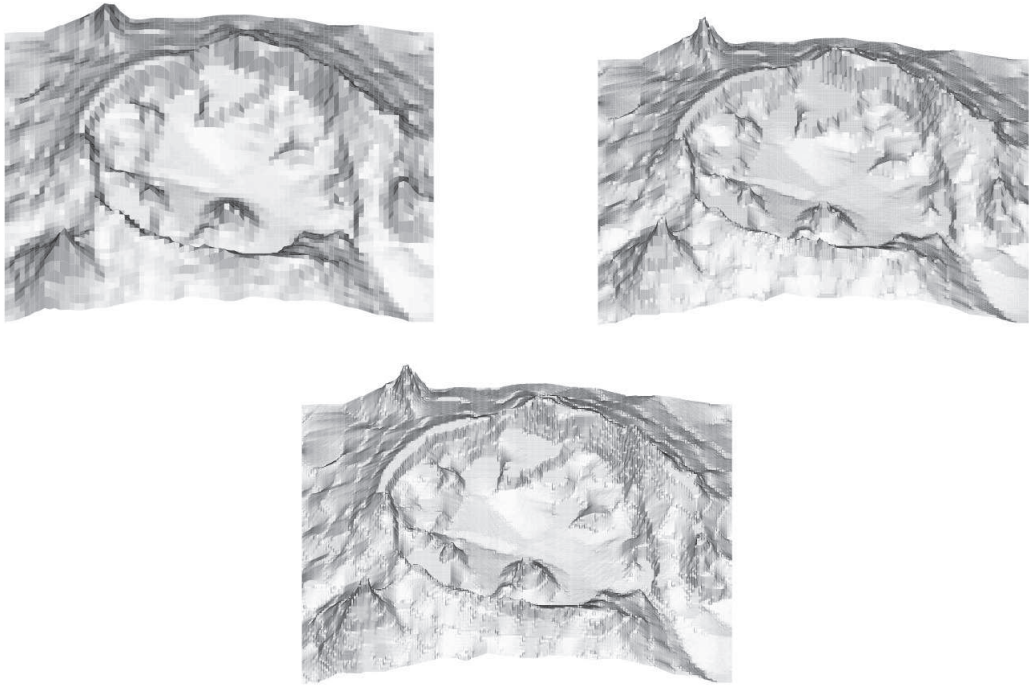


Figure I.19 – Zoom sur le mont Okmok de l’île d’Umnak en Alaska, représenté sur 3 maillages différents, le maillage le plus grossier se trouvant le plus à gauche et le plus fin, le plus à droite. Le maillage originale se situe au milieu.

I.4.4 Maillage et Domaine de Calcul

Une fois connues les altitudes aux centres de mailles, 3 types de mailles sont utilisées pour la modélisation de la topographie des milieux (Figure I.20).

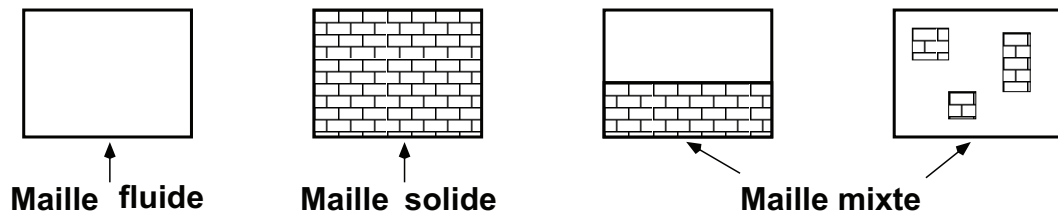


Figure I.20 – Différentes mailles de calcul utilisées pour modéliser le relief.

Les mailles contenant uniquement du solide sont des mailles inertes, c’est à dire que les équations ne sont pas résolues sur celles-ci, elles sont considérées comme des limites, que l’on traite comme des parois imperméables. Nous utilisons également des mailles mixtes contenant une partie solide et une partie fluide. Enfin, des mailles complètement fluides sont utilisées. Avec ces trois type de mailles, nous serons en mesure de modéliser n’importe quelle topographie (dans la limite de l’utilisation d’un maillage cartésien).

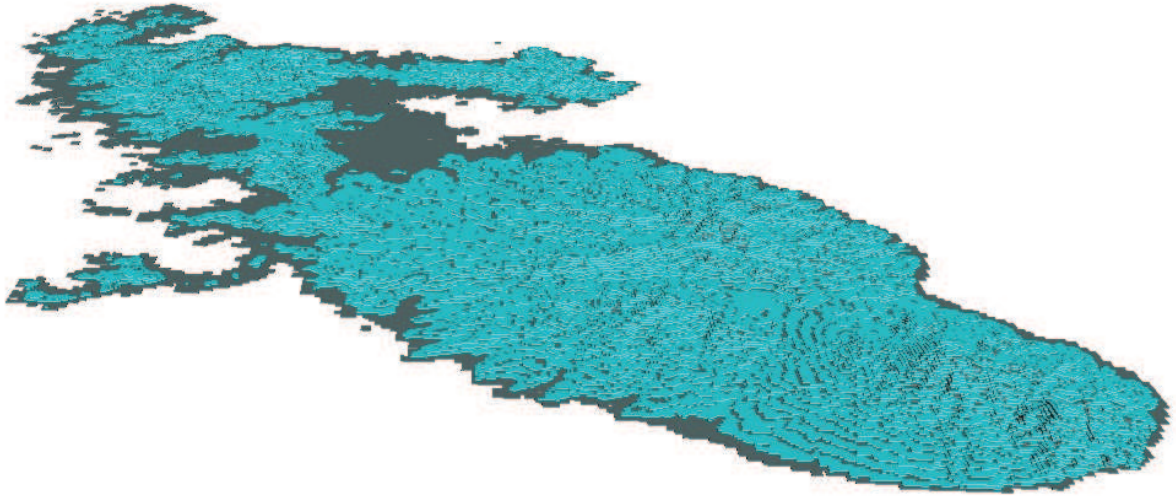


Figure I.21 – Ile de la Martinique, les mailles solides sont représentées en vert, les mailles mixtes en vert clair.

Sur la figure I.21, nous avons représenté les mailles solides ainsi que les mailles mixtes dans le cas de la modélisation de la Martinique.

Nous avons introduit le modèle de base pour les écoulements en milieu hétérogène, ainsi que la manière dont la topographie des milieux est prise en compte. Nous pouvons maintenant introduire dans le modèle d'autres phénomènes afin de se rapprocher de situations réalistes.

Chapitre II

Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion

La prise en compte des phénomènes de dispersion nécessite la possibilité de décrire l'évolution des champs de concentration de polluants gazeux. Dans la partie précédente, nous avons présenté et étudié les équations d'Euler des fluides compressibles fermées par la loi d'état des gaz parfaits. Le système ainsi formé permet de décrire la dynamique d'un gaz parfait compressible constitué d'une seule espèce.

Cette espèce peut néanmoins être représentative d'un mélange de plusieurs constituants. Par exemple, dans les simulations associées aux Figures I.10 et I.11, l'air est représenté globalement par une densité, une énergie et un coefficient polytropique global. Ainsi, les constituants de l'air ne sont pas explicitement représentés. Ce type d'approche et de modèle convient tant que l'on ne s'intéresse pas à des phénomènes impliquant directement la composition du gaz mis en jeu.

Dans le cadre de ce travail, on s'intéresse en particulier aux phénomènes de diffusion d'espèces, permettant notamment d'aborder la problématique de la dispersion de polluants. Pour ce faire, on utilise une loi de fermeture différente pour le système des équations d'Euler : une loi d'état multi-espèces, dépendant explicitement de la composition du gaz via les fractions massiques des constituants. L'expression d'une telle loi est établie ci-après. Il faut de même pouvoir décrire l'évolution du mélange des constituants, ceci est réalisé par l'ajout d'une équation de transport pour chacune des espèces contenue dans le mélange gazeux.

D'autre part, des termes diffusifs seront ajoutés au système. Nous sommes préalablement amenés à introduire un schéma numérique d'ordre élevé pour le suivi des champs de concentration afin de pallier aux problèmes de la diffusion numérique. En effet, les schémas à l'ordre un dégradent très rapidement les profils discontinus. Dans cette optique, on introduit le schéma ADER permettant la construction de schémas numériques d'ordre élevé en temps et en espace.

II.1 Les Equations d'Euler Multi-Espèces

Dans cette section, nous présentons la construction du système permettant de décrire la dynamique d'un gaz constitué de plusieurs espèces. Chacune de ces espèces est caractérisée par sa fraction massique et ses propres paramètres de loi d'état.

II.1.1 Hypothèses

Considérons un mélange gazeux constitué de N espèces chimiques et soit Y_k la fraction massique de l'espèce k . Alors :

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho}, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (\text{II.1})$$

On ajoute la contrainte suivante (condition de saturation),

$$\sum_{k=1}^N Y_k = 1 \quad (\text{II.2})$$

Formulons maintenant les hypothèses émises pour la construction de la loi d'état :

- La pression dans le mélange est régit par la loi de Dalton :

$$\sum_{k=1}^N P_k = P \quad (\text{II.3})$$

- Toutes les espèces ont la même température et se déplacent à la même vitesse :

$$\begin{aligned} T_1 &= T_2 = \dots = T_N = T \\ \mathbf{u}_1 &= \mathbf{u}_2 = \dots = \mathbf{u}_N = \mathbf{u} \end{aligned}$$

- Les chaleurs spécifiques sont constantes pour chaque espèce.

$$C_{vk} = \text{constante}$$

II.1.2 Variables de Mélange

Chacune des espèces obéit à sa propre loi d'état :

$$e_k(P_k, \rho_k) = \frac{P_k}{\rho_k(\gamma_k - 1)} = C_{vk}T$$

avec P_k la pression partielle de l'espèce k . Cette dernière relation nous permet d'exprimer P_k :

$$P_k = \rho_k C_{vk} (\gamma_k - 1) T$$

II.1. Les Equations d'Euler Multi-Espèces

La pression du mélange est alors obtenue grâce à la relation (II.3). Ainsi :

$$P = \rho T \sum_{k=1}^N Y_k C_{vk} (\gamma_k - 1) \implies \frac{1}{\rho} = \frac{T}{P} \sum_{k=1}^N Y_k C_{vk} (\gamma_k - 1)$$

L'énergie interne de mélange est donnée par la relation :

$$e = \sum_{k=1}^N Y_k e_k = T \sum_{k=1}^N Y_k C_{vk}$$

On peut définir des variables thermodynamiques de mélange, dépendantes des fractions massiques :

$$C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{vk}, \quad C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{pk}, \quad \gamma = \frac{C_p}{C_v}$$

Ainsi, on a :

$$P = \rho T (C_p - C_v) = \rho T (\gamma - 1) C_v \quad \text{et} \quad e = C_v T$$

II.1.3 Equations d'évolution des fractions massiques

La masse de chacune des espèces présentes dans l'écoulement doit se conserver :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}) = 0 \quad (k = 1, \dots, N)$$

En sommant sur le nombre d'espèces, on retrouve l'équation de conservation de la masse totale du mélange. Nous souhaitons maintenant accéder aux équations d'évolution des fractions massiques. On utilise la dérivée particulaire, caractéristique de l'évolution d'une variable le long d'une trajectoire "u" du fluide :

$$\frac{d(.)}{dt} = \frac{\partial(.)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla(.)$$

Ainsi, nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{dY_k}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{\rho_k}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{d\rho_k}{dt} - \frac{\rho_k}{\rho} \frac{d\rho}{dt} \right) \\ \frac{dY_k}{dt} &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{d\rho_k}{dt} + \rho_k \nabla \cdot \mathbf{u} \right) \\ \frac{dY_k}{dt} &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}) \right) = 0 \end{aligned}$$

L'équation d'évolution de la fraction massique d'une espèce est une équation de transport simple, que l'on peut mettre sous forme conservative. Le système complet à résoudre

s'écrit maintenant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) = 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u}) = 0. \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) = 0 \quad k = 1, \dots, N \end{array} \right. \quad (\text{II.4})$$

II.1.4 Equation d'Evolution de l'Entropie de Mélange

Vérifions que le système (II.4) satisfait bien le second principe de la thermodynamique. Si l'on développe l'équation de conservation de l'énergie totale combinée aux équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement, on obtient une équation pour l'énergie interne :

$$\rho \frac{de}{dt} - \frac{P}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (\text{II.5})$$

Compte tenu du fait que toutes les espèces ont la même température, l'identité de Gibbs pour une espèce k s'écrit :

$$de_k = T ds_k + P_k d\left(\frac{1}{\rho_k}\right)$$

où s_k est l'entropie spécifique de l'espèce k . Nous souhaitons accéder à l'identité de Gibbs associée à la loi d'état de mélange. Pour cela, la relation précédente est multipliée par la fraction massique Y_k puis l'on somme sur le nombre d'espèces.

$$de = T ds + \sum_{k=1}^N P_k d\left(\frac{Y_k}{\rho_k}\right) + \sum_{k=1}^N \left(e_k + \frac{P_k}{\rho_k} - T s_k\right) dY_k$$

Le système est soumis à la loi de Dalton (II.3), de plus nous disposons de la définition (II.1) :

$$de = T ds + P d\left(\frac{1}{\rho}\right) + \sum_{k=1}^N \left(e_k + \frac{P_k}{\rho_k} - T s_k\right) dY_k$$

Introduisons l'enthalpie et l'énergie libre de Gibbs de l'espèce k :

$$h_k = \frac{P_k}{\rho_k} + e_k \quad (\text{II.6})$$

$$g_k = h_k - T s_k \quad (\text{II.7})$$

Finalement, on obtient l'identité de Gibbs pour le mélange gazeux :

$$de = T ds + P d\left(\frac{1}{\rho}\right) + \sum_{k=1}^N g_k dY_k \quad (\text{II.8})$$

II.1. Les Equations d'Euler Multi-Espèces

La relation (II.8) peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{de}{dt} = T \frac{ds}{dt} + \frac{P}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} + \sum_{k=1}^N g_k \frac{dY_k}{dt}$$

Or, en l'absence de diffusion $\frac{dY_k}{dt} = 0$, l'équation d'évolution de l'énergie interne devient :

$$\frac{de}{dt} = T \frac{ds}{dt} + \frac{P}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} \quad (\text{II.9})$$

La combinaison des équations (II.5) et (II.9), nous conduit à une équation d'évolution pour l'entropie du mélange sous la forme d'une loi de conservation :

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} s) = 0 \quad (\text{II.10})$$

La production d'entropie associée au système (II.4) est nulle (en l'absence d'onde de choc). Elle satisfait donc le second principe de la thermodynamique.

II.1.5 Problème de Riemann pour les Equations d'Euler Multi-Espèces

Les équations supplémentaires étant de “simples” équations d'advection, les matrices de propagation du système (II.4) peuvent être déduites du cas “classique”. Ainsi pour un mélange gazeux contenant N espèces, on aura N valeurs propres supplémentaires toutes égales à u (pour la matrice $\underline{\underline{A}}(\mathbf{W})$ associée à la forme quasi-linéaire des équations (I.3)). Pour les relations isentropiques, on obtient $dY_k = 0$. Ce qui implique que les fractions massiques se conservent le long des trajectoires. On obtient également N relations de saut supplémentaires,

$$\rho Y_k(u - \sigma) = \rho_0 Y_{k0}(u_0 - \sigma) \implies Y_k = Y_{k0}.$$

où σ est la vitesse du front de discontinuité. Les autres relations demeurent inchangées et le problème de Riemann est résolu de façon identique. Ce modèle permet de décrire la propagation d'un nuage de polluant gazeux. Le système (II.4) est à intégrer sur le volume de contrôle hétérogène à l'image des autres équations. Cette intégration ne présente pas de difficulté majeure et se traite exactement comme l'intégration de l'équation de conservation de la masse de mélange.

II.1.6 Intégration sur le Volume Hétérogène

L'intégration des équations supplémentaires (transport des fractions massiques) sur le volume de contrôle hétérogène (Figure I.7) ne présente pas de difficulté. En l'absence de diffusion moléculaire, les flux au niveau des surfaces solides sont nuls. Dans le cas d'obstacles internes perméables, on utilisera une condition limite interne pour calculer le flux

traversant la surface perméable.

$$(\rho Y_k V)_{i,j,l}^{n+1} = (\rho Y_k V)_{i,j,l}^n - \Delta t \left\{ \begin{aligned} & \{(\rho Y_k u)^* S_f\}_{i+1/2} - \{(\rho Y_k u)^* S_f\}_{i-1/2} \\ & + \{(\rho Y_k v)^* S_f\}_{j+1/2} - \{(\rho Y_k v)^* S_f\}_{j-1/2} \\ & + \{(\rho Y_k w)^* S_f\}_{l+1/2} - \{(\rho Y_k w)^* S_f\}_{l-1/2} + \\ & \sum [(\rho Y_k u)^* S_{fg}^{0x} - (\rho Y_k u)^* S_{fd}^{0x} + (\rho Y_k v)^* S_{fg}^{0y}] \\ & \sum [-(\rho Y_k v)^* S_{fd}^{0y} + (\rho Y_k w)^* S_{fg}^{0z} - (\rho Y_k w)^* S_{fd}^{0z}] \end{aligned} \right\}$$

II.1.7 Limitations du Modèle Multi-espèces

Il est connu que la résolution du modèle multi-espèces conduit à des erreurs numériques dès lors qu'une interface est présente dans l'écoulement. Ces oscillations ont été mises en évidence dans [39],[1] et expliquées dans [62]. L'utilisation de la loi de Dalton (II.3) n'est valide qu'à l'équilibre thermodynamique local. Ceci est vrai dans un volume contenant plusieurs gaz parfaitement mélangés. Si une interface est présente séparant deux gaz ayant chacun leur propre température, l'équilibre thermodynamique local n'est plus vérifié.

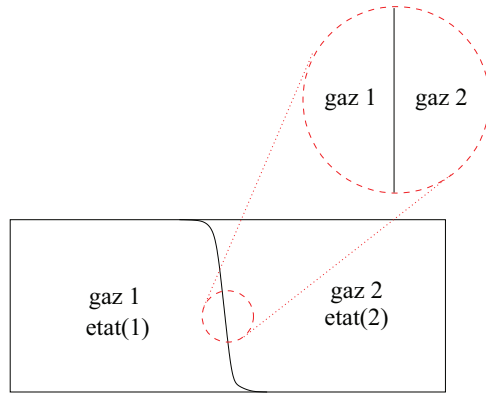


Figure II.1 – Volume contenant deux gaz distincts.

Soit un volume de contrôle (une maille de calcul) situé dans la zone de diffusion d'une interface séparant deux gaz distincts (Figure II.1) ayant des températures différentes, il n'y a aucune raison pour que l'équilibre thermodynamique local soit atteint. Cependant, le système d'équations résolu fournit une seule température pour le mélange et force donc l'équilibre local de celui-ci, même si cela est impossible physiquement. Ceci conduit à l'apparition d'oscillations sur les champs de vitesse et de pression.

On peut trouver dans [2] un schéma numérique permettant de s'affranchir de ces oscillations. D'autres modèles ont été développés par la suite, ces derniers basés sur les fractions volumiques des différents fluides et respectant les conditions d'interface [66]. Le modèle est néanmoins implémenté dans le code de calcul tridimensionnel, ce dernier ayant vocation à être le dernier maillon d'une chaîne de codes dont les autres maillons

II.1. Les Equations d'Euler Multi-Espèces

utilisent des modèles plus spécifiques au traitement des interfaces.

Nous souhaitons modéliser la diffusion turbulente des espèces dans l'environnement. Cependant, il est important de réduire au préalable la diffusion numérique intrinsèque au schéma utilisé. En effet, l'utilisation d'un schéma de type volumes finis à l'ordre un induit une importante diffusion numérique dégradant très rapidement les profils discontinus. Modéliser la diffusion massique entre espèces dans ce cas, n'a alors aucun sens. En effet, celle-ci peut être masquée par la diffusion numérique qui selon le maillage utilisé, peut s'avérer très importante. Pour illustrer ces propos, nous avons tracé sur la Figure II.2, l'évolution d'une discontinuité de fraction massique transportée à vitesse constante. On constate que le profil initialement discontinu se dégrade très rapidement.

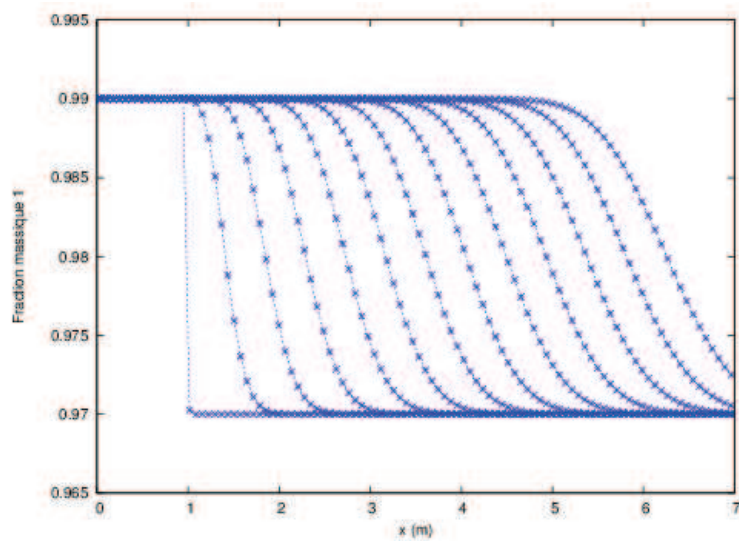


Figure II.2 – Evolution du profil de fraction massique initialement discontinu, dans le cas d'un transport à vitesse constante.

Avant d'ajouter des termes de diffusion massique, on se doit d'être en mesure de suivre correctement les champs de concentration d'espèces. La solution serait d'utiliser un maillage très fin ou encore un schéma numérique d'ordre plus élevé. Cependant ces solutions sont toutes deux très coûteuses numériquement. Nous devons donc trouver un compromis nous permettant de limiter la diffusion numérique tout en conservant un temps de calcul raisonnable. Nous avons donc choisi de traiter les fractions massiques des espèces avec un schéma ADER à l'ordre 3, les autres équations étant traitées comme dans le chapitre précédent. Ceci nous permet de préserver les discontinuités de fractions massiques mais également les profils continus. Ils sera alors possible d'introduire des termes diffusifs physiques dans le modèle.

II.2 Un Schéma d'Ordre Elevé pour le Transport des Concentrations : Schéma ADER

Le schéma ADER appliqué aux méthodes de type volumes finis permet la construction de schémas numériques d'ordre élevé en temps et en espace. Ce schéma a été introduit dans [72] et [75]. L'approche utilisée est basée sur la résolution du problème de Riemann généralisé ainsi que sur la reconstruction polynomiale des variables considérées.

Pour introduire la philosophie de cette approche, plaçons nous dans le cas d'une équation scalaire simple dans une configuration unidimensionnelle :

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.11})$$

Pour résoudre numériquement l'équation (II.11), on utilise classiquement un schéma de type Godunov [28] :

$$q_i^{n+1} = q_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left\{ f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}} \right\}$$

Où $f_{i+\frac{1}{2}}$ et $f_{i-\frac{1}{2}}$ sont les flux calculés aux bords de maille $i + 1/2$ et $i - 1/2$, nécessitant la résolution de problèmes de Riemann locaux entre deux mailles successives. Si l'on utilise un solveur exact, alors

$$f_{i+1/2} = f(q_{i+1/2}^*).$$

Un seul problème de Riemann qu'on nommera problème de Riemann à l'ordre zéro doit être résolu. L'approche ADER met en jeu de multiples problèmes de Riemann : le flux solution est construit à partir d'un développement en série de Taylor (temporel) de la variable $q(x, t)$. Le flux sera donc calculé à partir de la solution du problème de Riemann généralisé, dont la problématique est détaillée ci-après.

II.2.1 Problème de Riemann Généralisé

Le problème de Riemann généralisé, noté $\mathbf{GRP}_K$, s'écrit sous la forme du problème de Cauchy suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} &= 0 \\ q(x, 0) &= \begin{cases} p_i(x) & \text{si } x < 0 \\ p_{i+1}(x) & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

Où $p_i(x)$ et $p_{i+1}(x)$ sont des polynômes d'ordre K , respectivement dans les mailles i et $i + 1$. La solution du problème de Riemann généralisé associé au système (II.12) s'écrit sous la forme d'un développement en série de Taylor à l'ordre K :

$$q_{i+1/2}(\tau) = q(0, 0^+) + \sum_{k=1}^K \frac{\partial^k q}{\partial t^k}(0, 0^+) \frac{\tau^k}{k!} \quad (\text{II.13})$$

II.2. Un Schéma d'Ordre Elevé pour le Transport des Concentrations : Schéma ADER

$q(0, 0^+)$ correspond à la solution du problème de Riemann à l'ordre 0 telle que :

$$q(0, 0^+) = \lim_{t \rightarrow 0^+} q(0, t).$$

En l'absence de terme source, l'utilisation du problème de Riemann généralisé d'ordre K permet la construction d'un schéma d'ordre $K + 1$ en temps et en espace. Sur la Figure II.3, nous avons illustré le problème de Riemann généralisé. Contrairement au cas classique où les conditions initiales sont constantes par morceaux, on considère ici des fonctions continues par morceaux. Ainsi, un polynôme est défini dans chacune des mailles du domaine.

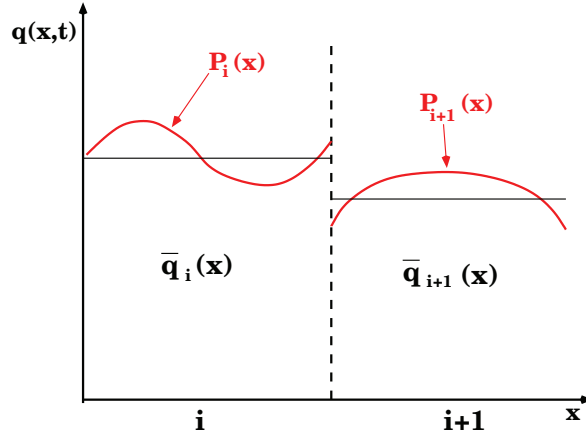


Figure II.3 – Représentation des états initiaux discontinus.

La difficulté principale pour la résolution du $\mathbf{GRP}_K$ vient de l'utilisation des dérivées temporelles successives de la variable $q(x, t)$. On utilise l'équation (II.11) afin d'exprimer les dérivées temporelles successives comme fonctions des dérivées spatiales.

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} &= -\frac{df(q)}{dq} \frac{\partial q}{\partial x} \\ \frac{\partial^2 q}{\partial x \partial t} &= -\frac{d^2 f(q)}{dq^2} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 - \frac{df(q)}{dq} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} &= -\frac{d^2 f(q)}{dq^2} \frac{\partial q}{\partial t} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{df(q)}{dq} \frac{\partial^2 q}{\partial x \partial t} \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

Les dérivées temporelles successives ayant été exprimées, il est nécessaire de disposer d'une équation d'évolution pour chacune des dérivées spatiales. On utilise une fois de plus l'équation (II.11). Pour la dérivée spatiale première (que l'on notera ici q_x), on obtient :

$$\frac{\partial q_x}{\partial t} + \frac{df(q)}{dq} \frac{\partial q_x}{\partial x} = -\frac{d^2 f(q)}{dq^2} q_x^2$$

II. Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion

Deux simplifications sont réalisées sur cette dernière équation. En premier lieu, le second membre est négligé. L'équation ainsi obtenue est alors linéarisée autour du terme dominant $q(0, 0^+)$. De plus, on peut négliger le terme source car les dérivées spatiales successives ne sont nécessaires qu'au tous premiers instants d'interactions entre les états gauche et droite. Finalement les équations d'évolution pour les dérivées spatiales s'écrivent :

$$\frac{\partial q_x^{(k)}}{\partial t} + A_0 \frac{\partial q_x^{(k)}}{\partial x} = 0$$

Où $A_0 = \left(\frac{df}{dq}\right)_0$ représente le jacobien linéarisé et $q_x^{(k)}$, la k^{ieme} dérivée spatiale. Ainsi, pour chacune de ces dérivées, il est nécessaire de résoudre un problème de Riemann.

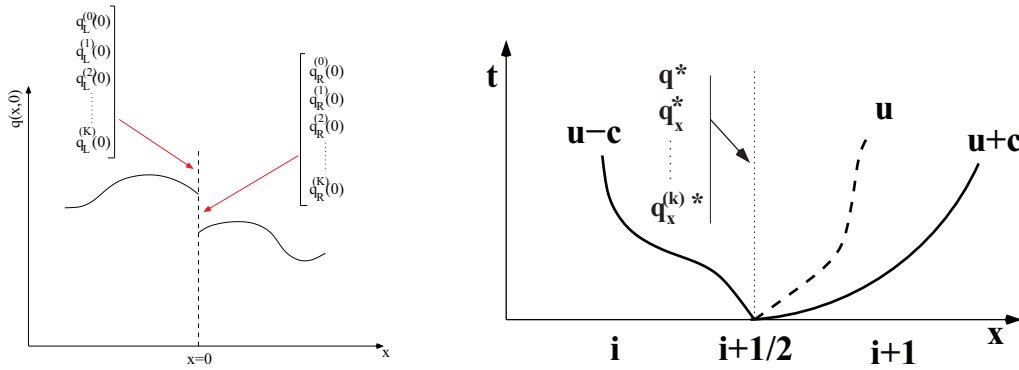


Figure II.4 – À gauche conditions initiales associées au problème de Riemann généralisé. À droite, diagramme d'ondes associé au GRP_k présentant des trajectoires courbes.

Dans le cas d'une équation de transport, la solution du problème de Riemann est triviale connaissant la vitesse de propagation de la discontinuité. Selon la valeur de cette vitesse, la solution sera soit l'état gauche, soit l'état droite. Dans le cas des équations d'Euler, il faut utiliser un solveur spécifique pour les problèmes de Riemann associés aux dérivées spatiales.

II.2.2 Reconstruction

Le schéma ADER nécessite l'utilisation de polynômes interpolant la variable considérée, ce processus est appelé "reconstruction". Le choix d'un polynôme est assez délicat. En effet, il faut utiliser les bons stencils assurant l'obtention du polynôme le plus "smooth" possible. Il est possible d'utiliser les reconstructions employées pour les schémas **ENO** ([31],[32]) ou **WENO** ([36],[49]). Les méthodes de reconstruction utilisant des stencils variables sont appelées **reconstructions non-linéaires**. Nous utiliserons ici la formulation de Newton pour l'interpolation polynomiale, assurant une reconstruction conservative des variables, c'est à dire :

$$\bar{q}_i = \frac{1}{dx} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q_i(x) dx = \frac{1}{dx} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} p_i(x) dx$$

II.2. Un Schéma d'Ordre Elevé pour le Transport des Concentrations : Schéma ADER

L'interpolation s'opère sur la fonction primitive de la variable à interpoler. Le polynôme $P(x)$ est construit et celui-ci est ensuite dérivé pour aboutir au polynôme $p(x)$ qui sera utilisé pour la reconstruction. Soit $Q(x)$, la fonction primitive de la variable $q(x)$. Écrivons la formulation de Newton pour l'interpolation polynomiale de cette variable :

$$P(x) = \sum_{j=0}^K Q[x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i-r+j-1/2}] \prod_{m=0}^{j-1} (x - x_{i-r+m-1/2})$$

$$p(x) = P'(x) = \sum_{j=0}^K Q[x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i-r+j-1/2}] \sum_{m=0}^{j-1} \left\{ \prod_{m=0, m \neq l}^{j-1} (x - x_{i-r+m-1/2}) \right\} \quad (\text{II.14})$$

Avec $Q[x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i-r+j-1/2}]$, les **différences divisées** associées à la fonction primitive $Q(x)$. Pour illustrer la formulation (II.14), calculons le polynôme de Newton à l'ordre un puis à l'ordre deux. Exprimons tout d'abord la différence divisée d'ordre 0, correspondant à la variable calculée en bord de maille :

$$Q[x_{i-1/2}] = Q(x_{i-1/2})$$

Calculons maintenant les différences divisées à l'ordre 1 :

$$Q[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] = \frac{Q(x_{i+1/2}) - Q(x_{i-1/2})}{x_{i+1/2} - x_{i-1/2}} = q_i$$

Exprimons maintenant le polynôme à l'ordre 1 que l'on obtient en utilisant l'expression (II.14) :

$$p(x) = a + b \{ (x - x_{i-r+1/2}) + (x - x_{i-r-1/2}) \},$$

avec a et b tels que :

$$a = Q[x_{i-r-1/2}, x_{i-r+1/2}] = \frac{Q(x_{i-r+1/2}) - Q(x_{i-r-1/2})}{x_{i-r+1/2} - x_{i-r-1/2}} = q_{i-r}$$

$$b = Q[x_{i-r-1/2}, x_{i-r+1/2}, x_{i-r+3/2}] = \frac{Q[x_{i-r+1/2}, x_{i-r+3/2}] - Q[x_{i-r-1/2}, x_{i-r+1/2}]}{x_{i-r+3/2} - x_{i-r-1/2}}$$

On reconnaît l'expression de a dans b , de plus on remarque que :

$$Q[x_{i-r+1/2}, x_{i-r+3/2}] = \frac{Q(x_{i-r+3/2}) - Q(x_{i-r+1/2})}{x_{i-r+3/2} - x_{i-r+1/2}} = q_{i-r+1}$$

Ainsi, nous obtenons les expressions suivantes pour les coefficients du polynôme :

$$a = q_{i-r} \quad \text{et} \quad b = \frac{q_{i-r+1} - q_{i-r}}{2\Delta x}$$

Le polynôme $p(x)$ obtenu s'écrit :

$$p(x) = q_{i-r} + \frac{q_{i-r+1} - q_{i-r}}{2\delta x} \{ (x - x_{i-r+1/2}) + (x - x_{i-r-1/2}) \}$$

Dans ces dernières expressions figure un entier noté " r ", celui ci correspond au stencil à gauche, c'est à dire à un décalage vers la gauche. Il peut être positif ou négatif. Pour chaque maille, il faudra utiliser une valeur appropriée pour cet entier r .

II.2.3 Algorithme de Résolution

Il peut se résumer ainsi :

1. Reconstruction polynomiale des variables au moyen de l'expression (II.14).
2. Résolution du problème de Riemann d'ordre zéro, ainsi que de ceux associés aux dérivées spatiales.
3. Expressions des dérivées temporelles comme fonctions des dérivées spatiales.
4. Calcul des flux $f_{i+1/2}^* = f(q_{i+1/2}(\tau))$ grâce à la relation (II.13)

Comparons rapidement les résultats que l'on obtient avec un schéma ADER à l'ordre 3 avec ceux obtenus avec d'autres schémas, en les confrontant aux solutions exactes sur des configurations simples unidimensionnelles.

Il s'agit premièrement de transporter un signal sinusoïdal à vitesse constante. Nous utilisons des limites périodiques à gauche et à droite, ainsi qu'un maillage grossier de 100 cellules. Sur la Figure II.5, on a tracé le profil obtenu avec le schéma ADER à l'ordre 3, comparé à celui obtenu avec le schéma ordre 1 et à la solution exacte au temps physique final de 392 s. La solution obtenue avec le schéma à l'ordre un n'a plus rien à voir avec une sinusoïde. Le processus de moyenne au sein des mailles affecte progressivement la solution qui finit par converger vers une solution stationnaire nulle ! Le signal associé au schéma ADER ordre 3 est quasiment confondu avec la solution exacte, même après 392 s de temps physique. Ce schéma nous permet de préserver l'intégrité du signal beaucoup plus longtemps.

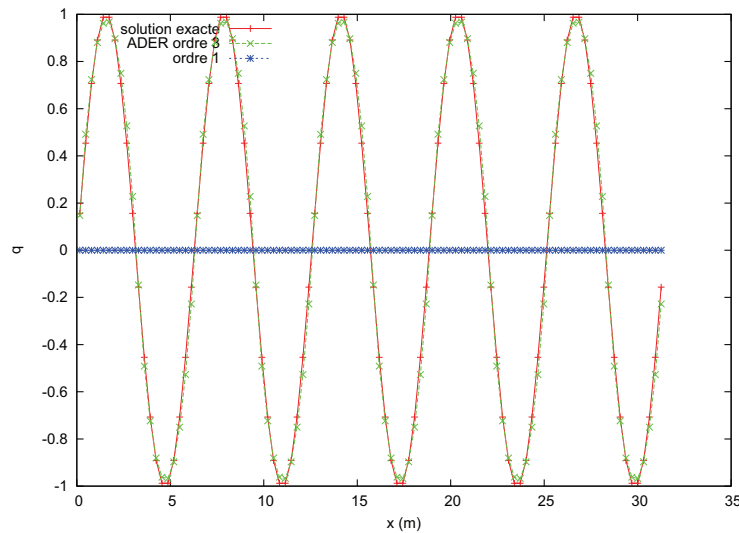


Figure II.5 – Profils obtenus avec le schéma ADER à l'ordre 3 et le schéma à l'ordre un, comparés avec la solution exacte à l'instant $t = 392$ s.

Traisons maintenant le cas du transport d'une gaussienne à vitesse constante. Nous allons

II.2. Un Schéma d'Ordre Elevé pour le Transport des Concentrations : Schéma ADER

confronter les résultats issus du schéma ADER à ceux associés à un autre schéma d'ordre élevé. Le schéma de MUSCL-HANCOCK [74] est un schéma de type volumes finis à l'ordre 2 impliquant l'utilisation de limiteur de pentes. Dans le cas présent, nous utilisons le limiteur SUPER BEE [74]. La configuration étudiée correspond au transport d'une gaussienne d'amplitude 0.5 à une vitesse de 1 m/s. Nous utilisons des limites périodiques pour ce calcul.

Les résultats obtenus après 10 s et après 100 s sont présentés sur les Figures II.6 et II.7. Le schéma à l'ordre 1 affecte rapidement la gaussienne alors que les schémas d'ordres plus élevés préservent son amplitude. Cependant, le schéma MUSCL-HANCOCK a tendance à déformer la gaussienne en faisant progressivement disparaître la courbure de celle-ci, elle tend finalement vers un trapèze. Le schéma ADER préserve quant à lui la forme de la gaussienne ainsi que son amplitude.

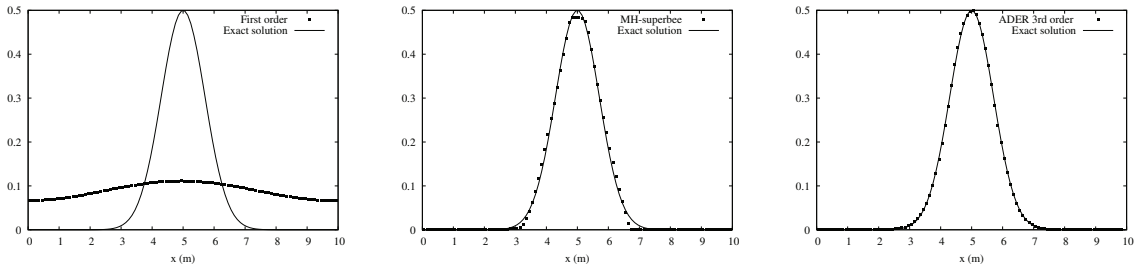


Figure II.6 – Profil obtenu après 10 s de temps physique, la solution exacte est représentée en trait plein. A gauche, on trouve le profil obtenu avec un schéma à l'ordre 1, au milieu, celui obtenu avec le schéma MUSCL-HANCOCK et enfin à droite, le profil obtenu avec le schéma ADER

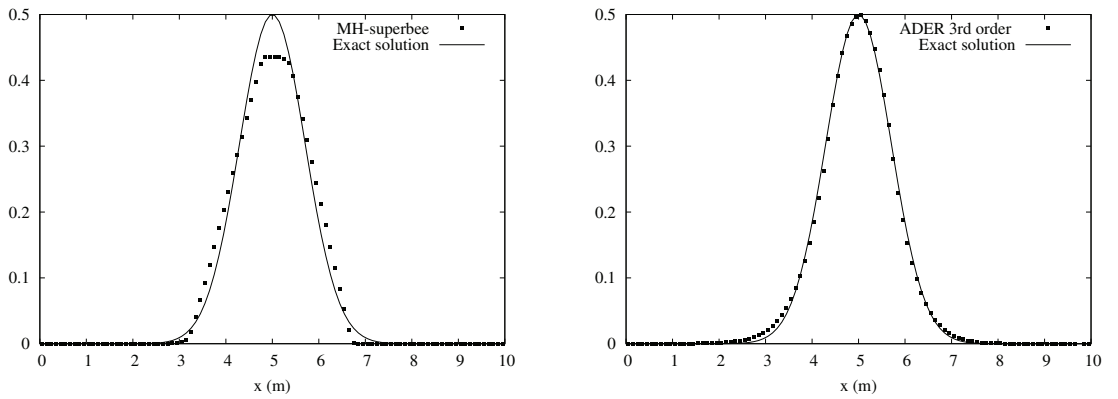


Figure II.7 – Profil obtenu après 100 s de temps physique. À gauche : profil obtenu considérant le schéma MUSCL-HANCOCK. À droite, celui obtenu à l'aide du schéma ADER

Le schéma ADER est très efficace lorsqu'il s'agit de transporter des fonctions continues. En effet, les amplitudes sont conservées et les fonctions ne présentent pas de déformation

ou très peu, même sur des maillages grossiers. Voilà pourquoi nous avons choisi cette approche pour le traitement des fractions massiques des espèces chimiques.

II.3 Utilisation du Schéma ADER pour les Concentrations des Espèces

Nous devons résoudre numériquement le système (II.4). Un schéma ADER à l'ordre 3 est utilisé pour résoudre les équations de transport associées aux fractions massiques des espèces présentes. Soit :

$$q = \rho Y_k$$

Alors la dernière équation du système (II.4) s'écrit (dans le cas unidimensionnel) :

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} = 0, \quad f(q) = qu.$$

La reconstruction polynomiale est opérée sur la variable q uniquement : les autres équations sont résolues à l'ordre un. Nous devons résoudre le problème de Riemann d'ordre 0 afin de calculer les flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie totale. La vitesse u^* (solution du problème de Riemann à l'ordre 0) est également connue, elle correspond à la vitesse de transport des fractions massiques. Pour calculer le flux associé à la variable q , il est nécessaire d'exprimer les dérivées temporelles successives de cette variable :

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} &= \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{df(q)}{dq} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} + \frac{d^2 f(q)}{dq^2} \frac{\partial q}{\partial t} \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{df(q)}{dq} \frac{\partial^2 q}{\partial t \partial x} &= 0 \\ \frac{\partial^2 q}{\partial t \partial x} + \frac{d^2 f(q)}{dq^2} \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)^2 + \frac{df(q)}{dq} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} &= 0 \end{aligned}$$

Or $\frac{d^2 f(q)}{dq^2} = 0$. Cela simplifie l'expression de la dérivée seconde ainsi que celle de la dérivée croisée :

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} &= - \frac{df(q)}{dq} \frac{\partial q}{\partial x}, \\ \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} &= \left\{ \frac{df(q)}{dq} \right\}^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}. \end{aligned}$$

Nous avons exprimé les dérivées spatiales en fonctions des dérivées temporelles, l'équation d'évolution linéarisée associée à ces dérivées est la suivante :

$$\frac{\partial q_x^{(k)}}{\partial t} + u^* \frac{\partial q_x^{(k)}}{\partial x} = 0 \quad (\text{II.15})$$

avec :

$$u^* = \left(\frac{df(q)}{dq} \right)_0$$

II.3. Utilisation du Schéma ADER pour les Concentrations des Espèces

correspondant à la vitesse solution du problème de Riemann d'ordre 0. Après résolution des équations (II.15), on peut exprimer les dérivées temporelles et ainsi calculer $q_\tau(0, 0^+)$ en utilisant (II.13) et finalement calculer le flux :

$$f_{i+1/2}(q_\tau) = u^* q_\tau(0, 0^+)$$

Pour les cas multi-dimensionnels, nous traiterons indépendamment chacune des trois directions d'espace. Ainsi, trois polynômes distincts sont calculés dans chacune des mailles du domaine.

Nous présentons le cas d'un tube à choc contenant deux gaz distincts. Dans un premier temps toutes les équations sont résolues avec un schéma à l'ordre 1 puis on utilise un schéma ADER à l'ordre 3. Enfin on considérera un schéma ADER à l'ordre 3 pour les équations de transport associées aux fractions massiques et un schéma à l'ordre 1 pour le reste du système.

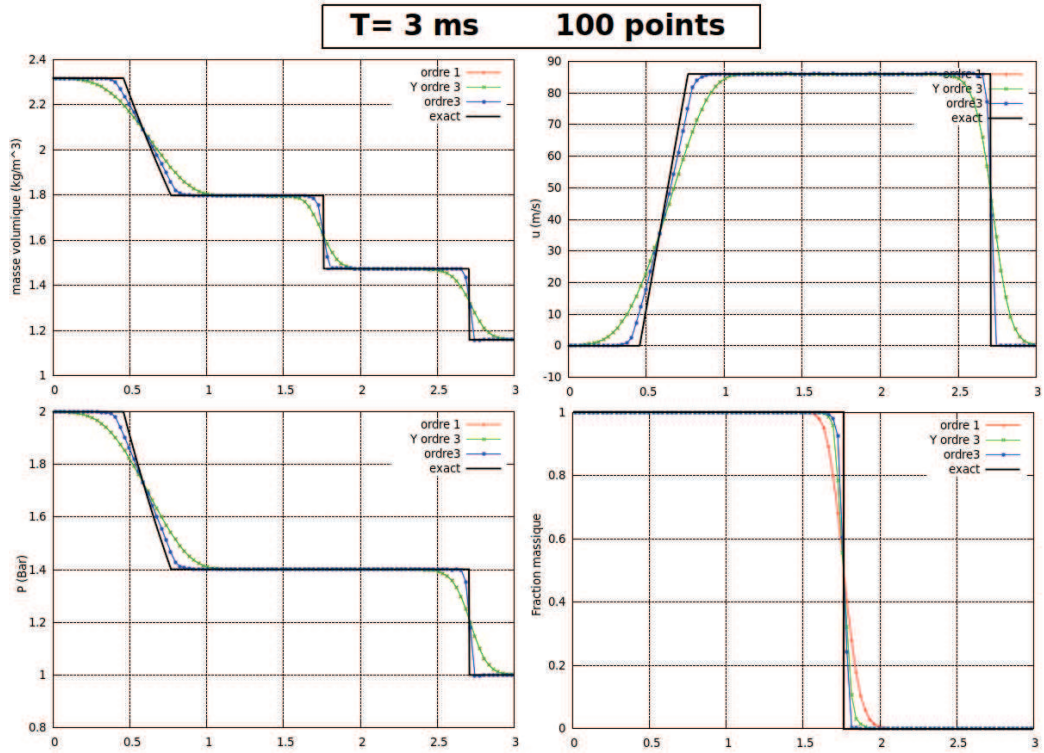


Figure II.8 – Comparaison des profils de masse volumique de vitesse de pression ainsi que de la fraction la fraction massique à l'instant $t=3$ ms obtenu sur un maillage comportant 100 cellules et avec trois ordres de schéma différents, dans une configuration de type tube à choc.

Nous pouvons constater que l'utilisation d'un schéma à l'ordre 1 pour le système d'équations n'a que très peu d'effet sur la précision de la solution obtenue pour les fractions massiques qui sont traitées par un schéma à l'ordre 3.

II. Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion

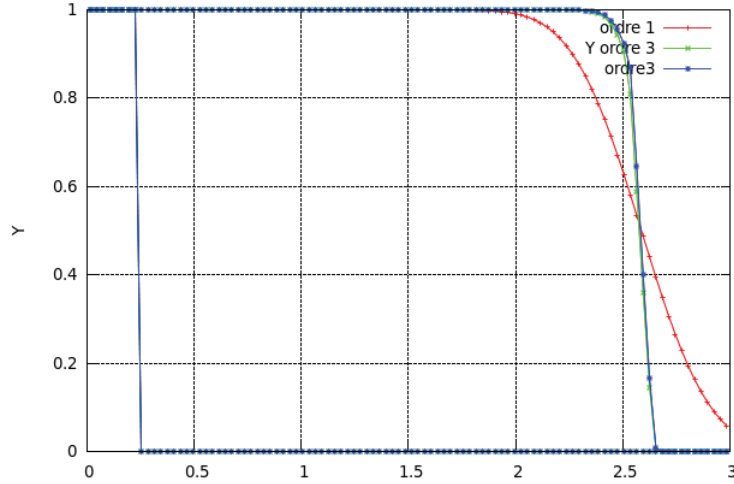


Figure II.9 – Comparaison des profils de fraction massique à l’instant $t=26$ ms obtenu sur un maillage comportant 100 cellules avec trois ordres de schéma différents, dans une configuration de type tube à choc.

La diffusion numérique est à présent fortement réduite grâce à l’utilisation du schéma ADER pour les fractions massiques des espèces chimiques. Des résultats multi-dimensionnels sont présentés dans le chapitre dédié aux résultats numériques, pour que le lecteur puisse apprécier le gain considérable apporté par ce schéma numérique. Nous pouvons désormais envisager l’implémentation de phénomènes diffusifs dans le code de calcul.

II.4 Effets Diffusifs

La formulation utilisée pour le traitement de la diffusion “moléculaire”, se rapproche de la formulation associées aux écoulements multi-espèces réactifs. Cependant, l’aspect réactif n’est pas pris en compte. Ces équations sont dérivées de la théorie cinétique des gaz, dérivation que l’on peut trouver dans [12] ou [24] par exemple. La formulation utilisée dans le cadre de ces travaux est issue de [26], traitant en détails les équations gouvernant les écoulements réactifs. Cependant une partie des termes introduits dans [26], sont absents, car nous souhaitons traiter uniquement la diffusion d’espèces en l’absence de réaction chimique ou de tout autre phénomène.

II.4.1 Introduction des Termes de Diffusion Moléculaire

Nous utilisons la formulation développée dans [26] pour introduire la diffusion dans le modèle (II.4). Définissons premièrement le flux de diffusion $\mathbf{F}_k$ associé à l’espèce k .

$$\mathbf{F}_k = \sum_{l=1}^N C_{kl} \mathbf{d}_l \quad (\text{II.16})$$

II.4. Effets Diffusifs

Où $C_{k,l}$ représente le coefficient de diffusion de l'espèce k dans l'espèce l et $\mathbf{d}_l$ représente en quelque sorte une “force de diffusion” associée à l'espèce k . Ce flux diffusif tient compte des effets dus à la présence d'un gradient de fraction massique ainsi que de ceux liés au gradient de pression.

$$\mathbf{d}_l = \vec{\nabla}\left(\frac{P_l}{P}\right) + \left(\frac{P_l}{P} - Y_l\right)\vec{\nabla}(\log P)$$

La conservation de la masse du mélange implique l'existence d'une contrainte de saturation sur les flux F_k . Ainsi :

$$\sum_{k=1}^N \mathbf{F}_k = 0 \quad (\text{II.17})$$

L'équation de conservation de la masse de chacune des espèces s'écrit maintenant,

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u} + \mathbf{F}_k) = 0 \quad k = 1, \dots, N$$

De par la contrainte (II.17), le flux diffusif n'a pas d'incidence sur les équations de conservation de la masse de mélange et de la quantité de mouvement. En revanche, il apparaît un terme supplémentaire dans l'équation de conservation de l'énergie totale. On notera ce flux $\mathbf{Q}$, il représente le transfert d'énergie dû à la diffusion d'espèces. Celui-ci peut être relié au flux de masse F_k par la relation suivante :

$$\mathbf{Q} = \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{F}_k \quad (\text{II.18})$$

Avec h_k l'enthalpie spécifique de Gibbs, définie plus tôt dans ce chapitre par la relation (III.5). On obtient le système suivant (avec en rouge, les termes supplémentaires) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) = 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u} + \mathbf{Q}) = 0. \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u} + \mathbf{F}_k) = 0 \quad k = 1, \dots, N \end{array} \right. \quad (\text{II.19})$$

L'expression de la “force diffusive” $\mathbf{d}_k$ peut être réduite et sera utilisée principalement sous la forme,

$$\mathbf{d}_k = \frac{1}{P} \left\{ \vec{\nabla} P_k - Y_k \vec{\nabla} P \right\} \quad (\text{II.20})$$

II.4.2 Equation d'Evolution de l'Entropie Spécifique de Mélange

L'ajout de ces flux diffusifs induit un terme de création d'entropie, celui ci doit satisfaire le second principe de la thermodynamique. Nous allons donc étudier l'influence de ces termes sur l'équation d'évolution de l'entropie spécifique de mélange. On accède à

II. Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion

cette équation en développant l'équation de conservation de l'énergie totale associée au système (II.19) qui devient :

$$\rho \frac{de}{dt} - \frac{P}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{Q} = 0$$

L'identité de Gibbs de mélange (II.8) peut se mettre sous la forme :

$$\frac{de}{dt} = T \frac{ds}{dt} + \frac{P}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} + \sum_{k=1}^N g_k \frac{dY_k}{dt}$$

Où g_k est l'énergie libre Gibbs associée à l'espèce k (relation (II.7)). En combinant ces deux dernières relations et en utilisant le fait que :

$$\frac{dY_k}{dt} = - \frac{\nabla \cdot \mathbf{F}_k}{\rho}$$

On obtient la relation suivante :

$$\rho T \frac{ds}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{Q} - \sum_{k=1}^N g_k \nabla \cdot \mathbf{F}_k = 0$$

En multipliant cette dernière relation par la densité de mélange ρ et en y ajoutant l'équation de conservation de la masse, l'expression peut se mettre sous la forme conservative, avec un terme source :

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} s + \frac{\mathbf{Q}}{T} - \sum_{k=1}^N \frac{g_k}{T} \mathbf{F}_k \right) = - \frac{\mathbf{Q}}{T^2} \cdot \nabla T - \sum_{k=1}^N \mathbf{F}_k \cdot \nabla \left(\frac{g_k}{T} \right) \quad (\text{II.21})$$

Le second membre de l'équation (II.21) correspond au terme de production d'entropie $\dot{s}$. Nous devons reformuler ce terme afin de vérifier qu'il est défini positif. On peut montrer que :

$$\nabla \left(\frac{g_k}{T} \right) = \frac{1}{T} \frac{\nabla P_k}{\rho_k} - \frac{h_k}{T^2} \nabla T$$

Si l'on utilise l'expression précédente combinée à la définition de $\mathbf{Q}$ (relation II.18), le terme de production d'entropie devient :

$$\dot{s} = - \frac{\nabla T}{T^2} \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{F}_k - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^N \mathbf{F}_k \frac{\nabla P_k}{\rho_k} + \frac{\nabla T}{T^2} \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{F}_k$$

Soit :

$$\dot{s} = - \frac{1}{T} \sum_{k=1}^N \mathbf{F}_k \frac{\nabla P_k}{\rho_k}$$

Le gradient de pression partielle peut être exprimé en utilisant la relation (II.20) :

$$\nabla P_k = P \mathbf{d}_k + \frac{\rho_k}{\rho} \nabla P.$$

II.4. Effets Diffusifs

Finalement :

$$\dot{s} = -\frac{P}{T} \sum_{k=1}^N \frac{\mathbf{F}_k \mathbf{d}_k}{\rho_k} = -\frac{P}{T} \sum_{k=1, l=1}^N \frac{C_{k,l}}{\rho_k} \mathbf{d}_l \mathbf{d}_k$$

En considérant le coefficient $C_{k,l}$ commun à toutes les espèces, cette expression peut se mettre sous la forme (voir détails du calcul dans l'Annexe A) :

$$\dot{s} = \frac{C}{PT} \sum_{k=1}^N \frac{1}{\rho_k} \left\{ \left(\sum_{l=1, l \neq k}^N Y_l \right) \nabla P_k - Y_k \left(\sum_{l=1, l \neq k}^N \nabla P_l \right) \right\}^2 \geq 0 \quad (\text{II.22})$$

Finalement, l'entropie spécifique de mélange admet un terme de création d'entropie défini positif, il satisfait donc bien le second principe de la thermodynamique, le modèle est donc physiquement admissible.

II.4.3 Intégration des Termes Diffusifs sur le Volume de Contrôle Hétérogène

Dans cette section, nous allons intégrer les termes diffusifs sur un volume de contrôle hétérogène. Il faudra tenir compte des différents types de surfaces (Figure I.8). Nous verrons que la définition des flux au niveau des surfaces changent suivant la nature de celles-ci (surfaces internes au volume de contrôle ou surface en bord de maille). Nous devons intégrer le système (II.19) sur le volume de contrôle représenté sur la Figure I.7. Nous ne procéderons ici qu'à l'intégration des termes diffusifs, l'intégration des autres termes ayant été faite dans le Chapitre 2. Nous devons calculer :

$$\int_{\Delta t} \int_V \nabla \cdot \mathbf{F}_k dV dt \quad \text{et} \quad \int_{\Delta t} \int_V \nabla \cdot \mathbf{Q}_k dV dt$$

Sous la condition CFL [16], on peut considérer les flux comme constants sur un pas de temps :

$$\begin{aligned} \int_{\Delta t} \int_V \nabla \cdot \mathbf{F}_k dV dt &= \Delta t \int_S \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{n} dS \\ \int_{\Delta t} \int_V \nabla \cdot \mathbf{Q}_k dV dt &= \Delta t \int_S \mathbf{Q}_k \cdot \mathbf{n} dS \end{aligned}$$

L'intégration des flux diffusifs donne :

II. Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion

$$\Delta t \int_S \mathbf{F}_k \cdot \mathbf{n} \, dS = \Delta t \left(\begin{aligned} & \left\{ \{\mathbf{F}_k^f S_f\}_{i+1/2} - \{\mathbf{F}_k^f S_f\}_{i-1/2} + \{\mathbf{F}_k^{*s} S_s\}_{i+1/2} - \{\mathbf{F}_k^{*s} S_s\}_{i-1/2} \right\} \cdot \mathbf{i} \\ & + \left\{ \{\mathbf{F}_k^f S_f\}_{j+1/2} - \{\mathbf{F}_k^f S_f\}_{j-1/2} + \{\mathbf{F}_k^{*s} S_s\}_{j+1/2} - \{\mathbf{F}_k^{*s} S_s\}_{j-1/2} \right\} \cdot \mathbf{j} \\ & + \left\{ \{\mathbf{F}_k^f S_f\}_{l+1/2} - \{\mathbf{F}_k^f S_f\}_{l-1/2} + \{\mathbf{F}_k^{*s} S_s\}_{l+1/2} - \{\mathbf{F}_k^{*s} S_s\}_{l-1/2} \right\} \cdot \mathbf{l} \\ & + \sum \left\{ \mathbf{F}_k^{*f} S_{fg}^{0x} - \mathbf{F}_k^{*f} S_{fd}^{0x} + \mathbf{F}_k^{*s} S_{sg}^{0x} - \mathbf{F}_k^{*s} S_{sd}^{0x} \right\} \cdot \mathbf{i} \\ & + \sum \left\{ \mathbf{F}_k^{*f} S_{fg}^{0y} - \mathbf{F}_k^{*f} S_{fd}^{0y} + \mathbf{F}_k^{*s} S_{sg}^{0y} - \mathbf{F}_k^{*s} S_{sd}^{0y} \right\} \cdot \mathbf{j} \\ & + \sum \left\{ \mathbf{F}_k^{*f} S_{fg}^{0z} - \mathbf{F}_k^{*f} S_{fd}^{0z} + \mathbf{F}_k^{*s} S_{sg}^{0z} - \mathbf{F}_k^{*s} S_{sd}^{0z} \right\} \cdot \mathbf{l} \end{aligned} \right)$$

$$\Delta t \int_S \mathbf{Q} \cdot \mathbf{n} \, dS = \Delta t \left(\begin{aligned} & \left\{ \{\mathbf{Q}^{*f} S_f\}_{i+1/2} - \{\mathbf{Q}^{*f} S_f\}_{i-1/2} + \{\mathbf{Q}^{*s} S_s\}_{i+1/2} - \{\mathbf{Q}^{*s} S_s\}_{i-1/2} \right\} \cdot \mathbf{i} \\ & + \left\{ \{\mathbf{Q}^{*f} S_f\}_{j+1/2} - \{\mathbf{Q}^{*f} S_f\}_{j-1/2} + \{\mathbf{Q}^{*s} S_s\}_{j+1/2} - \{\mathbf{Q}^{*s} S_s\}_{j-1/2} \right\} \cdot \mathbf{j} \\ & + \left\{ \{\mathbf{Q}^{*f} S_f\}_{l+1/2} - \{\mathbf{Q}^{*f} S_f\}_{l-1/2} + \{\mathbf{Q}^{*s} S_s\}_{l+1/2} - \{\mathbf{Q}^{*s} S_s\}_{l-1/2} \right\} \cdot \mathbf{l} \\ & + \sum \left\{ \mathbf{Q}^{*f} S_{fg}^{0x} - \mathbf{Q}^{*f} S_{fd}^{0x} + \mathbf{Q}^{*s} S_{sg}^{0x} - \mathbf{Q}^{*s} S_{sd}^{0x} \right\} \cdot \mathbf{i} \\ & + \sum \left\{ \mathbf{Q}^{*f} S_{fg}^{0y} - \mathbf{Q}^{*f} S_{fd}^{0y} + \mathbf{Q}^{*s} S_{sg}^{0y} - \mathbf{Q}^{*s} S_{sd}^{0y} \right\} \cdot \mathbf{j} \\ & + \sum \left\{ \mathbf{Q}^{*f} S_{fg}^{0z} - \mathbf{Q}^{*f} S_{fd}^{0z} + \mathbf{Q}^{*s} S_{sg}^{0z} - \mathbf{Q}^{*s} S_{sd}^{0z} \right\} \cdot \mathbf{l} \end{aligned} \right)$$

Reste alors à exprimer $\mathbf{F}_k^*$ correspondant au flux de diffusion évalué sur chaque bord de maille. Pour cela, on utilise la relation (II.16) définissant $\mathbf{F}_k$.

$$\mathbf{F}_k^* \cdot \mathbf{i} = \left(\sum_{l=1, k}^{l \neq k} C_{k,l} \mathbf{d}_l \right)^* \cdot \mathbf{i} = C \left(\sum_{l=1, N}^{l \neq k} \mathbf{d}_l \right)^* \cdot \mathbf{i} = C \sum_{l=1, N}^{l \neq k} \mathbf{d}_l^* \cdot \mathbf{i}$$

$$\mathbf{F}_k^* \cdot \mathbf{i} = C \sum_{l=1, N}^{l \neq k} \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P_l}{\partial x} - Y_l \frac{\partial P}{\partial x} \right)^*$$

De la même façon, on peut écrire, pour les autres directions :

$$\mathbf{F}_k^* \cdot \mathbf{j} = C \sum_{l=1, N}^{l \neq k} \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P_l}{\partial y} - Y_l \frac{\partial P}{\partial y} \right)^*, \quad \mathbf{F}_k^* \cdot \mathbf{l} = C \sum_{l=1, N}^{l \neq k} \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P_l}{\partial z} - Y_l \frac{\partial P}{\partial z} \right)^*.$$

Nous allons maintenant étudier la manière dont sont calculés les flux, suivant la nature des surfaces d'intégration.

• Cas des surfaces fluides aux bords de maille

Nous devons évaluer les termes :

$$\mathbf{d}_l^* \cdot \mathbf{i} = \frac{1}{P} \left(\frac{\partial P_l}{\partial x} - Y_l \frac{\partial P}{\partial x} \right)^*, \quad l = 1, \dots, N.$$

Soient :

$$q_{l1} = \frac{1}{P} \frac{\partial P_l}{\partial x} \quad \text{et} \quad q_{l2} = -\frac{Y_l}{P} \frac{\partial P}{\partial x}.$$

Supposant les contributions des deux termes indépendantes, on peut écrire :

$$\mathbf{d}_l^* \cdot \mathbf{i} = q_{l1}^* + q_{l2}^*$$

II.4. Effets Diffusifs

La continuité des flux aux bords de maille implique que dans un voisinage $\mathcal{V}$ de $x_{i+\frac{1}{2}}$ tel que :

$$\forall x \in \mathcal{V} \quad |x - x_{i+\frac{1}{2}}| < \varepsilon,$$

le flux doit être constant (Figure II.10) :

$$q_{l1,-\varepsilon}^* = q_{l1,+\varepsilon}^*$$

D'où,

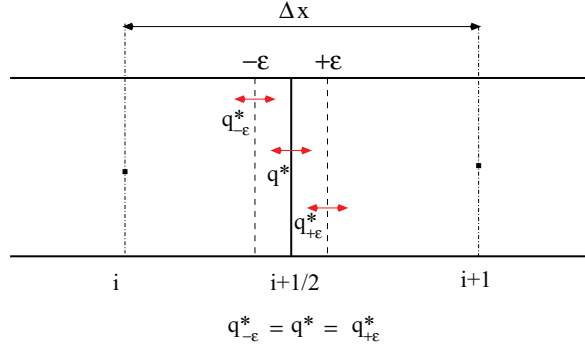


Figure II.10 – Schéma d'étude en bord de maille.

$$q_{l1,-\varepsilon}^* = \frac{1}{P_i} \frac{P_l^* - P_{l,i}}{\Delta x/2} = \frac{1}{P_{i+1}} \frac{P_{l,i+1} - P_l^*}{\Delta x/2} = q_{l1,+\varepsilon}^*$$

Cette relation nous permet de calculer P_l^* :

$$P_l^* = \frac{P_{i+1}P_{l,i} + P_iP_{l,i+1}}{P_{i+1} + P_i} \quad (\text{II.23})$$

De même, on obtient pour q_{l2}^* :

$$q_{l2,-\varepsilon}^* = -\frac{Y_{l,i}}{P_i} \frac{P^* - P_i}{\Delta x/2} = -\frac{Y_{l,i+1}}{P_{i+1}} \frac{P_{i+1} - P^*}{\Delta x/2} = q_{l2,+\varepsilon}^*$$

ce qui conduit finalement à l'expression suivante :

$$P^* = \frac{P_{i+1}P_i(Y_{l,i+1} + Y_{l,i})}{Y_{l,i}P_{i+1} + Y_{l,i+1}P_i}. \quad (\text{II.24})$$

Les flux sont ensuite calculés avec l'une ou l'autre des expressions $q_{l,i}^*$, $\{i = 1, 2\}$.

• Cas des surfaces fluides internes aux mailles

Dans ce cas, $q_{l,i}^*$, $i = 1, 2$ représente le flux traversant la surface fluide du volume interne (surface encadrée en pointillés rouges sur la Figure II.15).

II. Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion

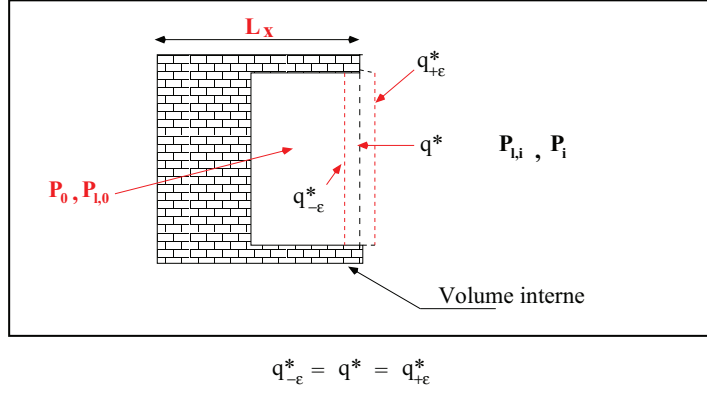


Figure II.11 – Schéma d'étude : cas des surfaces internes.

On procède de la même façon que précédemment, mais cette fois on utilise la taille caractéristique du volume considéré (Ici L_x), et non la demi-longueur d'une maille pour le calcul des flux (voir Figure II.15).

$$q_{l1,-ε}^* = \frac{1}{P_0} \frac{P_l^* - P_{l,0}}{L_x/2} = \frac{1}{P_i} \frac{P_{l,i} - P_l^*}{L_x/2} = q_{l1,+ε}^*$$

$$q_{l2,-ε}^* = \frac{Y_{l,0}}{P_0} \frac{P^* - P_0}{L_x/2} = \frac{Y_{l,i}}{P_i} \frac{P_i - P^*}{L_x/2} = q_{l2,+ε}^*$$

Ce qui nous permet d'écrire :

$$P_l^* = \frac{P_i P_{l,0} + P_0 P_{l,i}}{P_i + P_0} \quad \text{et} \quad P^* = \frac{P_i P_0 (Y_{l,i} + Y_{l,0})}{Y_{l,0} P_i + Y_{l,i} P_0}$$

Ayant évalué les variables aux bords de mailles, les flux peuvent être calculés grâce à l'une ou l'autre des expressions q_{li}^* , $\{i = 1, 2\}$.

• Cas des surfaces solides

Ici, nous n'avons pas à distinguer les surfaces solides en bord de maille des surfaces solides internes au volume de contrôle. Car dans les deux cas, le flux sera calculé via un coefficient d'échange que l'on doit évaluer. La relation (II.20) peut être exprimée comme une fonction de la fraction molaire de l'espèce k (notée X_k) :

$$\mathbf{d}_k = \nabla X_k + (X_k - Y_k) \nabla (\log P)$$

La contribution du second terme, mettant en jeu le gradient de pression totale est nulle dans le cas d'une paroi solide. On aura donc :

$$\mathbf{d}_k^* \cdot \mathbf{i} = \left(\frac{\partial X_k}{\partial x} \right)^*$$

Dans le cas d'une paroi située à droite de l'écoulement et pour une surface en bord de maille, On utilise des conditions aux limites mixtes (ou mixtes de Robin). C'est à dire

II.4. Effets Diffusifs

que que l'on impose une combinaison linéaire de la fraction molaire et du flux. Ce dernier s'écrit sous la forme

$$q_l^* = h_m S(X_l - X_l^*)$$

Ici, la fraction molaire X_l^* sera imposée et h_m est un coefficient d'échange massique que l'on doit évaluer. Pour calculer le flux associé à une espèce k , on somme les contributions de chacune des autres espèces présentes dans l'écoulement.

En ce qui concerne le flux diffusif associé à l'équation de conservation de l'énergie totale, On utilise la définition du flux d'énergie diffusif (relation (II.18)) :

$$\mathbf{Q} = \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{F}_k \implies \mathbf{Q}^* = \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{F}_k^*$$

II.4.4 Calcul du Coefficient d'Echange aux Parois : h_m

Pour le calcul du coefficient d'échange à la paroi, nous utilisons un nombre sans dimension : le nombre de Sherwood, comparant les effets de transfert de masse convectifs aux effets diffusifs.

$$Sh = \frac{h_m L}{D_{AB}}$$

L est une longueur caractéristique de l'écoulement et D_{AB} le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce A vers l'espèce B. Il est possible d'exprimer le nombre de Sherwood comme une fonction des nombres de Reynolds et de Schmidt. Dans le cas d'une paroi plane, nous utiliserons les corrélations suivantes pour le nombre de Sherwood,

$$\begin{cases} Sh = 0.664 Re_L^{1/2} Sc^{1/3} & \text{si } Re_L < 5.10^5 \\ Sh = 0.0365 Re_L^{4/5} Sc^{1/3} & \text{sinon} \end{cases}$$

Avec :

$$Re_L = \frac{UL}{\nu} \quad \text{et} \quad Sc = \frac{\nu}{D_{AB}}$$

ν est la viscosité cinématique du gaz, U est une vitesse caractéristique et L une longueur caractéristique de l'écoulement.

Nous sommes ainsi en mesure d'exprimer le coefficient d'échange massique au niveau des parois, ce qui nous permet d'y évaluer les flux.

$$h_m = D_{AB} \frac{Sh}{L}$$

Ce coefficient d'échange pourra être utilisé pour calculer le flux de masse au niveau des parois :

$$q_l^* = h_m S(X_l - X_l^*)$$

II.4.5 Cas Tests Unidimensionnels

- Flux nuls aux parois

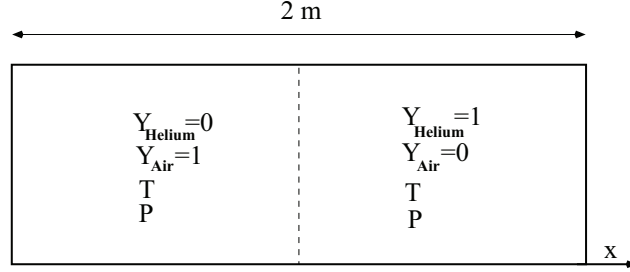


Figure II.12 – Configuration étudiée.

On se place dans une configuration contenant deux espèces, (de l'air et de l'hélium) présentant initialement une discontinuité de fraction massique et donc de densité au milieu d'un domaine fermé. Des conditions limites de type paroi sont utilisées de part et d'autre du domaine. On laisse évoluer le système jusqu'à l'obtention d'une solution stationnaire. La pression et la température sont initialement constantes dans tout le domaine et le gaz est au repos (Figure II.12).

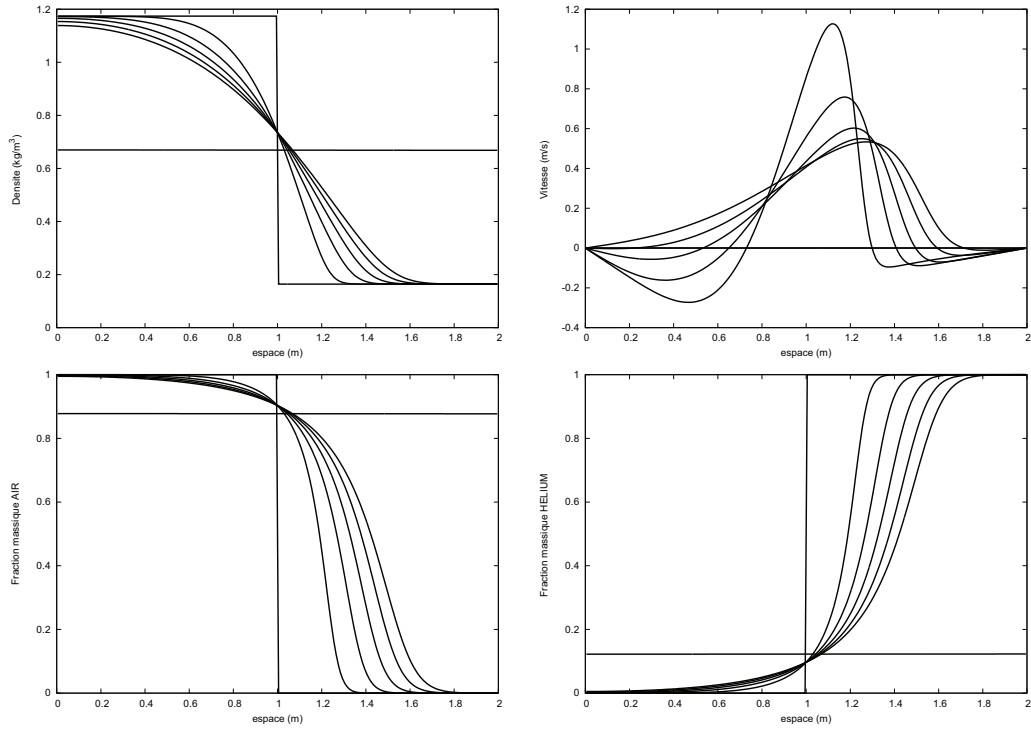


Figure II.13 – Profils de densité, vitesse et fractions massiques des deux espèces (air et Helium) à différents instants. Ici, les flux sont nuls au niveau des parois.

II.4. Effets Diffusifs

Les résultats sont représentés sur la Figure II.13. Les courbes ont été tracées à différents instants afin d’apprécier la diffusion des espèces. Aux temps longs, la solution converge vers une solution stationnaire correspondant à un état uniforme du mélange gazeux dans tout le domaine.

- **Flux non nuls aux parois**

On propose maintenant de reconduire cette simulation en imposant les valeurs des fractions massiques au niveau des parois. Les résultats sont présentés à différents instants sur la Figure II.14. La solution converge également vers un état stationnaire qui ne correspond pas à celui du cas précédent. En effet, un gradient uniforme de densité est obtenu en raison des fractions massiques imposées au niveau des limites.

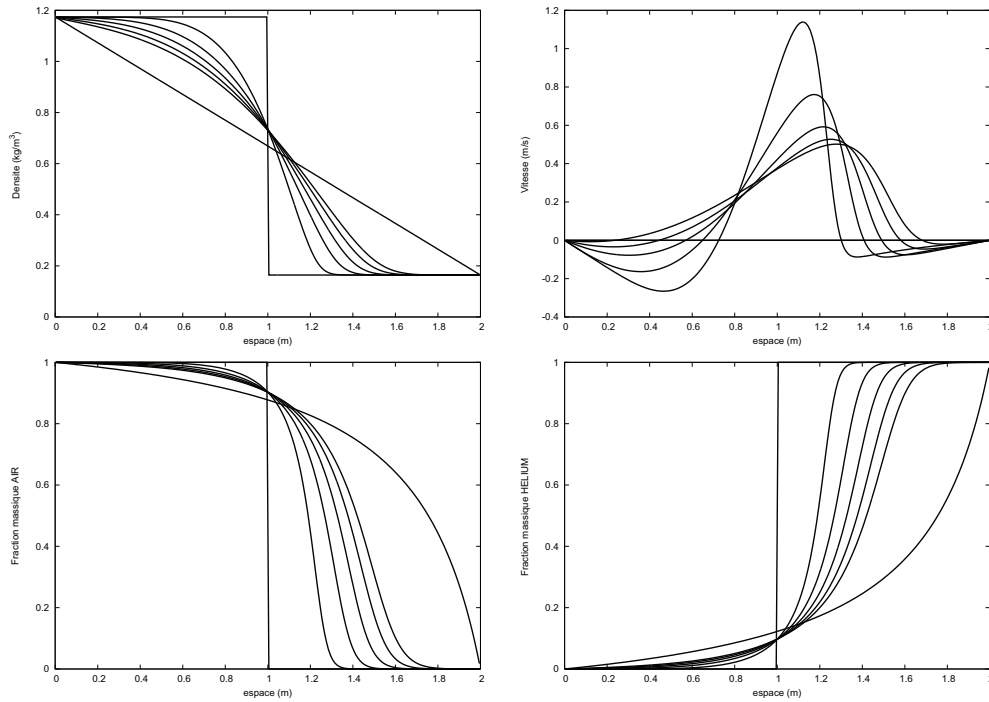


Figure II.14 – Profils de densité, vitesse et fractions massiques des deux espèces (air et helium) à différents instants. Ici, les fractions massiques des deux espèces sont imposées au niveau des parois.

On peut maintenant traiter la diffusion des espèces. Ce qui nous permet d’une part de modéliser la diffusion “turbulente” (avec le coefficient adéquat). D’autre part le dépôt sur les parois solide peut être modélisé grâce à l’imposition des flux sur celles-ci, bien entendu la fraction massique que l’on impose doit être ajustée car la vitesse de dépôt y est directement reliée.

II.5 Modélisation des Echanges Thermiques

L'objectif est de traiter les échanges thermiques susceptibles de se produire dans l'écoulement. En particulier, les échanges avec le sol ou les obstacles solides. Nous ajoutons un terme supplémentaire dans le système (II.19) qui devient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) = 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u} + \mathbf{Q} + \mathbf{q}_T) = 0 \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u} + \mathbf{F}_k) = 0 \quad k = 1, \dots, N \end{array} \right. \quad (\text{II.25})$$

La présence des échanges thermiques modifie uniquement l'équation de conservation de l'énergie totale, dans laquelle un flux de chaleur $\mathbf{q}_T$ a été ajouté.

$$\mathbf{q}_T = -\lambda \nabla T \quad (\text{II.26})$$

Avec λ la diffusivité thermique du mélange gazeux telle que :

$$\lambda = \sum_{k=1}^N Y_k \lambda_k$$

II.5.1 Intégration sur le Volume de Contrôle

Nous devons intégrer ce flux sur le volume de contrôle hétérogène (Figure I.7). Calculons :

$$\Delta t \int_V \mathbf{q}_T dV = \Delta t \int_S \mathbf{q}_T \cdot \mathbf{n} dS \quad (\text{II.27})$$

$$\Delta t \int_S \mathbf{q}_T \cdot \mathbf{n} dS = \Delta t \left(\begin{array}{l} \left\{ \{ \mathbf{q}_T^{*f} S_f \}_{i+1/2} - \{ \mathbf{q}_T^{*f} S_f \}_{i-1/2} + \{ \mathbf{q}_T^{*s} S_s \}_{i+1/2} - \{ \mathbf{q}_T^{*s} S_s \}_{i-1/2} \right\} \cdot \mathbf{i} \\ + \left\{ \{ \mathbf{q}_T^{*f} S_f \}_{j+1/2} - \{ \mathbf{q}_T^{*f} S_f \}_{j-1/2} + \{ \mathbf{q}_T^{*s} S_s \}_{j+1/2} - \{ \mathbf{q}_T^{*s} S_s \}_{j-1/2} \right\} \cdot \mathbf{j} \\ + \left\{ \{ \mathbf{q}_T^{*f} S_f \}_{l+1/2} - \{ \mathbf{q}_T^{*f} S_f \}_{l-1/2} + \{ \mathbf{q}_T^{*s} S_s \}_{l+1/2} - \{ \mathbf{q}_T^{*s} S_s \}_{l-1/2} \right\} \cdot \mathbf{l} \\ + \sum \left\{ \mathbf{q}_T^{*f} S_{fg}^{0x} - \mathbf{q}_T^{*f} S_{fd}^{0x} + \mathbf{q}_T^{*s} S_{sg}^{0x} - \mathbf{q}_T^{*s} S_{sd}^{0x} \right\} \cdot \mathbf{i} \\ + \sum \left\{ \mathbf{q}_T^{*f} S_{fg}^{0y} - \mathbf{q}_T^{*f} S_{fd}^{0y} + \mathbf{q}_T^{*s} S_{sg}^{0y} - \mathbf{q}_T^{*s} S_{sd}^{0y} \right\} \cdot \mathbf{j} \\ + \sum \left\{ \mathbf{q}_T^{*f} S_{fg}^{0z} - \mathbf{q}_T^{*f} S_{fd}^{0z} + \mathbf{q}_T^{*s} S_{sg}^{0z} - \mathbf{q}_T^{*s} S_{sd}^{0z} \right\} \cdot \mathbf{l} \end{array} \right)$$

Il faut évaluer les flux au niveau des surfaces d'intégration, nous procédons de la même manière que pour l'expression du flux diffusif massique. On distinguera là encore les surfaces solides des surfaces fluides.

II.5. Modélisation des Echanges Thermiques

• Cas des surfaces aux bords de maille

Dans le cas unidimensionnel, le flux de chaleur s'exprime de la façon suivante :

$$\mathbf{q}_T^* \cdot \mathbf{i} = -\lambda(\nabla T)^* \cdot \mathbf{i} = -\lambda \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)^* = q_x^*$$

La conservation de l'énergie impose la continuité des flux au niveau des surfaces d'intégration. On utilise les mêmes considérations que pour l'évaluation du flux de masse entre espèces.

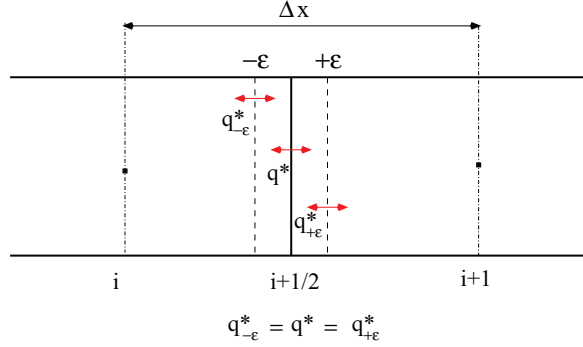


Figure II.15 – Schéma d'étude en bord de maille

On peut écrire l'égalité des flux évalués en $x_{i+1/2} - \varepsilon$ et $x_{i+1/2} + \varepsilon$.

$$q_x^* = -2\lambda \frac{T_{i+1} - T^*}{\Delta x} = -2\lambda \frac{T^* - T_i}{\Delta x}$$

Cela nous permet d'exprimer la température T^* correspondant à la température en bord de maille :

$$T^* = \frac{\lambda_i T_i + \lambda_{i+1} T_{i+1}}{\lambda_i + \lambda_{i+1}}$$

• Cas des surfaces solides

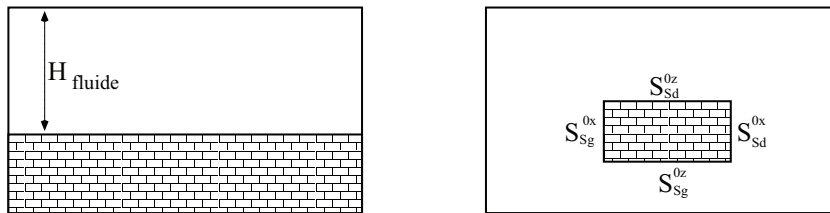


Figure II.16 – Présentation de mailles contenant une partie fluide et une partie solide.

Si des obstacles ou surfaces solides sont présents au sein du volume de contrôle (voir Figure II.16) ou en bord de maille, des conditions aux limites mixtes sont utilisées. Ainsi, on impose le flux sous la forme :

$$q_x^* = h_c S (T_i - T_{paroi}) \quad (\text{II.28})$$

II. Suivi des Champs de Concentration et Phénomènes de Diffusion

Où T_{paroi} est la température de la paroi (donnée du problème). Dans l'expression (II.28), seule la contribution des surfaces normales à la direction $\mathbf{x}$ est représentée. Les termes associés aux deux autres directions sont similaires. h_c correspond au coefficient d'échange de chaleur qu'il s'agit d'évaluer. Ce coefficient tient compte des échanges radiatifs mais également des échanges convectifs au moyen d'une corrélation basée sur le nombre de Nusselt :

$$Nu = \frac{h_{conv}L}{\lambda},$$

où L est une longueur caractéristique du problème et λ correspond à la conductivité thermique du mélange de gaz.

II.5.2 Calcul du Coefficient d'Echange à la Paroi

Nous avons choisi de définir le coefficient d'échange thermique h_c comme la somme d'un coefficient d'échange convectif et d'un coefficient d'échange radiatif, afin de modéliser un coefficient d'échange global.

• Coefficient d'échange convectif

Il existe de nombreuses corrélations pour évaluer le nombre de Nusselt. Ce dernier peut toujours s'exprimer comme une fonction de deux autres nombres sans dimension relatifs à l'écoulement : le nombre de Reynolds et le nombre de Prandtl. On se place dans le cas d'une convection forcée externe pour une paroi plane. La corrélation utilisée dans ce cas est la suivante :

$$Nu = 0.664Re_L^{1/2}Pr^{1/3} \quad \text{si } Re_L < 5.10^5$$

$$Nu = 0.0365Re_L^{4/5}Pr^{1/3} \quad \text{sinon}$$

Avec :

$$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda}.$$

Où μ , est la viscosité cinématique du gaz. Ceci nous permet d'évaluer un coefficient d'échange convectif :

$$h_{conv} = \frac{\lambda Nu}{L}.$$

• Coefficient d'échange radiatif

Le flux de chaleur échangé entre une surface S et le milieu ambiant s'écrit d'après la loi de Stefan,

$$\phi = \varepsilon \sigma S (T_{paroi}^4 - T_a^4)$$

où σ , ε , T_{paroi} et T_a représentent respectivement la constante de Stefan-Boltzmann, l'émissivité de la surface, la température de la paroi et la température de l'air environnant. L'expression de ce flux de chaleur radiatif est non linéaire. Cependant, elle peut être linéarisée

II.5. Modélisation des Echanges Thermiques

dans la mesure où la différence de température entre la paroi et le gaz environnant est faible. On peut alors écrire,

$$\phi = \varepsilon \sigma T_m^3 S (T_{paroi} - T_a)$$

où $T_m = \frac{T_a + T_{paroi}}{2}$ est la température moyenne. Le coefficient d'échange radiatif peut ensuite être mis sous la forme utile suivante,

$$h_{ray} = 4\varepsilon \sigma T_m^3.$$

Et finalement le coefficient d'échange global h_c s'écrit :

$$h_c = h_{conv} + h_{ray} = \frac{\lambda Nu}{L} + 4\varepsilon \sigma T_m^3 \quad (\text{II.29})$$

II.5.3 Cas Test Unidimensionnel

Considérons une configuration unidimensionnelle simple. Soit un gaz au repos contenu dans une enceinte fermée. Les limites de gauche et de droite sont des parois dont les températures sont imposées (Figure II.17). La conductivité thermique du gaz est constante dans tout le domaine. On laisse évoluer le système jusqu'à tendre vers une solution stationnaire

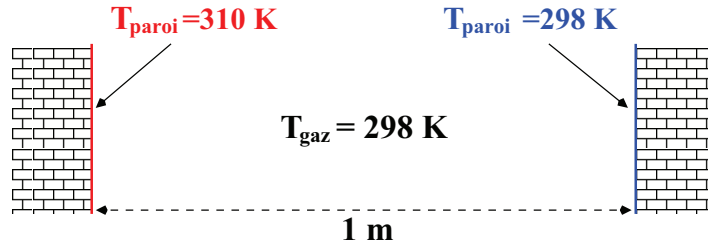


Figure II.17 – Configuration étudiée. Un gaz au repos entre deux parois dont les températures sont différentes.

La Figure II.18 montre l'évolution de la température au cours du temps. La solution converge bien vers le profil stationnaire linéaire attendu entre les deux parois.

Le modèle prend maintenant en compte les transferts thermiques, ainsi que la diffusion massique. D'autre part, la diffusion numérique sur les fractions massiques des espèces chimiques a été réduite par l'implémentation du schéma ADER à l'ordre 3.

Le développement d'un code de calcul tridimensionnel pour la dispersion nécessite un traitement rigoureux des conditions aux limites, ainsi que de conditions initiales appropriées pour les variables de l'écoulement. Ceci est l'objet du chapitre suivant qui traite des conditions aux limites et introduit des notions sur la stabilité des basses couches de l'atmosphère.

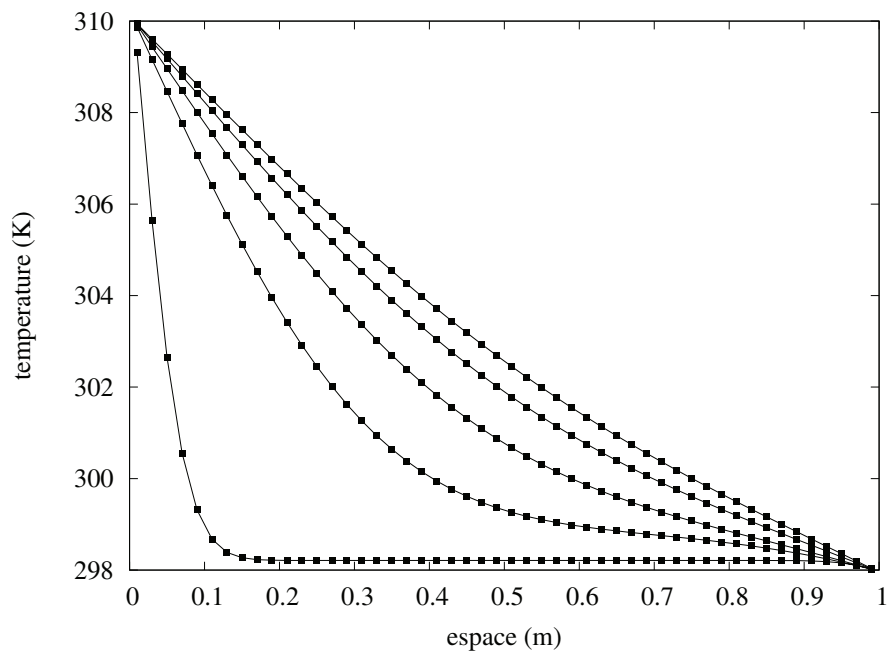


Figure II.18 – Profils de température obtenus à différents instants, la solution tend vers un état stationnaire.

Chapitre III

Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques

La description mathématique du traitement des conditions aux limites dans le cadre de l'étude des systèmes hyperboliques a fait l'objet de nombreux développements [6,23,34] (position du problème, existence et unicité des solutions). Dans [27], on présente à la fois l'approche mathématique et les méthodes numériques disponibles. Le traitement numérique des conditions aux limites pour les écoulements compressibles n'est pas trivial et présente deux difficultés majeures qui sont résumées ci dessous.

- Dans un écoulement subsonique, certaines limites évoluent en fonction des variables internes à l'écoulement et d'autres en fonction des variables externes (par exemple, dans le cas d'un réservoir connecté à un écoulement). Pour chaque type de situation, il convient de construire un solveur de limite spécifique, car les variables externes dont on dispose sont différentes : il est possible d'avoir des limites à pression imposée, vitesse imposée ou encore à débit masse imposé.
- Entre le milieu extérieur et la limite, l'écoulement est généralement multidimensionnel. Il est alors impossible de le décrire puisqu'il n'existe pas de maillage à l'extérieur du domaine de calcul. Il s'agit donc de résumer au mieux la dynamique de l'écoulement extérieur au moyen de relations analytiques, ce qui constitue une tâche difficile en plusieurs dimensions d'espace.

Il est d'usage de qualifier ce type de problématiques de “demi problèmes de Riemann”. La terminologie “demi” provient du fait que sur un côté de la limite, on utilise les relations classiques associées au problème de Riemann des équations d'Euler. De l'autre côté, ces relations sont remplacées soit par des expressions venant résumer l'écoulement multidimensionnel, soit par des données telles que la pression, les vitesses ou encore le débit massique spécifique. D'autres choix sont évidemment possibles. Notons que la condition

III. Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques

limite de type “réservoir” ne peut être réalisée à l’aide de l’équation du mouvement ou de ses invariants, car une discontinuité géométrique est présente (la jonction réservoir-entrée visible sur la Figure III.2). Cette équation est remplacée par l’équation d’évolution de l’entropie. Ceci suppose que la thermodynamique du fluide, en particulier l’entropie, peut être déterminée. Dans nos formulations, le calcul de l’ensemble de la thermodynamique est réalisable.

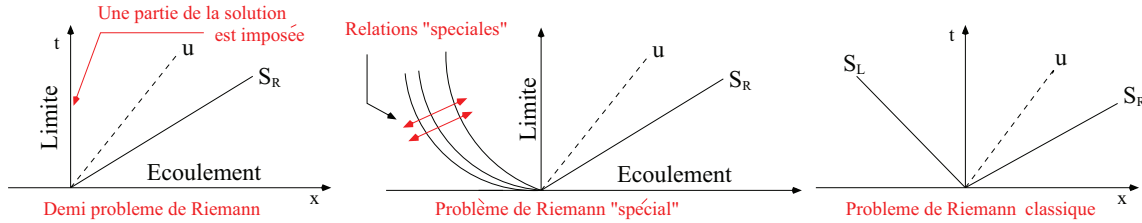


Figure III.1 – Diagramme d’ondes du demi-problème de Riemann (à gauche) et du problème de Riemann spécial (au milieu), dans le cas d’une limite situé à gauche de l’écoulement comparé au diagramme d’onde du problème de Riemann classique (à droite).

Les limites peuvent être de différentes natures : solides (parois imperméables) ou fluides. Les limites fluides contiennent elles-mêmes différents cas de figure selon la configuration de l’écoulement interne. L’écoulement peut être entrant ou sortant, subsonique ou supersonique. Des solveurs adaptés à chaque type de limite ont donc été développés. Ces limites sont traitées soit par des demi-problème de Riemann, soit par des problèmes de Riemann spéciaux (Figure III.1). Les différents types de limites sont explicitées dans le cadre de la loi des gaz parfaits.

III.1 Limites “d’Entrée”

Dans cette section nous traitons deux types de limites d’entrée : la limite de type réservoir et la limite de type injection.

III.1.1 Limite d’Entrée Réservoir

Ce type de limite est utilisé pour simuler des écoulements issus de réservoir de grandes dimensions dans lesquels les variables thermodynamiques telles que la pression et la température sont considérées comme étant constantes au cours du temps. Ce type de limite permet de traiter par exemple l’éclatement d’une conduite de gaz ou d’un réservoir de stockage. La difficulté principale inhérente à ce type de limite provient du caractère multidimensionnel de l’écoulement issu du réservoir, aux abords d’une section d’entrée, qu’il faut résumer par des relations simples. Pour ce faire, nous avons besoin d’une équation d’évolution supplémentaire par rapport au cas classique, celle-ci peut être déduite des équations d’Euler. Par définition, le gaz est au repos dans le réservoir, la température, la pression ainsi que la composition du gaz contenu dans le réservoir sont connues.

III.1. Limites "d'Entrée"

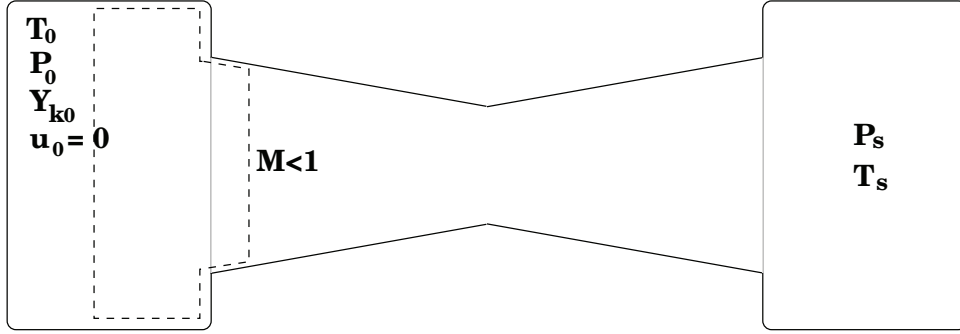


Figure III.2 – Schématisation d'une limite d'entrée réservoir et visualisation du volume de contrôle (en pointillés).

A partir de la formulation en variables primitives des équations d'Euler, on peut montrer que l'équation associée à l'énergie interne s'écrit :

$$\frac{de}{dt} + \frac{P}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

En utilisant l'identité de Gibbs, on obtient une équation de conservation sur l'entropie valide uniquement en l'absence de choc.

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} s) = 0 \quad (\text{III.1})$$

Le système admet maintenant une équation supplémentaire et s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) = 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) = 0 \quad k = 1, \dots, N \\ \frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} s) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{III.2})$$

D'ordinaire, l'équation sur l'entropie est inutile. L'ensemble de l'état thermodynamique est déterminé par les quatre premières équations du système (III.2). Par ailleurs, l'équation sur l'énergie totale est en général préférée car celle-ci est valide en tout point, y compris en présence de choc.

Entre le réservoir et la section d'entrée, l'écoulement est multidimensionnel. L'intégration des équations instationnaires est impossible. On suppose alors que l'écoulement est permanent entre l'entrée et le réservoir. Cette hypothèse sera faite à chaque pas de temps

III. Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques

pour calculer les débits entrants dans le domaine de calcul. Notons enfin que l'écoulement est subsonique par nature à cet endroit (ou sonique dans le cas où la section d'entrée correspond à la section critique).

L'écoulement étant supposé permanent, intégrons les équations de conservation de la masse de chaque espèce sur le volume de contrôle représenté sur la Figure III.2.

$$\int_V \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) dV = \int_S \rho Y_k \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS = 0.$$

En supposant l'écoulement unidimensionnel dans les sections droites situées à l'entrée de la conduite et dans le réservoir (dirigé suivant la normale de la section d'entrée), on a :

$$(\rho Y_k u S)_e = (\rho Y_k u S)_0$$

En sommant sur toutes les espèces, on obtient :

$$\sum_{k=1}^N (\rho Y_k u S)_e = \sum_{k=1}^N (\rho Y_k u S)_0 \iff (\rho u S)_e = (\rho u S)_0 \quad (\text{III.3})$$

La contribution des intégrales sur les parois latérales est nulle en raison de la condition de glissement. L'utilisation directe de (III.3) est néanmoins impossible. En effet, par définition des conditions limites de type réservoir, $\mathbf{u}_0 = 0$ m/s et $S_0 = \infty$. Ces dernières relations impliquent le fait que l'équation (III.3) est une forme indéterminée. Elle permet néanmoins d'obtenir l'invariance de la fraction massique entre l'intérieur du réservoir et la section d'entrée :

$$Y_{ke} = Y_{k0} \quad (\text{III.4})$$

L'intégration de l'équation de conservation de la quantité de mouvement pose également un problème lié à l'intégration de la pression au niveau des parois. En effet, celle-ci est inconnue le long de la paroi, ce qui rend cette équation inutilisable. Il faut maintenant intégrer l'équation de conservation de l'énergie totale dans le cas stationnaire.

$$\int_V \nabla \cdot ((\rho E + P) \mathbf{u}) dV = \left\{ \rho u \left(E + \frac{P}{\rho} \right) S \right\}_e - \left\{ \rho u \left(E + \frac{P}{\rho} \right) S \right\}_0 = 0$$

Cette relation peut être simplifiée en utilisant la relation (III.3). En notant H l'enthalpie totale, il reste :

$$\left(E + \frac{P}{\rho} \right)_e = \left(E + \frac{P}{\rho} \right)_0 \implies H_e = H_0 \quad (\text{III.5})$$

Nous disposons maintenant d'une première relation utilisable pour déterminer les relations de passage entre le réservoir et l'entrée du domaine considéré. Intégrons enfin la dernière équation du système (III.2) dans le cas stationnaire :

$$\int_V \nabla \cdot (\rho s \mathbf{u}) dV = (\rho u s S)_e - (\rho u s S)_0 = 0$$

III.1. Limites “d’Entrée”

Compte tenu de l’équation (III.3), on obtient :

$$s_e = s_0 \quad (III.6)$$

En utilisant les relations (III.6) et (III.4), l’identité de Gibbs se réduit à :

$$de = \frac{P}{\rho^2} d\rho \implies \left. \frac{\partial e}{\partial \rho} \right|_p d\rho + \left. \frac{\partial e}{\partial P} \right|_\rho dP = \frac{P}{\rho^2} d\rho$$

L’utilisation de la loi d’état des gaz parfaits (relation (I.2)) nous donne :

$$\frac{dP}{P} = \gamma \frac{d\rho}{\rho}$$

Cette relation s’intègre aisément pour donner :

$$\left(\frac{P}{\rho^\gamma} \right)_e = \left(\frac{P}{\rho^\gamma} \right)_0. \quad (III.7)$$

Finalement, les relations (III.7), (III.6) et (III.4) peuvent être utilisées pour déterminer l’état dans la section d’entrée. En supposant que les vitesses transverses sont nulles, ce qui revient à supposer que l’écoulement entrant est normal à la section d’entrée (ceci reste conforme aux hypothèses de départ), la relation (III.5) peut se mettre sous la forme :

$$\frac{P_e}{\rho_e(\gamma - 1)} + \frac{u_e^2}{2} + \frac{P_e}{\rho_e} = \frac{P_0}{\rho_0(\gamma - 1)} + \frac{P_0}{\rho_0}$$

Ceci nous permet d’exprimer la vitesse au niveau de la section d’entrée (en utilisant (III.7)),

$$u_e^2 = \frac{2\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{P_0}{\rho_0} - \frac{P_e}{\rho_e} \right) = \frac{2c_0^2}{\gamma - 1} \left\{ 1 - \left(\frac{P_e}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right\} \quad (III.8)$$

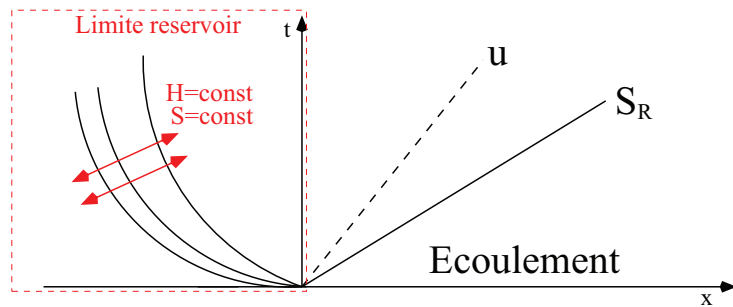


Figure III.3 – Représentation du diagramme d’ondes dans le cas où la limite de gauche est connectée à un réservoir. Les ondes faisant face à gauche sont courbes car leur vitesse de propagation varie dans le réservoir où l’écoulement est multidimensionnel.

Une condition nécessaire d’existence de la solution apparaît dans la relation (III.8). En

III. Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques

effet, il faut $P_e < P_0$ pour que la condition limite d'entrée de type réservoir soit envisagée. Dans le cas contraire, l'écoulement est sortant, c'est à dire que l'écoulement "alimente" le réservoir. Ceci fait l'objet d'une autre section. Soit u^* la vitesse au niveau de la section d'entrée du réservoir. On utilisera $u^* = \sqrt{u_e^2}$ si la limite est à gauche, et on choisira $u^* = -\sqrt{u_e^2}$ dans le cas contraire.

Les relations (III.8) et (III.7) sont à utiliser dans un solveur de Riemann spécial. Dans le cas où la limite est à gauche de l'écoulement, celles-ci constituent les relations pour l'onde de gauche, les relations pour l'onde de droite sont soit les relations de Rankine-Hugoniot, soit les relations isentropiques (voir Figure (III.3)).

III.1.2 Limite d'entrée de type injection

On utilisera ce type de limite dans le cas où l'on souhaite simuler une injection à débit massique imposé. Contrairement à la limite de type réservoir, la limite d'injection n'admet qu'une unique solution correspondant à un écoulement entrant. Il s'agit dans ce cas de résoudre un "demi problème de Riemann". En effet, les ondes se propageant à l'extérieur ne sont pas prises en compte. Sur la Figure III.4, on a représenté le diagramme d'ondes associé à ce type de limite.

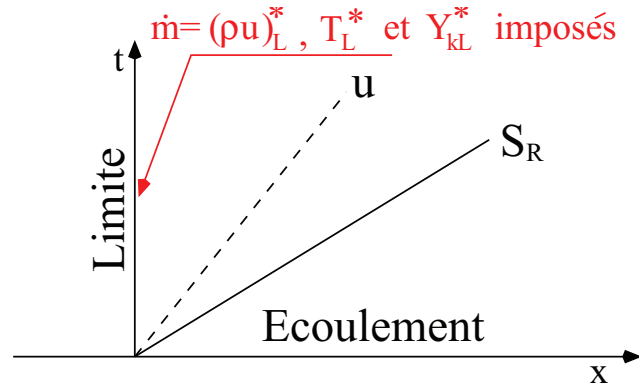


Figure III.4 – Représentation du diagramme d'ondes dans le cas où la limite "de gauche" est à débit et température imposés (condition d'injection).

Le débit surfacique traversant la section d'entrée, la température du fluide entrant ainsi que la composition du gaz injecté sont connus (il est néanmoins possible d'utiliser d'autres jeux de variables). Ainsi, au niveau de la limite sont imposés :

$$T_l^*, \quad \dot{m}^* \quad \text{et} \quad Y_{kl}^*.$$

Il reste donc à déterminer la pression ainsi que toutes les autres grandeurs nécessaires au calcul des flux, c'est à dire :

$$P^*, \quad u^* \quad \text{et} \quad \rho_l^*$$

III.2. Limites de Sortie

Pour cela, écrivons l'équation d'état liant la pression à la température,

$$P^* = (\gamma - 1)\rho_l^* c_v T_l^*.$$

On peut exprimer la densité ρ_l^* comme une fonction de la vitesse u^* et du débit masse $\dot{m}^*$:

$$P^* = \frac{(\gamma - 1)\dot{m}^* C_v T_l^*}{u^*}.$$

On obtient une relation reliant vitesse et pression :

$$u^* = \frac{\dot{m}(\gamma - 1)\rho_l^* C_v T_l^*}{P^*} = \Phi_l(P^*) \quad (\text{III.9})$$

Les relations pour l'onde se propageant à droite sont inchangées et l'on dispose d'une relation sous la forme :

$$u^* = u_r + \Phi_r(P^*) \quad (\text{III.10})$$

En combinant les relations (III.9) et (III.10), on obtient une forme polynomiale de la pression P^* .

$$u_r + \Phi_r(P^*) - \Phi_l(P^*) = 0$$

Cette dernière équation est résolue de façon itérative. Connaissant la pression P^* , la vitesse u^* peut être calculée par l'une ou l'autre des relations (III.9) et (III.10), et la densité ρ_l^* peut alors être déduite.

Les écoulements multidimensionnels nécessitent l'ajout de données supplémentaires, à savoir les vitesses transverses v_l^* et w_l^* qui permettront de calculer les flux associés à ces grandeurs. En effet l'injection peut ne pas être normale à la surface d'entrée contrairement au cas de la limite d'entrée de type réservoir.

Lorsque la limite se situe à droite, les variables imposées sont T_r^* , $\dot{m} = \rho_r^* u^*$, Y_{kr}^* ainsi que v_r^* et w_r^* . Le diagramme d'ondes associé est représenté sur la Figure III.5. La procédure de résolution est similaire au cas de la limite située à gauche.

III.2 Limites de Sortie

On considère ce type de limite lorsque la condition limite d'entrée de type réservoir n'admet pas de solution. La difficulté de traitement des conditions de sortie est liée à la présence d'un écoulement dont l'évolution peut être multidimensionnelle. Deux cas sont à distinguer : les limites de sortie **subsonique** et **supersonique**. La transition entre ces deux régimes se fait de manière continue. La résolution du problème de Riemann lié à ce type de limite n'est pas itérative : les différentes variables nécessaires au calcul des flux sont obtenues analytiquement.

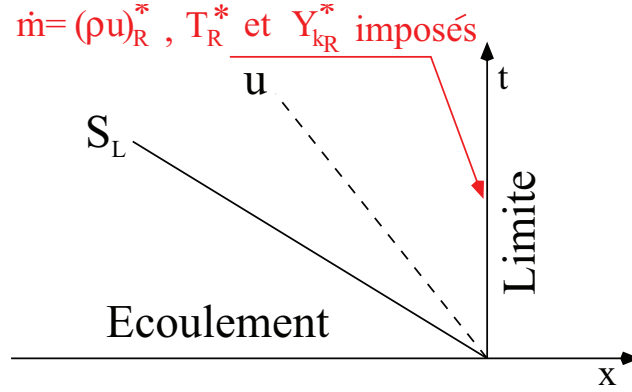


Figure III.5 – Représentation du diagramme d’ondes dans le cas où la limite “de droite” est à débit et température imposés (condition d’injection).

III.2.1 Limite de Sortie Subsonique

Plaçons nous dans le cas où la limite se situe “à gauche” de l’écoulement. L’écoulement étant subsonique, une onde reste dans le domaine de calcul tandis que les deux autres en sortent comme indiqué sur la Figure III.6.

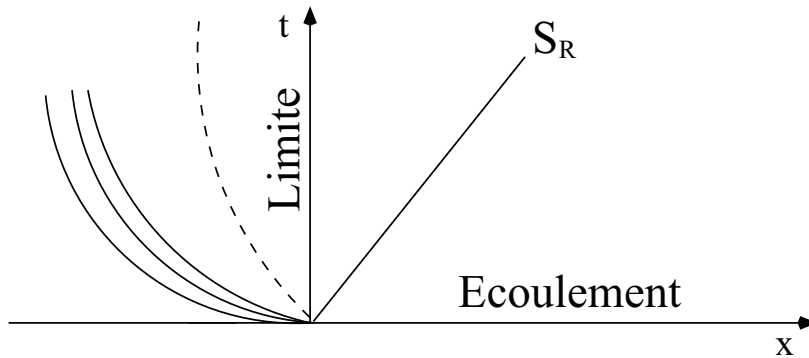


Figure III.6 – Représentation du diagramme d’ondes dans le cas d’une limite de sortie subsonique situé à gauche de l’écoulement.

L’écoulement qui se propage à l’extérieur est parcouru par des ondes multidimensionnelles qui ont pour effet d’imposer rapidement la pression extérieure à l’intérieur de l’écoulement sortant. L’hypothèse qui est alors faite consiste à supposer que la pression extérieure P_l s’impose dans l’immédiate sortie de la conduite. Ainsi :

$$P^* = P_l$$

L’ensemble de l’état du fluide sortant est alors déterminé de manière directe par les relations associées à l’onde se propageant à droite (relations isentropiques ou relations de Rankine-Hugoniot) :

$$\begin{cases} u^* &= f_1(P^*, P_r, u_r) \\ \rho^* = \rho_r^* &= f_2(P^*, P_r, \rho_r) \end{cases}$$

III.2. Limites de Sortie

Les vitesses transverses ainsi que les fractions massiques à prendre en compte pour le calcul des flux sont celles associées à l'écoulement interne.

$$\begin{cases} v^* &= v_r \\ w^* &= w_r \\ Y_k^* &= Y_{kr}^* \end{cases}$$

Si la limite de sortie subsonique se situe à droite, le même raisonnement s'applique en utilisant cette fois ci les relations isentropiques ou de Rankine-Hugoniot à gauche, en imposant la pression au niveau de la limite : $P^* = P_r$.

Étudions maintenant le cas d'un écoulement sortant supersonique.

III.2.2 Sortie Supersonique : “absorption généralisée”

Dans ce cas, les trois ondes élémentaires sortent du domaine (Figure III.7). Le flux est alors calculé à l'aide de l'état du fluide dans la dernière maille du domaine, puisqu'aucune variation véhiculée par le passage des ondes n'est présente. Ainsi les informations provenant de l'extérieur n'ont aucune influence sur l'écoulement. Pour une sortie supersonique à gauche, on a :

$$\mathbf{W}^* = (\rho^*, \mathbf{u}^*, P^*, Y_k^*)^t = (\rho_r, \mathbf{u}_r, P_r, Y_{kr})^t = \mathbf{W}_r$$

Où $\mathbf{W}_r$ est l'état de la première maille du domaine (à droite de la limite). De la même façon, si la limite se situe à droite, on aura :

$$\mathbf{W}^* = \mathbf{W}_l$$

Où $\mathbf{W}_l$ est l'état de la dernière maille du domaine (à gauche de la limite).

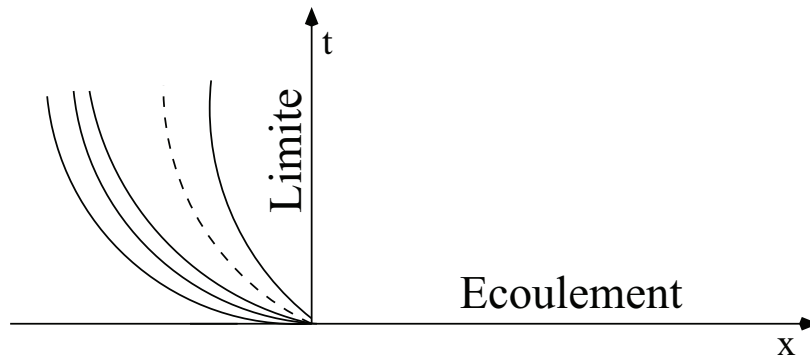


Figure III.7 – Représentation du diagramme d'ondes dans le cas d'une limite de sortie supersonique à gauche : les trois ondes élémentaires sortent du domaine.

III.3 Limite de type “Vitesse Imposée”

On impose le champ de vitesse au niveau de cette limite. Elle est particulièrement bien adaptée pour la prise en compte des conditions météorologiques. La température ainsi que la composition du gaz entrant sont également imposées au niveau de la limite. Il est possible de faire varier ces différentes grandeurs avec l'altitude mais cela ne change en rien la résolution du demi-problème de Riemann associé.

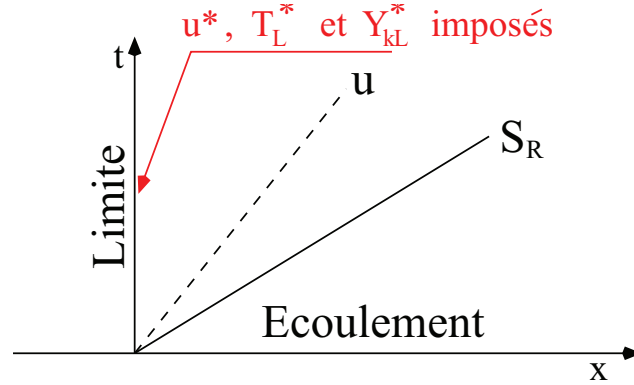


Figure III.8 – Représentation du diagramme d'onde dans le cas d'une limite de type “vitesse imposée”.

Dans un premier temps, on considère une limite située à gauche, comme représentée sur la Figure III.8. La vitesse u^* et la température T_l^* sont connues ainsi que les fractions massiques des constituants du fluide. On dispose également de l'état dans la maille immédiatement à droite de la limite. Deux cas sont à distinguer pour le calcul de la pression.

- Si $u^* < u_r$, un faisceau d'ondes de détente se propage dans l'écoulement, on utilise les relations isentropiques à droite, pour obtenir une expression de la pression P^* :

$$P^* = P_r \left\{ 1 + \frac{\gamma_r - 1}{2c_r} (u^* - u_r) \right\}^{\frac{2\gamma_r}{\gamma_r - 1}}$$

- Si $u^* > u_r$, une onde de choc se propage dans l'écoulement. Dans ce cas, on utilise les relations de Rankine-Hugoniot à droite et on obtient :

$$P^* = P_r + \rho_r (u^* - u_r) \left\{ \frac{\gamma_r + 1}{4} (u^* - u_r) + \sqrt{c_r^2 + \left(\frac{\gamma_r + 1}{4} (u^* - u_r) \right)^2} \right\}$$

III.4. Limite de Type “Paroi”

Si la limite se situe “à droite” de l’écoulement, la même méthodologie est utilisée, comme décrit ci-après.

- Si $u^* > u_l$, une onde de détente se propage dans l’écoulement, on utilise les relations isentropiques et on obtient :

$$P^* = P_l \left\{ 1 + \frac{\gamma_l - 1}{2c_l} (u_l - u^*) \right\}^{\frac{2\gamma_l}{\gamma_l - 1}}$$

- Si $u^* < u_l$, une onde de choc se propage dans l’écoulement. Dans ce cas, on utilise les relations de Rankine-Hugoniot pour l’onde de gauche :

$$P^* = P_l + \rho_l(u_l - u^*) \left\{ \frac{\gamma_l + 1}{4} (u_l - u^*) + \sqrt{c_l^2 + \left(\frac{\gamma_l + 1}{4} (u_l - u^*) \right)^2} \right\}$$

L’ensemble des autres grandeurs solutions du demi-problème de Riemann peuvent ensuite être déduites. La limite de type “vitesse imposée” doit pouvoir laisser sortir les ondes lorsque celles-ci engendrent des variations de pression trop importantes (onde de choc engendrée par une forte explosion par exemple). Ainsi, suivant la valeur du rapport de pression $\frac{P^*}{P_r}$ (ou $\frac{P^*}{P_l}$ si la limite est à droite), la condition de type “vitesse imposée” peut être remplacée par une limite de type réservoir à tout moment et en tout lieu. Ce sera effectivement le cas lorsque le rapport de pression sera trop important.

III.4 Limite de Type “Paroi”

On utilise ce type de limite dans le cas où l’écoulement est en contact avec un solide imperméable et immobile (un mur par exemple). Notons que la prise en compte des vitesses transverses est inutile, les flux associés étant identiquement nuls. La solution du demi-problème de Riemann est obtenue directement.

Plaçons nous dans le cas où la paroi se situe à gauche (Figure III.9). On sait que la vitesse au niveau de la limite est nulle, $u^* = 0$. Reste à calculer la pression, seule variable contribuant au calcul des flux. Le raisonnement effectué pour le calcul de la pression est similaire à celui opéré pour la limite de type “vitesse imposée”, à la différence près que cette fois $u^* = 0$.

- Si $u_r > 0$, un faisceau d’ondes de détente se propage dans l’écoulement, on utilise les relations isentropiques à droite, ce qui nous permet d’obtenir une expression pour la pression P^* :

$$P^* = P_r \left\{ 1 - \frac{\gamma_r - 1}{2c_r} u_r \right\}^{\frac{2\gamma_r}{\gamma_r - 1}}$$

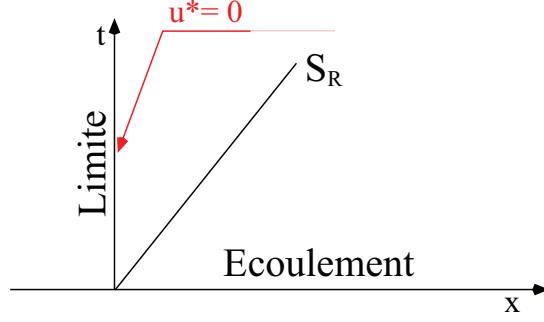


Figure III.9 – Représentation du diagramme d'onde dans le cas d'une limite de type paroi à gauche.

- Si $u_r < 0$, une onde de choc se propage dans l'écoulement. Dans ce cas, on utilise les relations de Rankine-Hugoniot à droite et il vient :

$$P^* = P_r + \rho_r u_r^2 \frac{\gamma_r + 1}{4} + \sqrt{(\rho_r u_r c_r)^2 + \left(\frac{\gamma_r + 1}{4} \rho_r u_r^2 \right)^2}$$

Si la limite se situe à droite, on procède identiquement :

- Si $u_l < 0$, un faisceau d'ondes de détente se propage dans l'écoulement, on utilise les relations isentropiques à gauche, ce qui nous permet d'obtenir une expression pour la pression P^* :

$$P^* = P_l \left\{ 1 + \frac{\gamma_l - 1}{2c_l} u_l \right\}^{\frac{2\gamma_l}{\gamma_l - 1}}$$

- Si $u_l > 0$, une onde de choc se propage dans l'écoulement. Dans ce cas, on utilise les relations de Rankine-Hugoniot à gauche et on obtient :

$$P^* = P_l + \rho_l u_l^2 \frac{\gamma_l + 1}{4} + \sqrt{(\rho_l u_l c_l)^2 + \left(\frac{\gamma_l + 1}{4} \rho_l u_l^2 \right)^2}$$

III.5 Validation des Conditions aux Limites

Dans cette section, nous présentons différents tests de validation pour les conditions aux limites. Nous étudions des écoulements monodimensionnels en régime permanent dans une tuyère convergent-divergent car des solutions analytiques sont connues et peuvent être obtenues aisément. Cette étude nous permet de valider quantitativement les conditions aux limites décrites précédemment. Pour cela, les équations d'Euler instationnaires sont résolues grâce à un schéma de Godunov (dans le cadre d'écoulements à section variable). La solution stationnaire vers laquelle converge le calcul numérique dépend directement du traitement des conditions aux limites.

III.5. Validation des Conditions aux Limites

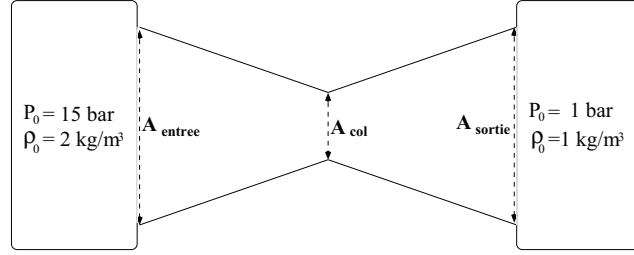


Figure III.10 – Schéma de la tuyère symétrique (configuration 1).

Soit une tuyère symétrique, constituée d'un convergent et d'un divergent, telle que représentée sur la Figure III.10. Dans un premier temps, on utilisera les dimensions suivantes :

$$A_{\text{entree}} = A_{\text{sortie}} = 0.35 \text{ m}^2 \quad \text{et} \quad A_{\text{col}} = 0.15 \text{ m}^2$$

La première configuration implique une condition limite de type réservoir en entrée et en sortie de la tuyère. La configuration étudiée est schématisée sur la Figure III.10. L'entrée de la tuyère est connectée à un réservoir tel que $P_0 = 15 \text{ bar}$ et $\rho_0 = 2 \text{ kg/m}^3$. La sortie est connectée à un réservoir dont la pression est de 1 bar et la densité 1 kg/m^3 . Le fluide en écoulement est de l'air ($\gamma = 1.4$).

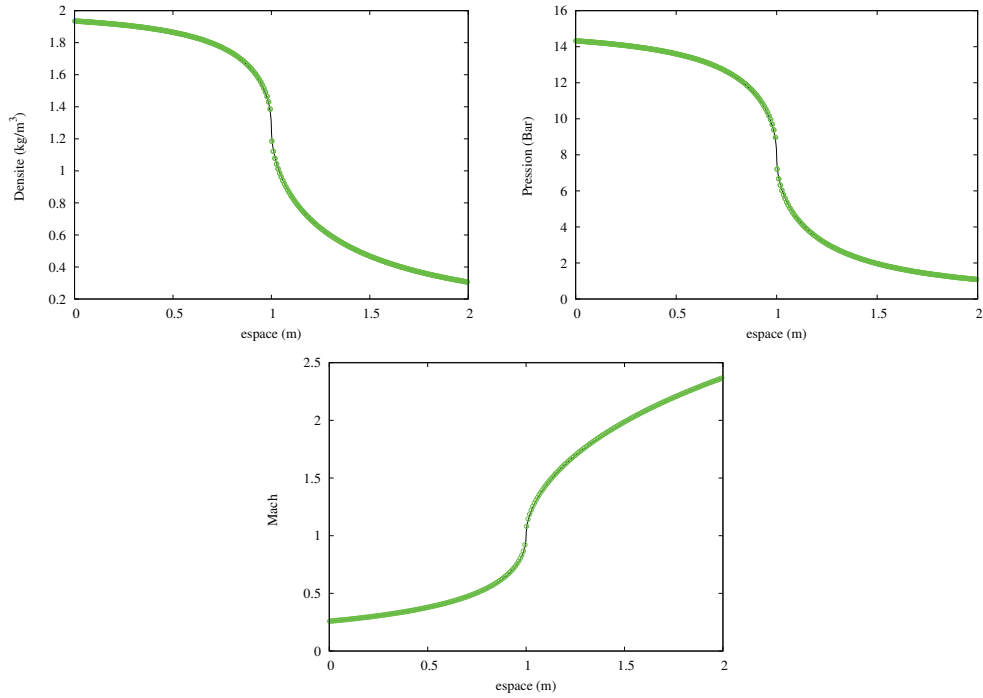


Figure III.11 – Comparaison entre la solution exacte (représentée en trait plein noir) et la solution stationnaire obtenue numériquement sur 500 points de maillage (représentée en symboles verts).

III. Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques

Ce problème admet une solution exacte consistant en un écoulement isentropique tout au long de la tuyère. L'écoulement est subsonique dans le convergent et supersonique dans le divergent. Sur la Figure III.11, on compare la solution exacte avec la solution stationnaire obtenue numériquement. L'accord entre les deux solutions est parfait.

Envisageons maintenant une configuration pour laquelle une onde de choc stationnaire est présente dans le divergent. La géométrie de la tuyère est conservée. Cependant, la condition limite réservoir est modifiée à l'entrée de celle-ci, où l'on utilise cette fois $P_0 = 2 \text{ bar}$ et $\rho_0 = 2 \text{ kg/m}^3$ (Figure III.12).

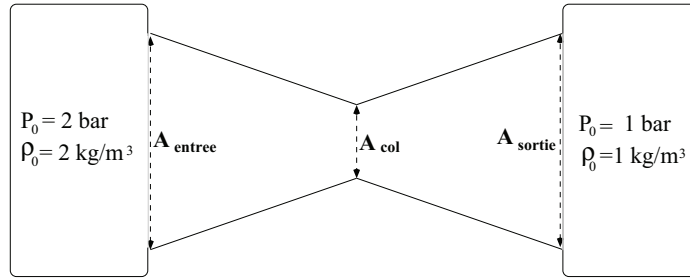


Figure III.12 – Schéma de la tuyère symétrique (configuration 2).

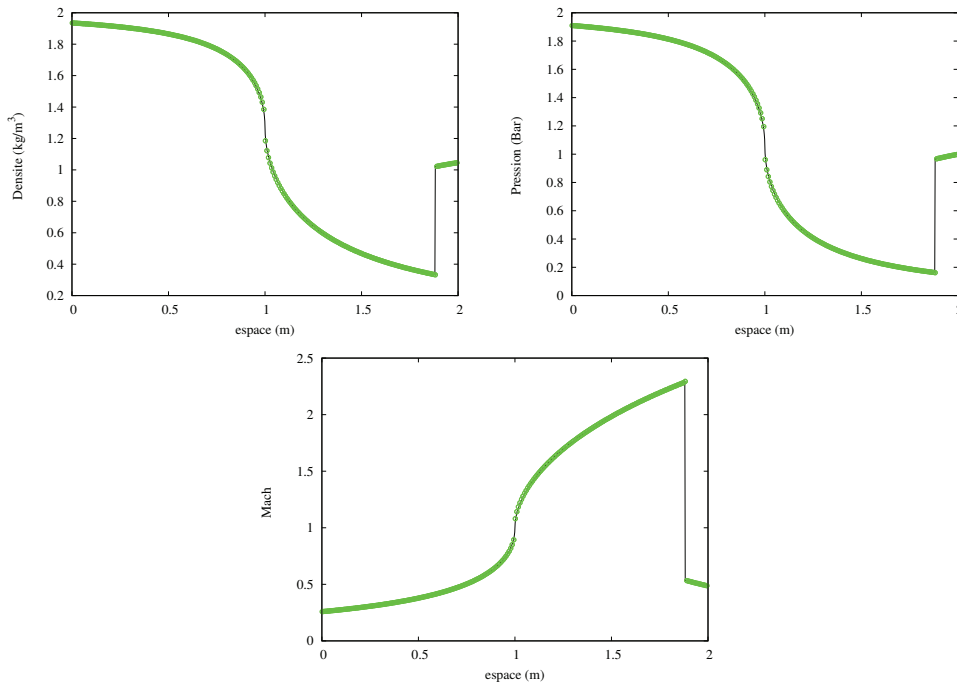


Figure III.13 – Comparaison entre la solution exacte (représentée en trait plein noir) et la solution stationnaire obtenue numériquement sur 500 points de maillage (représentée en symboles verts).

III.5. Validation des Conditions aux Limites

On dispose d'une solution exacte pour ce problème : l'écoulement est subsonique dans le convergent, sonique au col et supersonique dans le divergent jusqu'au choc stationnaire. L'écoulement redevient subsonique à travers celui-ci et le reste jusqu'à la sortie dans le réservoir de droite. Les résultats obtenus dans cette configuration sont reportés sur la Figure III.13. Cette fois encore, la solution stationnaire calculée numériquement se superpose parfaitement à la solution exacte. En particulier, la position de l'onde de choc est parfaitement reproduite.

On modifie maintenant la géométrie de la tuyère, dont les dimensions deviennent :

$$A_{entree} = A_{sortie} = 0.0365 \text{ m}^2 \quad \text{et} \quad A_{col} = 0.016 \text{ m}^2$$

A présent, une condition de type "injection" est utilisée à gauche dont les caractéristiques sont, $\dot{m} = 21 \text{ g.s}^{-1}$ et $T = 279 \text{ K}$. La sortie est connectée à un réservoir dont les caractéristiques sont : $P_0 = 900 \text{ Pa}$ et $\rho_0 = 0.1 \text{ kg/m}^3$ (Figure III.14 en haut à gauche).

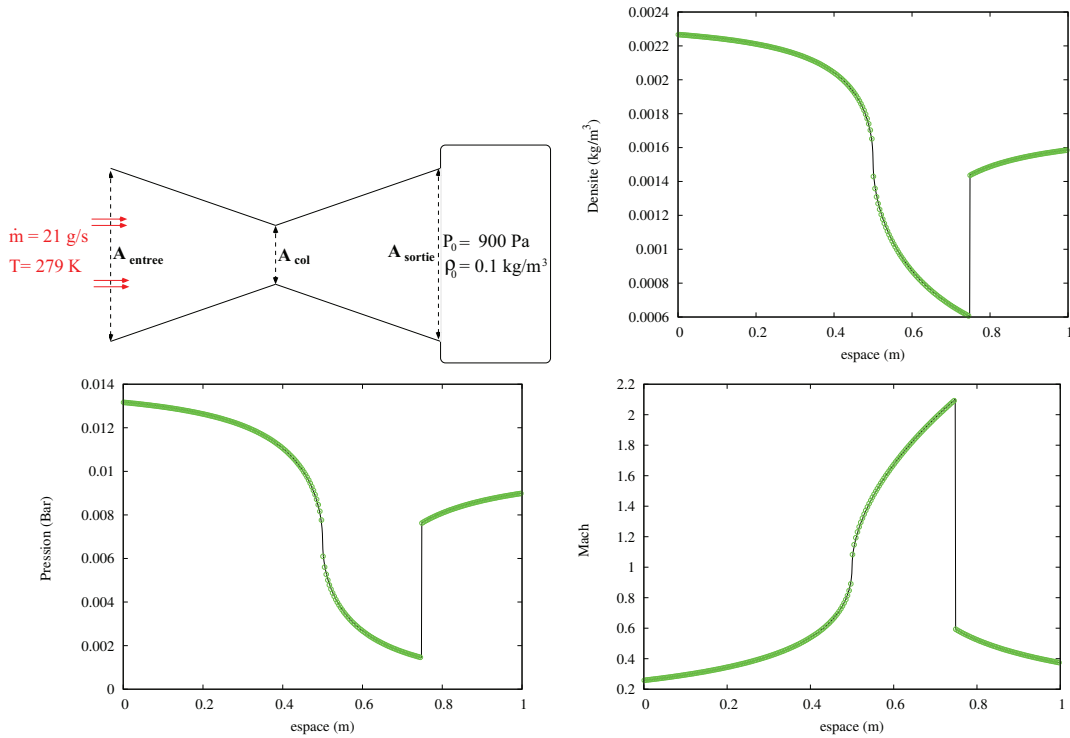


Figure III.14 – Schéma de la tuyère symétrique (configuration 3 en haut à gauche). Comparaison entre la solution exacte (représentée en trait plein noir) et la solution stationnaire obtenue numériquement (représentée en symboles verts)

A nouveau, une solution exacte est disponible pour cette configuration qui génère un choc stationnaire dans le divergent. Les résultats sont reportés sur la Figure III.14. Comme dans les configurations précédentes, les courbes sont en parfait accord.

Connaissant les solutions exactes dans les tuyères en régime permanent, nous avons pu valider les conditions limites de type réservoir ainsi que les conditions limites de type injection à débit masse et température imposée.

III.6 Conditions d'Écoulements Atmosphériques

Les conditions météorologiques jouent un rôle important dans la dispersion des polluants, notamment dans les basses couches de l'atmosphère. Le champ de vent peut déplacer les polluants sur de grandes distances et la turbulence assure un brassage vertical de ces derniers. Il est donc primordial de tenir compte de ces phénomènes pour la construction d'un modèle réaliste. En particulier, la stabilité de la couche limite atmosphérique doit être prise en compte. Dans cette section, nous allons introduire quelques principes sur la notion de "stabilité de l'atmosphère". Nous exposerons par la suite la manière dont cela a été pris en compte dans le code de calcul. En préalable à cela, les effets de gravité sont introduits dans le modèle d'écoulement.

III.6.1 Prise en compte de la gravité

L'atmosphère est naturellement stratifiée sous l'action de la gravité. La prise en compte de ces effets est donc fondamentale. On introduit les termes gravitaires dans le système. Soit $\mathbf{g}$ le vecteur gravité :

$$\mathbf{g} = (0, 0, -g)^t, \quad g = 9.81 m.s^{-2}$$

Celui-ci induit une force volumique agissant sur le gaz, un terme source apparaît dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement. Le travail de cette force doit également être pris en compte dans l'équation de conservation de l'énergie. Le système devient

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) = \rho \mathbf{g} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u}) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) = 0 \quad k = 1, \dots, N \end{array} \right. \quad (\text{III.11})$$

Les termes ajoutés sont des termes "volumiques", l'intégration sur le volume de contrôle ne pose aucune difficulté, car seul le volume fluide importe. On utilise une méthode de splitting numérique pour la résolution, c'est à dire que l'on distingue l'étape "hyperbolique", de l'étape "terme source",

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho w}{\partial t} = -\rho g \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\rho g w \end{array} \right. \quad (\text{III.12})$$

III.6. Conditions d'Écoulements Atmosphériques

Ce dernier système est résolu numériquement (avec w , la composante verticale de la vitesse (axe $\mathbf{z}$)). Il est également possible d'utiliser la solution exacte de ce système

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \\ \frac{\partial \rho w}{\partial t} = -\rho g \end{array} \right. \Leftrightarrow \frac{\partial w}{\partial t} = -g \Leftrightarrow w = -gt + w_0 \quad (\text{III.13})$$

Connaissant la vitesse verticale w , l'énergie totale pourra alors en être déduite. La présence des termes de gravité met le gaz en mouvement, jusqu'à atteindre lentement l'équilibre. Pour ne pas avoir à attendre la convergence vers cet état stationnaire, cet état sera utilisé comme condition initiale.

III.6.2 Généralités sur la Couche Limite Atmosphérique

La couche limite atmosphérique (**CLA**) est la partie de l'atmosphère directement influencée par la surface terrestre, par opposition à l'atmosphère libre (**AL**). Son épaisseur varie de quelques centaines de mètres à plusieurs kilomètres. Elle est constituée de deux sous-couches :

- La **couche de surface** où les forces de Coriolis sont négligeables. Celle-ci peut elle même être séparée en deux couches. La **sous-couche rugueuse**, dans laquelle l'écoulement est fortement dépendant de la rugosité du sol : présence d'infrastructures, de végétations,... L'écoulement y est fortement turbulent et favorise les échanges d'énergie. La **sous-couche inertielle**, au-dessus de la sous-couche rugueuse, qui présente des vents quasi-stationnaires.
- La **couche d'Ekman** se situe au dessus de la couche de surface. Elle se caractérise par le fait que les effets de la rotation de la terre n'y sont pas négligeables : les forces de Coriolis y jouent un rôle prépondérant.

L'écoulement au sein de la CLA contient des tourbillons multi-échelles, il est donc fortement turbulent et favorise la dilution de polluants. Trois états de la couche limite atmosphérique sont à distinguer :

- L'état neutre, impliquant un champ de vent horizontal et homogène.
- L'état stable, qui favorise l'accumulation de polluants dans les basses couches de l'atmosphère.
- L'état instable, qui implique la dilution rapide des polluants, conséquence des effets turbulents.

III. Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques

Bien entendu, des états intermédiaires peuvent être définis suivant des critères de stabilité (très stable, peu stable, ...). Dans le cadre de cette étude, nous nous tiendrons aux trois états fondamentaux précédemment décrits.

La stabilité de la couche limite atmosphérique peut être caractérisée en fonction de la valeur du gradient thermique vertical. En comparant la valeur de ce gradient à celle fournie par le calcul du gradient thermique adiabatique, correspondant à un état neutre de la CLA, on peut en déduire l'état de stabilité de la couche. La valeur du gradient thermique adiabatique est obtenue en se plaçant dans le cas d'une évolution adiabatique verticale. En notant T_0 et P_0 la température et la pression au niveau du sol et z l'altitude, l'adiabatique s'écrit :

$$T_0 = T(z) \left(\frac{P_0}{P(z)} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$$

En dérivant cette expression par rapport à z et en supposant γ indépendant de l'altitude, on obtient :

$$0 = \left(\frac{P_0}{P(z)} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \frac{\partial T(z)}{\partial z} - \frac{\gamma-1}{\gamma} \left(\frac{P_0}{P(z)} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \frac{T}{P} \frac{\partial P(z)}{\partial z}$$

Or dans le cas stationnaire, on dispose de la relation suivante :

$$\frac{\partial P(z)}{\partial z} = -\rho g$$

D'autre part, on dispose de loi d'état des gaz parfaits reliant les variables thermodynamiques :

$$P = \rho r T = \rho C_v (\gamma - 1) T,$$

où c_v est la chaleur spécifique à volume constant. Compte tenu des deux dernières relations, on obtient l'expression du gradient thermique adiabatique pour l'air "sec" :

$$\left(\frac{\partial T(z)}{\partial z} \right)_{ad} = \frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{T}{P} \frac{\partial P(z)}{\partial z} = -\frac{\gamma-1}{\gamma} \frac{\rho g T}{P} = -\frac{g}{C_p}. \quad (\text{III.14})$$

Il est alors possible d'évaluer la stabilité de l'atmosphère en comparant le gradient thermique réel au gradient thermique adiabatique (relation (III.14)). D'autres considérations sont néanmoins à prendre en compte, telle que la force du vent par exemple. Pour illustrer l'influence du gradient thermique sur les écoulements dans la CLA, prenons l'exemple d'un panache de fumée issu d'une cheminée (Figure III.15 à III.17).

$$\bullet \quad \frac{\partial T}{\partial z} > \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right)_{ad} \implies \textbf{Atmosphère stable} \text{ (Figure III.15).}$$

Cette situation implique un vent modéré et le fait que les transferts turbulents soient plus importants dans les directions transverses que dans la direction verticale. La dilution des polluants est très lente et peut donc entraîner des épisodes de pollution marquée.

III.6. Conditions d'Écoulements Atmosphériques

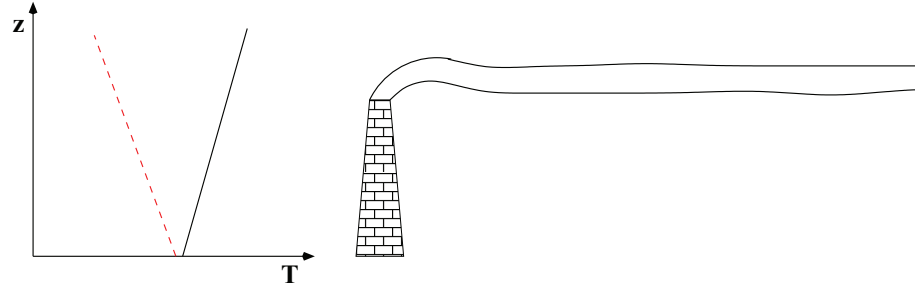


Figure III.15 – A gauche : allure du profil de température en fonction de l'altitude dans le cas stable (trait continu) comparé au profil de température dans le cas neutre (pointillés). On a schématisé à droite l'évolution d'un panache issu d'une cheminée dans le cas d'une CLA stable.

- $\frac{\partial T}{\partial z} < \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{ad} \implies \text{Atmosphère instable}$ (Figure III.16).

Dans cette situation, les écoulements peuvent être fortement turbulents. Ce qui implique que les transferts turbulents verticaux sont très importants, notamment entre le sol et l'air (il s'agit ici de turbulence provoquée par les échanges thermiques). La dilution des polluants est très rapide dans ce type de configurations.

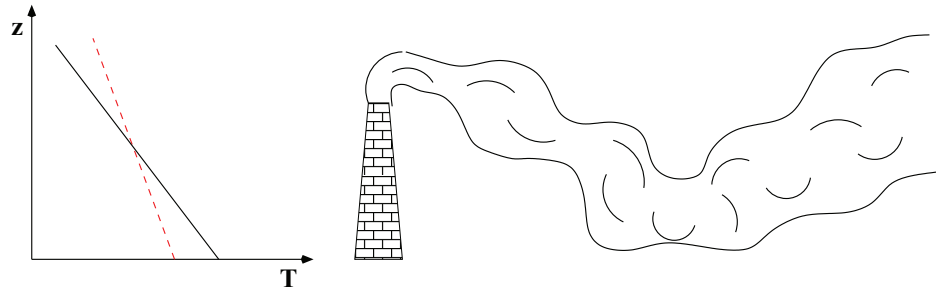


Figure III.16 – A gauche : allure du profil de température en fonction de l'altitude dans le cas instable (trait continu) comparé au profil de température dans le cas neutre (pointillés). On a schématisé à droite l'évolution d'un panache issu d'une cheminée dans le cas d'une CLA instable.

- $\frac{\partial T}{\partial z} \simeq \left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{ad} \implies \text{Atmosphère neutre}$ (Figure III.17).

Cette situation correspond à une configuration de vent fort, la turbulence y a une origine dynamique et n'est pas due aux échanges thermiques.

D'autres situations sont à envisager. Il s'agit de configurations où des couches d'inversion thermique sont présentes, ceci implique un changement de signe du gradient vertical de température. Afin d'évaluer l'état de stabilité de l'atmosphère, on peut considérer par

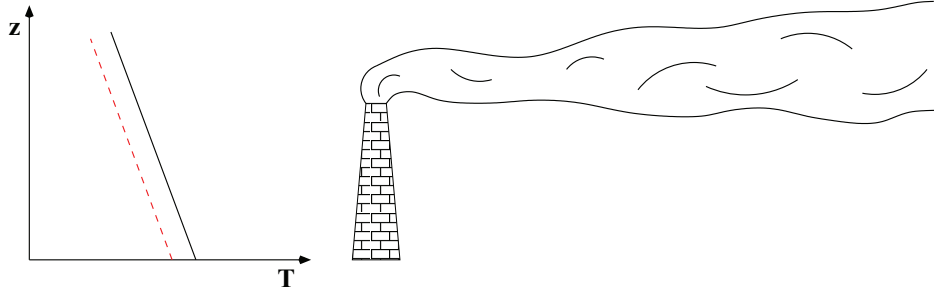


Figure III.17 – À gauche : allure du profil de température en fonction de l'altitude dans le cas neutre (trait plein). On a schématisé à droite l'évolution d'un panache issu d'une cheminée dans le cas d'une CLA neutre.

exemple la classification de Pasquill [52] qui définit diverses classes de stabilité (de **A -cas très instable-** à **F -cas stable-**). Cette classification se base sur la valeur de la vitesse du vent, sur le rayonnement solaire, ainsi que sur la nébulosité (couverture nuageuse). La classification de Turner [79] (de **1 -cas très instable-** à **7 -cas stable-**) se base sur les mêmes critères mais avec l'ajout d'un paramètre supplémentaire : l'indice de radiation net, représentatif de la mesure de l'ensoleillement.

III.6.3 Profil de Vitesse du Vent

Le profil de vitesse du vent joue évidemment un rôle très important dans la dispersion des polluants. Nous allons voir dans cette section comment initialiser le profil de vitesse en fonction de l'altitude.

En règle générale, la vitesse du vent croît avec l'altitude. Pour caractériser cette croissance, deux facteurs importants sont à prendre en compte :

- La classe de stabilité dans laquelle on se situe.
- La rugosité du terrain (milieu rural, urbain).

Il est admis que le profil de vitesse du vent suit un profil logarithmique :

$$u(z) \propto \log \left(\frac{z}{z_0} \right)$$

Celui-ci peut également se traduire par une loi de puissance :

$$u(z) = u(z_0) \left(\frac{z}{z_0} \right)^n \quad (\text{III.15})$$

où $u(z)$ est la vitesse du vent à l'altitude z , $u(z_0)$ est la vitesse du vent à l'altitude z_0 . L'exposant “ n ” peut être ajusté suivant la classe de stabilité et également en fonction de la rugosité du terrain. Différents travaux ont permis d'évaluer cet exposant ([20],[19],[54],[76]). Les surfaces lisses (rurales) impliquent une croissance du vent plus lente avec l'altitude en regard des observations réalisées dans les zones urbaines. De la même façon : plus l'écoulement est instable, plus l'évolution de la vitesse avec l'altitude est faible. (TABLE

III.6. Conditions d'Écoulements Atmosphériques

III.1).

Classe de stabilité de Pasquill	Exposant n (urbain)	Exposant n (rural)
A	0.15	0.11
B	0.15	0.12
C	0.20	0.12
D	0.25	0.17
E	0.4	0.29
F	0.6	0.45

TABLE III.1 – Valeur de l'exposant “ n ” associé à l'expression (III.15) pour des milieux ruraux ou urbains.

On représente ci-après des exemples de profils de température et de vitesse qui sont obtenus compte tenu de ces dernières considérations. La rugosité du milieu influence uniquement le profil de vitesse comme on le voit sur la Figure III.18, la présence de constructions augmentant la friction.

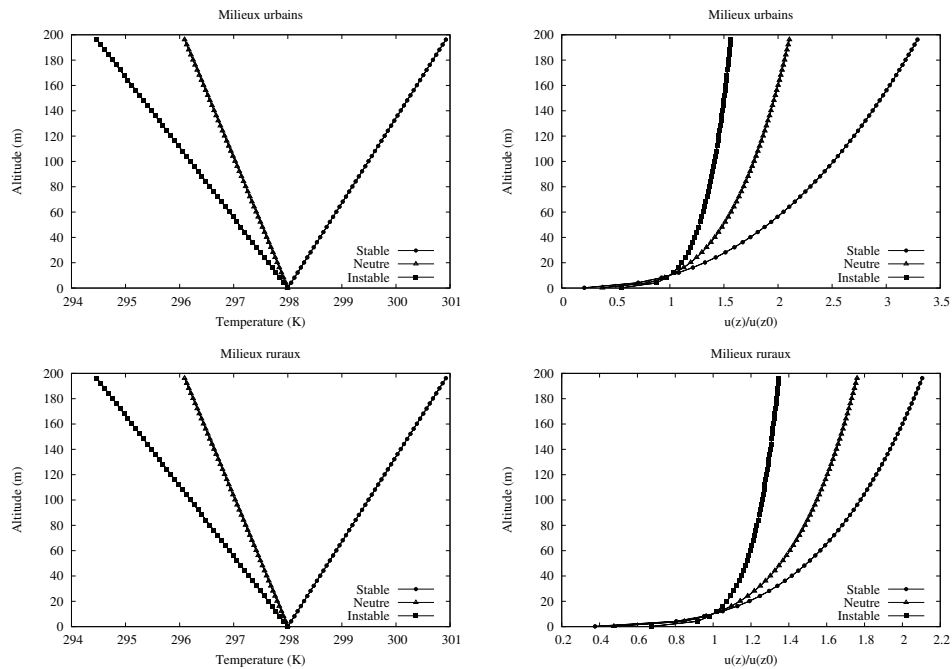


Figure III.18 – Évolution de la température et de la vitesse du vent en fonction de l'altitude dans le cas d'un milieu urbain (en haut), et rural (en bas).

III.6.4 Couche d’Inversion Thermique

Le gradient thermique adiabatique est négatif :

$$\left(\frac{\partial T(z)}{\partial z} \right)_{ad} = -\frac{g}{C_p} \quad (\text{III.14})$$

On appelle couche d’inversion thermique une masse d’air dans laquelle le gradient thermique est positif (augmentation de la température avec l’altitude). L’épaisseur de cette couche peut varier de quelques dizaines à plusieurs centaines de mètres. Elle se situe généralement en altitude mais peut également être proche du sol. Ce phénomène admet deux origines principales :

- Dans de vastes zones anticycloniques (zone de haute pression stable), les courants descendants viennent comprimer les couches inférieures de l’atmosphère qui se réchauffent et ce, jusqu’à une altitude d’environ 1000 m. Au dessous de cette altitude, l’air s’échappe latéralement et ne descend plus créant une couche d’inversion dite “de subsidence”.
- Durant la nuit, le sol se refroidi plus vite que l’air. Celui-ci est alors refroidi au contact du sol. Une couche d’air chaud est alors piégée au dessus créant une couche d’inversion dite “de rayonnement”. Cette configuration n’est possible que par temps clair.



Figure III.19 – Panache de cheminée en présence d’une couche d’inversion thermique (Fairbanks, Alaska).

On peut tenir compte de ces couches d’inversion thermique qui jouent un rôle important dans les phénomènes de dispersion. Elles peuvent agir comme “un plafond” et empêcher les fumées ou polluants de se disperser (Figure III.19), mais peuvent aussi avoir l’effet inverse.

Ainsi, le profil initial de température pourra présenter une inversion à une altitude choisie

III.6. Conditions d'Écoulements Atmosphériques

en fonction des conditions météorologiques et des lieux. Les champs de pression et de densité en seront alors déduits. Le champ de vitesse devra également être évalué (voir Figure III.20).

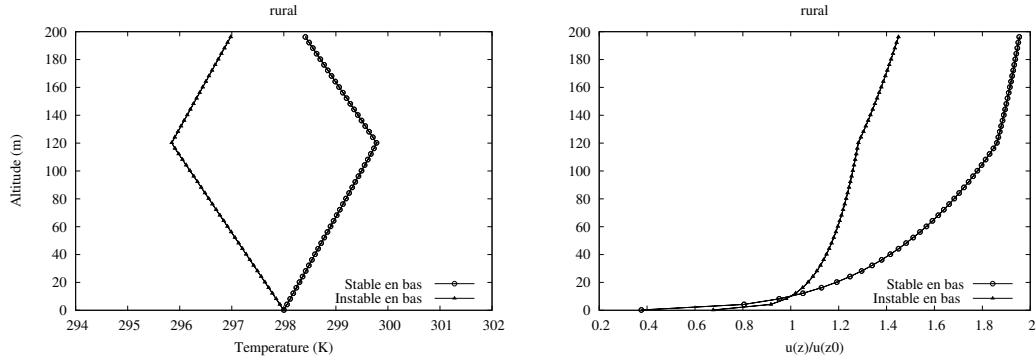


Figure III.20 – Allure des champs de température et de vitesse en présence d’une couche d’inversion thermique.

La prise en compte des différents facteurs influençant les profils associés aux différentes grandeurs thermodynamiques dans le modèle permet de nous rapprocher des configurations réelles de dispersion dans l’atmosphère. Les conditions limites peuvent maintenant dépendre de l’altitude, notamment les limites de type réservoirs. Il reste néanmoins un paramètre à évaluer, il s’agit du coefficient de diffusion “turbulente” évoqué dans le chapitre précédent. Celui-ci est très important pour l’évaluation de la dispersion. Ce coefficient est lui aussi dépendant de l’état de stabilité de l’atmosphère, il doit donc être calibrer grâce à des mesures expérimentales de dispersion.

III. Conditions aux Limites et Écoulements Atmosphériques

Chapitre IV

Modèles d'Écoulements Diphasiques

Dans les chapitres précédents, nous avons présenté un modèle d'écoulement de gaz prenant en compte la présence d'obstacles. Ce modèle permet de traiter et de suivre l'évolution de polluant via l'utilisation d'une loi d'état multi-constituants. On s'intéresse maintenant à la possibilité de la présence de polluants sous forme de particules solides ou gouttes liquides. Le modèle introduit précédemment est monophasique et ne permet pas ce type de description. Il faut donc considérer un modèle adapté à la description d'écoulements multiphasiques.

De nombreux modèles existent pour décrire les écoulements multiphasiques, en fonction de la nature des écoulements, du nombre de phase à prendre en compte... Dans le cadre de ce travail, nous considérons uniquement des écoulements comportant deux phases, dont l'une est présente en faible proportion devant l'autre. Cela correspond aux situations que nous souhaitons traiter : dispersion de polluants (phase liquide ou solide) présents dans un écoulement de gaz (pouvant être multi-constituants). Les modèles qui traitent de ces écoulements sont des modèles diphasiques dont :

- La phase gazeuse, fortement majoritaire est aussi appelée “phase porteuse”,
- La phase minoritaire, transportée par le gaz est appelée “phase diluée” où “phase dispersée”.

Typiquement, le taux de présence de la phase diluée est inférieur à 10^{-3} en proportion volumique. On utilise ces considérations pour construire des modèles d'écoulement diphasique simplifiés et adaptés.

Deux classes de modèles existent pour décrire mathématiquement les écoulements diphasiques à phases diluées.

- La description lagrangienne suit chacune des particules de l'écoulement (ou équivalents de particules). On résout directement :

$$\frac{dm_p \mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_{ext}$$

Où m_p , $\mathbf{u}_p$ et $\mathbf{F}_{ext}$ sont respectivement la masse d'une particule, la vitesse d'une particule et les forces extérieures agissant sur celle-ci. Ces méthodes permettent d'accéder à la connaissance parfaite de la topologie de l'écoulement, mais s'avèrent numériquement très coûteuses sitôt que le nombre de particules devient important (ce qui est notre cas).

- La description eulérienne traite les particules avec des équations similaires à celles d'un milieu continu : la dynamique de ce milieu peut alors être mise sous la forme de lois de conservation. Cette approche est très efficace pour l'étude de grands systèmes. Elle permet la description des effets dus à la présence d'un nuage de particules sur l'écoulement de gaz, mais ne donne pas d'information sur la trajectoire d'une particule spécifique. Cette méthodologie est particulièrement adaptée à la modélisation de fumées ou de brouillards.

Dans le cadre de cette thèse nous avons opté pour une approche eulérienne de la phase dispersée.

IV.1 Hypothèses des Milieux Dilués

Pour l'obtention du modèle diphasique complet, il faut maintenant prendre en compte et décrire les termes d'interaction entre les phases. En général, pour les écoulements de gaz particules, la dynamique est régie par l'hydrodynamique de la phase porteuse et les collisions entre particules. Lorsque l'écoulement est dilué, la fraction volumique occupée par les particules peut être négligée. Dans les modèles généraux d'écoulements multiphasiques, les termes d'interactions existant entre les phases se traduisent par la présence de termes non-conservatifs dans le modèle complet. Dans l'hypothèse des écoulements dilués, la phase dispersée, bien que décrite par les équations d'Euler, ne véhicule pas les ondes acoustiques. La phase dispersée est alors supposée satisfaire les équations d'Euler sans pression [50,85]. Les deux phases ne sont couplées que par les forces de traînée et les échanges thermiques. Les collisions entre particules sont quasi inexistantes et peuvent être négligées. Ceci reste vrai tant que la fraction volumique reste faible [58], c'est à dire typiquement :

$$\alpha_p < 10^{-3}, \quad (\alpha_p = \text{fraction volumique des particules})$$

Les particules n'admettent donc pas de pression interne. Celles-ci forment un "milieu continu". On choisit un volume matériel élémentaire petit devant le système étudié tout en étant suffisamment grand pour contenir assez de particules. Dans ces conditions et en l'absence de fragmentation, la variation du nombre de particules par unité de volume peut être considérée comme nulle. Soit n_p et $\mathbf{u}_p$, respectivement le nombre de particules par unité de volume et le champ de vitesse de celles-ci, alors :

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \nabla \cdot (n_p \mathbf{u}_p) = 0 \quad (\text{IV.1})$$

On considèrera par la suite des particules sphériques.

IV.2 Modèle sans Pression

Les solutions et le traitement mathématique des équations associées aux gaz sans pression sont étudiées dans [8,9]. Sous l'ensemble des hypothèses et considérations précédentes, on propose maintenant l'écriture du modèle diphasique, débutant par les équations associées à la phase porteuse.

IV.2.1 Equations pour la Phase Porteuse

Dans le cadre des écoulements dilués, la fraction volumique de la phase dispersée est négligeable par rapport à celle de la phase porteuse et l'on peut supposer :

$$\alpha_p + \alpha_g = 1 \simeq \alpha_g$$

Cette dernière relation simplifie considérablement les équations associées à la phase gazeuse. En effet, les modèles multiphasiques présentent en générale une dépendance à la fraction volumique de la phase considérée, (voir par exemple [63]). Le fait de considérer la phase porteuse comme occupant tout le volume disponible, implique l'utilisation des équations d'Euler des fluides compressibles pour cette phase. Le couplage entre les particules et le gaz est alors assuré par des termes d'interaction (en rouge dans le système (IV.2)).

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) & = n_p \mathbf{F}_{p \rightarrow g} \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u}) & = n_p q_{p \rightarrow g} + n_p \mathbf{F}_{p \rightarrow g} \cdot \mathbf{u}_p \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) & = 0 \quad k = 1, \dots, N \end{array} \right. \quad (\text{IV.2})$$

Où $\mathbf{F}_{p \rightarrow g}$ est la force exercée par les particules sur le gaz et $q_{p \rightarrow g}$ sont les échanges thermiques entre phases. Ces forces seront explicitées ultérieurement dans ce chapitre.

IV.2.2 Equations pour la Phase Dispersée

Nous allons maintenant exprimer les équations d'évolution associées à la phase dispersée en tenant compte des différentes hypothèses émises précédemment. La masse d'une particule se conserve au cours du temps. Soit m_p cette masse et $\mathbf{u}_p$ le champ de vitesse, alors on a :

$$\frac{dm_p}{dt} = \frac{\partial m_p}{\partial t} + \mathbf{u}_p \cdot \nabla m_p = 0$$

Multiplions cette dernière relation par le nombre de particules par unité de volume :

$$n_p \frac{dm_p}{dt} = \frac{dn_p m_p}{dt} - m_p \frac{dn_p}{dt} = \frac{dn_p m_p}{dt} + m_p n_p \nabla \cdot \mathbf{u}_p = 0 \quad (\text{IV.3})$$

IV. Modèles d'Écoulements Diphasiques

Soit ρ_{reel} la densité du matériau constituant les particules et R leur rayon. Alors, en supposant les particules sphériques, on a :

$$n_p m_p = n_p \frac{4\pi R^3 \rho_{reel}}{3}$$

Or,

$$n_p \frac{4\pi R^3}{3} = \alpha_p \quad (IV.4)$$

La relation (IV.3) devient :

$$\frac{d\alpha_p \rho_{reel}}{dt} + \alpha_p \rho_{reel} \nabla \cdot \mathbf{u}_p = 0 \quad (IV.5)$$

Notons ρ_p la densité apparente des particules : $\rho_p = \alpha_p \rho_{reel}$. En introduisant cette expression dans (IV.5), on obtient une loi de conservation pour la densité apparente des particules :

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p) = 0 \quad (IV.6)$$

Pour une particule isolée dans un écoulement de gaz dont le champ de vitesse est $\mathbf{u}_p$, le principe fondamental de la dynamique appliqué à une particule s'écrit,

$$m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \mathbf{F}_{g \rightarrow p}$$

Où $\mathbf{F}_{g \rightarrow p}$ correspond à la force de trainée visqueuse. En multipliant cette équation par le nombre de particules par unité de volume, on obtient :

$$n_p m_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \alpha_p \rho_{reel} \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = \rho_p \frac{d\mathbf{u}_p}{dt} = n_p \mathbf{F}_{g \rightarrow p}$$

En combinant cette dernière relation avec l'équation (IV.6), on obtient :

$$\frac{\partial \rho_p \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p) = n_p \mathbf{F}_{g \rightarrow p} \quad (IV.7)$$

Les particules sont supposées incompressibles : l'énergie interne de celles-ci, dépend uniquement de leur température T_p . Par ailleurs, il n'y a pas de collision entre particules. Soit $q_{g \rightarrow p}$, le flux traduisant les échanges de chaleur entre le gaz et une particule. Alors :

$$m_p \frac{de_p}{dt} = q_{g \rightarrow p}$$

En suivant la même démarche que pour l'équation (IV.7), on obtient :

$$\frac{\partial \rho_p e_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p e_p \mathbf{u}_p) = n_p q_{g \rightarrow p} \quad (IV.8)$$

IV.2. Modèle sans Pression

En combinant les équations (IV.7) et (IV.8), on obtient une équation d'évolution pour l'énergie totale des particules :

$$\frac{\partial \rho_p E_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p E_p \mathbf{u}_p) = n_p q_{g \rightarrow p} + n_p \mathbf{F}_{g \rightarrow p} \cdot \mathbf{u}_p \quad (\text{IV.9})$$

avec $E_p = \frac{\|\mathbf{u}_p\|^2}{2} + e_p(T_p)$, l'énergie totale des particules. Finalement, le système d'équations à résoudre pour la phase dispersée s'écrit (ici on a remplacé l'équation d'évolution de l'énergie totale par une équation pour l'énergie interne) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p) &= 0 \\ \frac{\partial \rho_p \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p) &= n_p \mathbf{F}_{g \rightarrow p} \\ \frac{\partial \rho_p e_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p e_p \mathbf{u}_p) &= n_p q_{g \rightarrow p} \end{cases} \quad (\text{IV.10})$$

Finalement, les deux systèmes sont couplés uniquement par les termes d'interactions (force de trainée visqueuse et échanges thermiques). Ceci est numériquement intéressant, les parties hyperboliques de chacun des deux systèmes pouvant être résolues indépendamment. Nous allons maintenant exprimer les termes d'interaction.

IV.2.3 Termes d'interactions : Force de Trainée Visqueuse et Echange Thermique

• Expression de la force de trainée

Pour des raisons de simplicité et du fait de la sphéricité des particules, nous avons choisi de traiter la force de trainée par la formule de Stokes. Celle-ci s'écrit :

$$\mathbf{F}_{g \rightarrow p} = 6\pi\mu R(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p)$$

où R est le rayon des particules (supposé constant) et μ est la viscosité dynamique du gaz. Notons Re_p le nombre de Reynolds particulaire défini par la relation :

$$Re_p = \frac{2R\rho\|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p\|}{\mu}$$

Il est important de noter qu'une telle forme de loi de trainée n'est valable qu'à faible nombre de Reynolds. La forme communément admise de la trainée de stokes stationnaire s'écrit (avec $C_d = \frac{24}{Re_p}$) :

$$\mathbf{F}_{g \rightarrow p} = \frac{\rho C_d R^2 \rho \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p\| (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p)}{2} \quad (\text{IV.11})$$

Dans le but d'étendre cette loi de traînée aux grands nombres de Reynolds, on utilisera une expression du coefficient de traînée " C_d " dépendant du régime d'écoulement, celui-ci sera évalué suivant [68].

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & \text{si } Re_p < 800 \\ 0.438 & \text{sinon} \end{cases}$$

La force de traînée par unité de volume s'écrit alors :

$$n_p \mathbf{F}_{g \rightarrow p} = \frac{3\alpha_p C_d \rho \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p\| (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p)}{8R} = \lambda (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \quad (\text{IV.12})$$

α_p est calculé via la relation (IV.4) et $\lambda = \frac{3\alpha_p C_d \rho \|\mathbf{u} - \mathbf{u}_p\|}{8R}$.

• Expression des échanges thermiques

Pour évaluer les termes de transferts thermiques, nous supposons que les échanges sont convectifs, c'est à dire que le flux de chaleur peut s'écrire sous la forme :

$$q_{g \rightarrow p} = hS(T - T_p),$$

Avec S l'aire interfaciale (ici, la surface d'une particule) et h le coefficient d'échange. Celui-ci peut être relié au nombre de Nusselt :

$$Nu = \frac{hD}{k}$$

Où D est une longueur caractéristique du système (en général, le diamètre de la particule) et k , la conductivité thermique du fluide. Pour une particule sphérique, l'expression du nombre de Nusselt est donnée comme une fonction du nombre de Reynolds et du nombre de Prandtl,

$$Nu = 2 + Re^{1/2} Pr^{1/3}$$

Avec :

$$Re = \frac{UD}{\nu}, \quad Pr = \frac{\mu C_p}{k}$$

Où ν est la viscosité cinématique du gaz.

IV.2.4 Récapitulatif et Propriétés du Modèle Diphasique Dilué

Finalement, le système d'équations à résoudre pour modéliser les écoulements gaz particules dilués est :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p) & = 0 \\ \frac{\partial \rho_p \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p) & = \lambda(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \\ \frac{\partial \rho_p e_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p e_p \mathbf{u}_p) & = n_p h S (T - T_p) \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \mathbb{I}) & = -\lambda(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + P \mathbf{u}) & = -n_p h S (T - T_p) - \lambda(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \cdot \mathbf{u}_p \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) & = 0 \quad k = 1, \dots, N \end{array} \right. \quad (\text{IV.13})$$

Avec $E = \frac{\|\mathbf{u}\|^2}{2} + e(P, \rho)$ l'énergie totale du gaz, $e(P, \rho) = \frac{P}{\rho(\gamma - 1)}$ l'énergie interne du gaz et $e_p(T_p) = c_p T_p$, l'énergie interne des particules. Le modèle ainsi écrit est conservatif : Les grandeurs de mélange se conservent au cours du mouvement. Ce modèle est largement utilisé pour la modélisation des écoulements gaz-particules dilués [18,17,61].

• Evolution de l'entropie du mélange

Pour exprimer l'équation d'évolution de l'entropie de mélange, nous devons au préalable établir l'équation d'évolution de l'entropie de chacune des phases. Pour cela on utilise les équations d'énergie de chaque phase ainsi que les identités de Gibbs respectives :

$$de = T ds + \frac{P}{\rho^2} d\rho, \quad de_p = T_p ds_p$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_p s_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p s_p \mathbf{u}_p) &= n_p h S \frac{(T - T_p)}{T_p} \\ \frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{u}) &= -n_p h S \frac{(T - T_p)}{T} + \frac{\lambda}{T} \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}\|^2 \end{aligned}$$

Pour obtenir l'équation d'évolution de l'entropie de mélange, il suffit de sommer ces deux dernières équations

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho s + \rho_p s_p) + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{u} + \rho_p s_p \mathbf{u}_p) = n_p h S \frac{(T_p - T)^2}{T T_p} + \frac{\lambda}{T} \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}\|^2 = \dot{s} \geq 0 \quad (\text{IV.14})$$

Le terme de production d'entropie est donc toujours positif, démontrant que le second principe de la thermodynamique est bien respecté.

• Hyperbolicité

Nous avons déjà étudié les propriétés des équations associées à la phase gazeuse : le système qu'elles forment est strictement hyperbolique, à savoir que la matrice jacobienne du système admet trois valeurs propres réelles et distinctes (dans le cas 1D) et les vecteurs propres associés forment une base de $\mathbb{R}^3$.

Les équations associées à la phase dispersée correspondent aux équations d'Euler sans pression : la matrice jacobienne n'admet qu'une seule valeur propre de multiplicité 3. Il n'est pas possible d'obtenir un jeu de trois vecteurs propres linéairement indépendants. On dit que le système est "hyperbolique dégénéré". Enfin, le modèle n'admet pas les chocs de particules, il ne satisfait pas le critère de Lax [44]. Cette dernière remarque peut induire des difficultés d'ordre numérique notamment dans les configurations impliquant des croisements de trajectoires. Différentes approches ont été développées pour la résolution du problème de Riemann pour les équations d'Euler sans pression, dans [61],[10] ou encore [13].

• Résolution du problème de Riemann pour la phase dispersée

Sur la Figure IV.1, ont été reportées les six configurations possibles pour le problème de Riemann associé à la phase dispersée. Pour des raisons de lisibilité, nous écrirons les variables associées aux particules sans l'indice "p" (dans cette section uniquement).

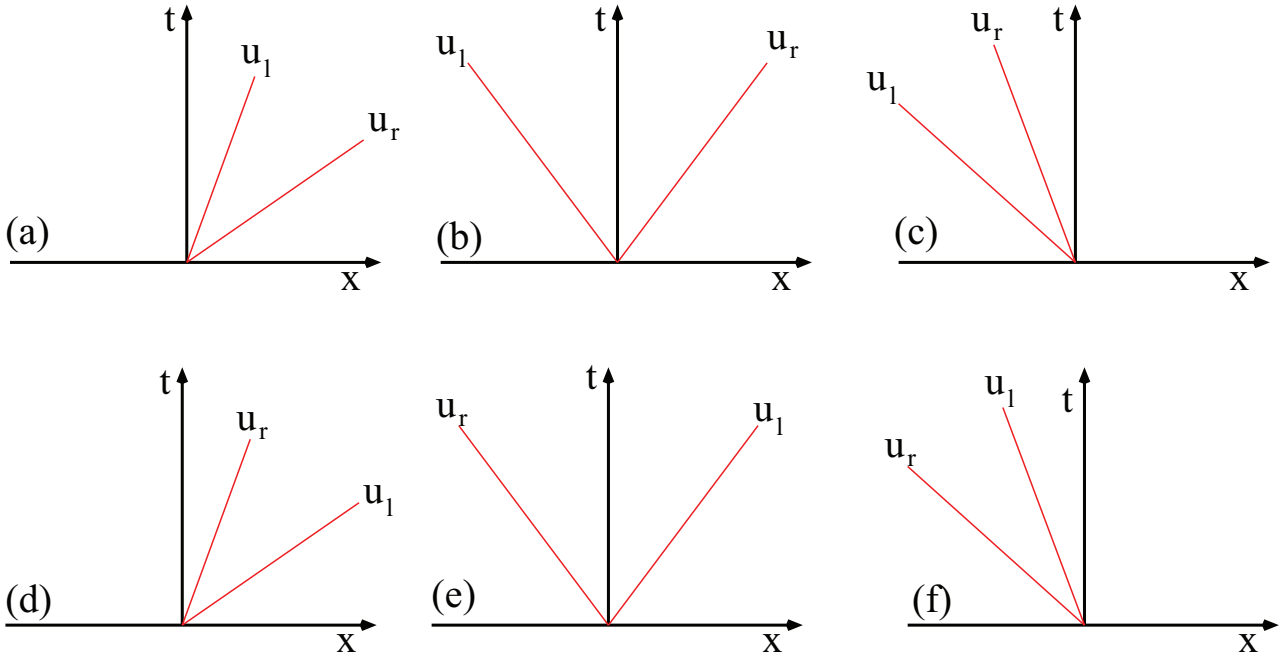


Figure IV.1 – Configurations possibles pour le problème de Riemann des équations d'Euler sans pression (pour les particules).

IV.2. Modèle sans Pression

La solution du problème de Riemann des équations d'Euler sans pression est décrite dans [17],[18] et [61]. Rappelons les solutions de ce problème dans les six configurations présentées. On utilisera l'exposant “*” pour les variables solutions du problème de Riemann.

(a) : $u_l > 0, u_r > 0$ et $u_l < u_r \implies$ “détente” de particules, dans ce cas :

$$\rho^* = \rho_l, \quad u^* = u_l$$

(b) : $u_l < 0, u_r > 0$ et $u_l < u_r \implies$ “détente” de particules engendrant le vide :

$$\rho^* = 0$$

(c) : $u_l < 0, u_r < 0$ et $u_l < u_r \implies$ “détente” de particules :

$$\rho^* = \rho_r, \quad u^* = u_r$$

(d) : $u_l > 0, u_r > 0$ et $u_l > u_r \implies$ “compression” de particules :

$$\rho^* = \rho_l, \quad u^* = u_l.$$

(e) : $u_l > 0, \text{ et } u_r < 0 \implies$ “choc de particules” (insistons sur le fait qu’il ne s’agit pas d’un réel choc car les croisements de trajectoires ne sont pas admis, mais plutôt de l’accumulation de particules).

$$\rho^* = \rho_l + \rho_r, \quad u^* = \frac{\rho_l u_l + \rho_r u_r}{\rho_l + \rho_r}$$

(f) : $u_l < 0, u_r < 0$ et $u_l > u_r \implies$ “compression” de particules,

$$\rho^* = \rho_r, \quad u^* = u_r.$$

Pour conclure, le modèle sans pression pour les particules permet la modélisation des écoulements gaz particules dilués. Cependant, celui-ci n’est pas strictement hyperbolique, et n’admet pas les choc de particules. En particulier les “rebonds” sur les parois solides sont impossibles et ce modèle ne peut pas non plus reproduire l’élargissement d’un jet de particules. Néanmoins, celui-ci est utilisé dans de nombreux travaux impliquant des écoulements diphasiques multi-D, comme par exemple dans [71] ou [80]. Nous introduisons maintenant un nouveau modèle d’écoulement gaz-particules dilués où les effets turbulents sont pris en compte, nous permettant de régler le problème d’hyperbolicité du système d’équation ainsi que celui associé au choc de particules.

IV.3 Modèle Turbulent

Le modèle turbulent que nous allons décrire ci-après a fait l'objet d'une publication récente [29].

IV.3.1 Obtention du Modèle

Nous souhaitons introduire la prise en compte des effets turbulents dans le système (IV.13). Pour cela, on procède suivant la méthode décrite dans [65]. On s'intéresse dans un premier temps à la phase gazeuse, l'extension à la phase dispersée est ensuite directe. On utilise deux définitions de valeurs moyennes pour moyenner les équations :

- La moyenne de **Reynolds** : $\rho = \bar{\rho} + \rho'$
- La moyenne de **Favre**, utilisée pour toute grandeur pondérée par la densité :

$$\tilde{a} = \frac{\bar{\rho} \bar{a}}{\bar{\rho}}, \quad a = \tilde{a} + a''$$

- On peut montrer que la valeur moyenne du produit de 2 variables de l'écoulement est telle que :

$$\widetilde{ab} = \tilde{a}\tilde{b} + \widetilde{a''b''}$$

Pour réécrire le système d'équations en terme des variables moyennées, nous utiliserons les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \overline{\rho u} &= \bar{\rho} \tilde{u} \\ \overline{\rho uv} &= \bar{\rho} \widetilde{uv} = \bar{\rho} (\widetilde{u\tilde{v}} + \widetilde{u''v''}) = \bar{\rho} \widetilde{u\tilde{v}} \\ \overline{\rho u^2} &= \bar{\rho} \widetilde{u^2} = \bar{\rho} (\widetilde{u^2} + \widetilde{u''^2}) \\ \bar{P} &= \bar{\rho} \tilde{e} (\gamma - 1) \end{aligned}$$

On considère le cas d'un écoulement isotrope. Soit K la variable définie par :

$$K = \bar{\rho} u''^2 = \bar{\rho} v''^2 = \bar{\rho} w''^2.$$

Considérons les équations du système (IV.13) sans les termes d'interactions entre phases (système homogène). Celui-ci s'écrit maintenant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}} + (\bar{P} + K) \mathbb{I}) &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{E} \tilde{\mathbf{u}} + (\bar{P} + K) \tilde{\mathbf{u}}) &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{\mathbf{u}}) &= 0 \end{array} \right. \quad k = 1, \dots, N$$

On doit tenir compte de la turbulence dans l'expression de l'énergie totale qui s'écrit désormais :

$$E = e(P, \rho) + \frac{\|\mathbf{u}\|^2}{2} + \frac{nK}{2\rho}$$

IV.3. Modèle Turbulent

Où n représente la dimension associée aux fluctuations de vitesse (degré de liberté des tourbillons). En général $n = 3$. Pour fermer le système, il faut établir une équation d'évolution pour la variable K . Pour cela, on utilise une combinaison des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale. A partir de maintenant, nous omettrons délibérément les symboles de moyenne afin d'alléger l'écriture. En développant l'équation de conservation de l'énergie totale du gaz, on obtient :

$$\rho \frac{de}{dt} + \frac{n}{2} \frac{dK}{dt} + K \left(1 + \frac{n}{2}\right) \nabla \cdot \mathbf{u} - \frac{P}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = 0$$

En utilisant l'identité de Gibbs,

$$de = Tds + \frac{P}{\rho^2} d\rho$$

En l'absence de choc et pour un écoulement non dissipatif, on impose $ds = 0$ (écoulement isentropique). On obtient ainsi une équation d'évolution pour la variable K :

$$\frac{n}{2} \frac{dK}{dt} + K \left(1 + \frac{n}{2}\right) \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

Cette équation peut se mettre sous la forme :

$$\frac{dK}{dt} + K\gamma_t \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{IV.15})$$

Où γ_t correspond au coefficient polytropique turbulent ($\gamma_t = \frac{n+2}{n}$). Considérons maintenant l'énergie turbulente e_t comme une fonction de la densité ainsi que de l'entropie turbulente s_t :

$$e_t = \frac{nK}{2\rho} = \frac{n}{2\rho} K(\rho, s_t)$$

Dans ce cas, l'équation (IV.15) s'écrit :

$$\left. \frac{\partial K}{\partial s_t} \right|_{\rho} \frac{ds_t}{dt} + \left(K\gamma_t - \rho \left. \frac{\partial K}{\partial \rho} \right|_{s_t} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{IV.16})$$

L'entropie turbulente s_t est à déterminer. On souhaite obtenir une loi de conservation pour l'entropie turbulente, il est donc nécessaire d'avoir :

$$\frac{ds_t}{dt} = 0 \quad (\text{IV.17})$$

Ceci implique :

$$K\gamma_t - \rho \left. \frac{\partial K}{\partial \rho} \right|_{s_t} = 0$$

Cette dernière équation se résout aisément pour donner :

$$K = P_t = C(s_t) \rho^{\gamma_t} \quad (\text{IV.18})$$

IV. Modèles d'Écoulements Diphasiques

La grandeur K représente une pression turbulente que l'on notera désormais P_t . Notons que l'énergie cinétique turbulente e_t prend la forme d'un potentiel thermodynamique :

$$e_t = \frac{n}{2} C(s_t) \rho^{\gamma_t-1} = \frac{C(s_t) \rho^{\gamma_t-1}}{\gamma_t - 1} = \frac{P_t}{\rho(\gamma_t - 1)} \quad (\text{IV.19})$$

Ainsi, la pression turbulente P_t obéit à la loi des gaz parfaits, avec un coefficient polytropique particulier γ_t et ne dépendant pas du choix de $C(s_t)$. Nous souhaitons maintenant déterminer la forme complète de l'énergie turbulente (ou potentiel thermodynamique) e_t . Pour cela, nous utilisons le fait que le potentiel thermodynamique doit être une fonction convexe de ses arguments : la matrice hessienne associée à ce potentiel et notée $\mathcal{H}$ doit être définie positive.

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 e_t}{\partial s_t^2} & \frac{\partial^2 e_t}{\partial s_t \partial v} \\ \frac{\partial^2 e_t}{\partial v \partial s_t} & \frac{\partial^2 e_t}{\partial v^2} \end{pmatrix}, \quad v = \frac{1}{\rho}$$

Les conditions suffisantes assurant la positivité de la matrice hessienne sont les suivantes :

$$\frac{\partial^2 e_t}{\partial s_t^2} > 0, \quad \frac{\partial^2 e_t}{\partial v^2} > 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 e_t}{\partial s_t^2} \frac{\partial^2 e_t}{\partial v^2} - \left(\frac{\partial^2 e_t}{\partial s_t \partial v} \right)^2 > 0 \quad (\text{IV.20})$$

La convexité de la loi d'état nous conduit aux contraintes suivantes pour $C(s_t)$.

$$C(s_t) > 0, \quad C'(s_t) > 0, \quad C''(s_t) > 0, \quad \gamma_t C(s_t) C'' - (\gamma_t - 1) C'^2(s_t) > 0, \quad \gamma_t > 1$$

Il existe plusieurs formes de $C(s_t)$ satisfaisant ces dernières conditions. La solution la plus simple est de choisir un rapport $\frac{C'(s_t)}{C(s_t)}$ constant. Soit C_{vt} une constante telle que :

$$\frac{C'(s_t)}{C(s_t)} = \frac{1}{C_{vt}}$$

Finalement, la résolution de cette équation différentielle nous permet d'exprimer $C(s_t)$:

$$C(s_t) = e^{\frac{s_t}{C_{vt}}}$$

Nous pouvons maintenant écrire la forme finale du potentiel thermodynamique turbulent :

$$e_t = \frac{P_t}{\rho(\gamma_t - 1)} = \frac{\rho^{\gamma_t-1}}{\gamma_t - 1} e^{\frac{s_t}{C_{vt}}} \quad (\text{IV.19})$$

On reconnaît la forme du potentiel thermodynamique des gaz parfaits. Nous sommes donc en mesure de définir une température turbulente T_t telle que :

$$T_t = \left. \frac{\partial e_t}{\partial s_t} \right|_v = \frac{e_t}{C_{vt}} \quad (\text{IV.21})$$

IV.3. Modèle Turbulent

Pour évaluer C_{vt} , on utilise la théorie cinétique des gaz. En effet, on peut relier l'énergie cinétique d'une particule élémentaire (de masse m_1) à la température grâce au théorème de l'équipartition de l'énergie. Ainsi chaque degré de liberté contribuant de manière quadratique à l'énergie ajoute $\frac{1}{2}k_bT$ à l'énergie moyenne. Dans le cas d'un mouvement de translation dans n directions et considérant ces mouvements comme provenant des fluctuations turbulentes, on peut écrire :

$$\frac{n}{2}m_1u''^2 = \frac{n}{2}k_bT_t$$

où k_b est la constante de Boltzmann. En multipliant cette dernière relation par le nombre d'Avogadro $\mathcal{N}$ et en la divisant par la masse molaire du gaz $\widehat{M}$, nous avons :

$$\frac{n}{2}u''^2 = \frac{n}{2}RT_t$$

Où $R = \frac{\mathcal{N}k_b}{\widehat{M}}$. Il vient finalement :

$$e_t = \frac{n}{2}RT_t = C_{vt}T_t \quad \Longleftrightarrow \quad C_{vt} = \frac{n}{2}R = \frac{R}{\gamma_t - 1}$$

Le modèle d'écoulement pour la phase porteuse (sans interaction avec les particules), s'écrit maintenant :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + (P + P_t)\mathbb{I}) & = 0 \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + (P + P_t)\mathbf{u}) & = 0 \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) & = 0 \quad k = 1, \dots, N \\ \frac{\partial \rho s_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} s_t) & = 0 \end{array} \right. \quad (\text{IV.22})$$

Avec les définitions suivantes :

$$E = e(P, \rho) + e_t(P_t, \rho) + \frac{\|\mathbf{u}\|^2}{2}$$

$$e = \frac{P}{\rho(\gamma - 1)}, \quad e_t = \frac{\rho^{\gamma_t - 1}}{(\gamma_t - 1)} e^{\frac{s_t}{C_{vt}}}$$

Le système d'équations régissant l'évolution de la phase dispersée est obtenu en utilisant les mêmes considérations. Les équations d'Euler sans pression sont moyennées faisant apparaître des termes de fluctuations turbulentes. A l'issue des calculs, on obtient un système d'équations incluant les effets turbulents pour les particules. Les particules admettent maintenant une pression turbulente et peuvent ainsi véhiculer des ondes "acoustiques",

car une vitesse du son turbulente peut être définie. Le système homogène associé s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p) &= 0 \\ \frac{\partial \rho_p \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p + P_{pt} \mathbb{I}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho_p E_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p E_p \mathbf{u}_p + P_{pt} \mathbf{u}_p) &= 0 \\ \frac{\partial \rho_p s_{pt}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p s_{pt}) &= 0 \end{cases} \quad (\text{IV.23})$$

$$E_p = e(T) + e_{pt}(P_{pt}, \rho_p) + \frac{\|\mathbf{u}_p\|^2}{2}$$

$$e_p = c_p T_p, \quad e_{pt} = \frac{P_{pt}}{\rho_p(\gamma_t - 1)}$$

Dans la section suivante, nous montrerons que les deux systèmes (IV.22) et (IV.23) sont strictement hyperboliques et bien posés pour la résolution du problème de Riemann. Par ailleurs, on note que lorsque l'entropie turbulente du système (IV.23) tend vers zéro, on retrouve le modèle sans pression.

IV.3.2 Propriétés du Modèle et Problème de Riemann pour la phase dispersée

On se place dans une direction d'espace. Le problème de Riemann pour la phase dispersée est constitué du système (IV.23) ainsi que des conditions initiales suivantes :

$$\begin{cases} x \leq 0 &\Rightarrow \mathbf{W} = \mathbf{W}_l \\ x > 0 &\Rightarrow \mathbf{W} = \mathbf{W}_r \end{cases}, \quad \mathbf{W} = (\rho_p, u_p, P_{pt})^t$$

Avec $\mathbf{W}$ le vecteur des variables primitives associé à la phase dispersée. On peut noter que le modèle d'écoulement pour la phase dispersée est dorénavant à l'image des équations d'Euler pour les fluides compressibles.

• Vitesses des ondes élémentaires

Ecrivons le système (IV.23) sous la forme quasi-linéaire :

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} + A(\mathbf{W}) \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.24})$$

Avec $A(\mathbf{W})$ la matrice jacobienne du système telle que :

$$A(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} u_p & \rho_p & 0 \\ 0 & u_p & 1/\rho_p \\ 0 & \rho_p c_{pt}^2 & u_p \end{pmatrix}$$

IV.3. Modèle Turbulent

où “ c_{pt} ” est la vitesse du son turbulente définie de la façon suivante :

$$c_{pt}^2 = \frac{\frac{P_{pt}}{\rho_p^2} - \frac{\partial e_{pt}}{\partial \rho_p} \Big|_{P_{pt}}}{\frac{\partial e_{pt}}{\partial \rho_p} \Big|_{\rho_p}} = \frac{\gamma_t P_{pt}}{\rho_p}$$

Les valeurs propres de la matrice jacobienne $A(\mathbf{W})$ correspondent aux vitesses des ondes élémentaires. Contrairement au modèle sans pression, la matrice de propagation admet trois valeurs propres réelles et distinctes :

$$\lambda_- = u_p - c_{pt}, \quad \lambda_+ = u_p + c_{pt}, \quad \lambda_0 = u_p$$

On peut trouver un jeu de trois vecteurs propres linéairement indépendant associés aux valeurs propres et formant une base de $\mathbb{R}^3$. Le système (IV.23) est donc strictement hyperbolique. Ainsi, si une perturbation est présente, trois ondes sont émises.

• Relations caractéristiques et invariants de Riemann

Les relations caractéristiques associées au système sont obtenues à l’aide des vecteurs propres à gauche. En multipliant l’équation (IV.24) par ces derniers, on obtient les relations suivantes :

$$\begin{cases} dP_{pt} \pm \rho_p c_p du_p &= 0 \\ dP_{pt} - c_{pt}^2 d\rho_p &= 0 \end{cases}$$

Ces relations s’intègrent aisément pour donner :

$$u_p \pm \frac{2c_{pt}}{\gamma_t - 1} = Constante \quad \text{et} \quad \frac{P_{pt}}{\rho_p^{\gamma_t}} = Constante \quad (\text{IV.25})$$

Les relations (IV.25) sont valables dans le cas de la propagation des ondes acoustiques ou de détente, mais ne sont pas utilisables dans le cas où une discontinuité est présente.

• Cas des discontinuités

Soit une discontinuité se propageant à la vitesse arbitraire σ . Alors les relations de Rankine-Hugoniot associées au système (IV.23) s’écrivent :

$$\begin{aligned} \rho_p(u_p - \sigma) &= \rho_{p0}(u_{p0} - \sigma) \\ \rho_p u_p(u_p - \sigma) + P_{pt} &= \rho_{p0} u_{p0}(u_{p0} - \sigma) + P_{pt0} \\ \rho_p E_p(u_p - \sigma) + P_{pt} u_p &= \rho_{p0} E_{p0}(u_{p0} - \sigma) + P_{pt0} u_{p0} \\ \rho_p s_{pt}(u_p - \sigma) &= \rho_{p0} s_{pt0}(u_{p0} - \sigma) \end{aligned} \quad (\text{IV.26})$$

La dernière relation du système (IV.26) peut s’écrire sous la forme simplifiée $s_{pt} = s_{pt0}$. Compte tenu des invariants de Riemann et des relations de Rankine-Hugoniot obtenus, il est clair que la solution du problème de Riemann associé à la phase dispersée peut être déduite de la résolution du problème de Riemann des équations d’Euler pour les fluides compressibles. Il est donc possible d’utiliser un solveur de Riemann classique pour calculer ces solutions.

IV.3.3 Propriétés du Modèle et Problème de Riemann pour la Phase Gazeuse

La même analyse est opérée sur le système (IV.22). Ceci nous conduit aux résultats suivants :

• Vitesses d'Ondes

Les valeurs propres de la matrice jacobienne associée au système (IV.22) sont :

$$\lambda_- = u - \Gamma, \quad \lambda_+ = u + \Gamma, \quad \lambda_0 = u$$

Où “ Γ ” correspond à une vitesse du son :

$$\Gamma = \sqrt{c^2 + c_t^2} \quad \text{avec} \quad c_t^2 = \frac{\gamma_t P_t}{\rho} \quad \text{et} \quad c^2 = \frac{\gamma P}{\rho}.$$

• Invariants de Riemann

Après intégration des relations caractéristiques du système, on obtient les invariants de Riemann suivants :

$$\begin{aligned} \frac{P}{\rho^\gamma} &= C'_1, & \frac{P_t}{\rho_t^\gamma} &= C'_2 \\ u \pm \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{\Gamma}{\rho} d\rho &= C'_3 \end{aligned} \tag{IV.27}$$

L'un de ces invariants, comme on peut le voir dans le système (IV.27), ne peut être obtenu analytiquement de façon simple. Néanmoins, il peut être calculé numériquement de manière aisée si on le désire. Les relations (IV.27) ne sont pas utilisables dans le cas de la propagation de discontinuités et il faut exprimer des relations permettant de décrire la présence de discontinuité dans l'écoulement.

• Relations de Rankine-Hugoniot

Pour une discontinuité se déplaçant à la vitesse arbitraire σ , les relations de saut associées au système (IV.22) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \rho(u - \sigma) &= \rho_0(u_0 - \sigma) \\ \rho u(u - \sigma) + P_t + P &= \rho_0 u_0(u_0 - \sigma) + P_{t0} + P_0 \\ \rho E(u - \sigma) + (P_t + P)u &= \rho_0 E_0(u_0 - \sigma) + (P_{t0} + P_0)u_0 \\ \rho s_t(u - \sigma) &= \rho_0 s_{t0}(u_0 - \sigma) \end{aligned} \tag{IV.28}$$

La dernière relation du système (IV.28) peut s'écrire sous la forme simplifiée $s_t = s_{t0}$. De par la forme de la vitesse du son Γ , l'intégration directe des invariants de Riemann s'avère plus complexe par rapport au cas classique, un solveur de Riemann approché est dans ce cas plus approprié, le solveur HLLC [73] est un bon candidat. Initialement développé pour les équations d'Euler classiques, on peut aisément étendre ce solveur au modèle turbulent.

IV.3.4 Termes Dissipatifs et Création d'Entropie

Les termes de production d'entropie pour la phase gazeuse et la phase dispersée ont des origines différentes en regard de la modélisation choisie. Pour le gaz, le terme de production d'entropie provient des forces de traînée visqueuse. Pour les particules, la création d'entropie est issue des collisions inter-particules modélisées dans notre modèle par une viscosité turbulente.

Il est important de préciser que les effets dissipatifs considérés ont des origines mécaniques et non thermiques. C'est pourquoi nous considérons les termes de production d'entropie comme des termes de création d'entropie turbulente uniquement, ils ne contribuent pas à la création d'entropie thermodynamique. Cette "séparation" a été effectuée avec succès dans [64] considérant un autre type d'écoulement diphasique.

• Trainée visqueuse dans le modèle associé à la phase porteuse

Dans le cadre du modèle turbulent, l'expression des forces de traînée ne change pas par rapport au modèle sans pression. Ainsi, la force de traînée est donnée par la relation (IV.12). Le système associé à la phase gazeuse devient (nous ne tenons pas compte des échanges thermiques) :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + (P + P_t) \mathbb{I}) & = \lambda (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + (P + P_t) \mathbf{u}) & = \lambda (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}_p \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) & = 0 \quad k = 1, \dots, N \\ \frac{\partial \rho s_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} s_t) & = \frac{\lambda}{T_t} \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}\|^2 \end{array} \right. \quad (\text{IV.29})$$

Un terme de production d'entropie est présent, celui-ci est toujours positif ou nul et est du à la présence des forces de traînée. On rappelle que T_t correspond à la température turbulente définie ainsi :

$$T_t = \frac{e_t}{C_{vt}}$$

Le paramètre C_{vt} est introduit pour la définition de la température turbulente. Cependant, celui ci n'a aucune influence sur le calcul de pression turbulente. Ceci peut être prouvé en exprimant l'équation d'évolution de la pression turbulente où cette constante n'intervient pas :

$$\frac{dP_t}{dt} + \rho c_t^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = \rho (\gamma_t - 1) \lambda \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}\|^2$$

• Viscosité turbulente dans le modèle associé à la phase diluée

Nous avons vu que la dissipation due aux forces de traînée induit un terme de création d'entropie pour la phase gazeuse. Dans cette section, on fait l'hypothèse que les colli-

sions entre particules sont responsables de l'apparition de la turbulence engendrant la dispersion du nuage de particules. Ces collisions sont peu nombreuses par rapport aux collisions ayant lieu dans la phase gazeuse. Une pression thermodynamique n'est pas appropriée pour modéliser ces collisions : un coefficient tel qu'une viscosité turbulente est plus adéquat pour la modélisation de ces collisions.

Nous introduisons un tenseur de "contraintes turbulentes" dans le système associé à la phase dispersée (en rouge dans le système (IV.30)). Ce tenseur comporte un unique paramètre μ_t correspondant à une viscosité turbulente.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p) = 0 \\ \frac{\partial \rho_p \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p + P_{pt} \mathbb{I}) = \lambda(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) + \nabla \cdot (\mu_t \nabla \mathbf{u}_p) \\ \frac{\partial \rho_p E_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p E_p \mathbf{u}_p + P_{pt} \mathbf{u}_p) = \lambda(\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \cdot \mathbf{u}_p + \nabla \cdot (\mu_t \mathbf{u}_p^t \nabla \mathbf{u}_p) \\ \frac{\partial \rho_p s_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p s_p) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{IV.30})$$

Les particules étant supposées incompressibles, l'énergie interne qui leur est associée dépend uniquement de la température (ou entropie). L'entropie thermodynamique des particules se conservant le long des trajectoires, on peut obtenir une équation analogue pour l'énergie interne des particules,

$$\frac{de_p}{dt} = 0 \Rightarrow \frac{\partial \rho_p e_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p e_p) = 0$$

Cette équation remplacera désormais la dernière équation du système (IV.30), les deux formulations étant équivalentes. Comme nous l'avons déjà précisé, la production d'entropie sera supposée n'être que d'origine turbulente. En combinant les équations du système (IV.30), on obtient l'expression du terme de production entropique turbulent :

$$\frac{\partial \rho_p s_{pt}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p s_{pt}) = \mu_t \text{Tr} \{ (\nabla \mathbf{u}_p) \cdot (\nabla \mathbf{u}_p)^T \} \geq 0 \quad (\text{IV.31})$$

Ainsi le modèle satisfait le second principe de la thermodynamique car le terme de production demeure positif ou nul. La résolution de l'équation (IV.31) n'est pas nécessaire. L'évaluation du terme de production d'entropie présente certaines difficultés. L'entropie turbulente est obtenue au moyen de l'équation d'évolution de l'énergie totale, dans laquelle le terme de production apparaît sous la forme de la divergence d'un flux.

IV.3.5 Récapitulatif du Modèle Diphasique Turbulent.

Finalement, le modèle complet pour les écoulements gaz-particules dilués turbulents s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) & = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + (P + P_t) \mathbb{I}) & = \lambda (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{u} + (P + P_t) \mathbf{u}) & = \lambda (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}_p \\ \frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_k \mathbf{u}) & = 0 \quad k = 1, \dots, N \\ \frac{\partial \rho s_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} s_t) & = \frac{\lambda}{T_t} \|\mathbf{u}_p - \mathbf{u}\|^2 \\ \\ \frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p) & = 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p \otimes \mathbf{u}_p + P_{pt} \mathbb{I}) & = \lambda (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) + \nabla \cdot (\mu_t \nabla \mathbf{u}_p) \\ \frac{\partial \rho_p E_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p E_p \mathbf{u}_p + P_{pt} \mathbf{u}_p) & = \lambda (\mathbf{u} - \mathbf{u}_p) \cdot \mathbf{u}_p + \nabla \cdot (\mu_t \mathbf{u}_p^t \nabla \mathbf{u}_p) \\ \frac{\partial \rho_p e_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_p \mathbf{u}_p e_p) & = 0 \end{array} \right. \quad (\text{IV.32})$$

Avec,

$$\begin{aligned} E_p &= e_p(T_p) + e_{pt}(P_{pt}, \rho_p) + \frac{\|\mathbf{u}_p\|^2}{2}, \\ e_p &= c_{pp} T_p, \quad e_{pt} = \frac{\rho_p^{\gamma_t-1}}{\gamma_t - 1} \exp\left\{\frac{s_{pt}}{C_{vt}}\right\} \\ E &= e(\rho, P) + e_t(P_t, \rho) + \frac{\|\mathbf{u}\|^2}{2}, \\ e &= \frac{P}{\rho(\gamma - 1)}, \quad e_t = \frac{\rho^{\gamma_t-1}}{\gamma_t - 1} \exp\left\{\frac{s_t}{C_{vt}}\right\} \\ T_t &= \frac{e_t}{C_{vt}}, \quad \gamma_t = \frac{n+2}{n}, \quad C_{vt} = \frac{R_t}{\gamma_t - 1} \end{aligned}$$

Ce système d'équation est résolu numériquement grâce à un schéma de Godunov, les flux solutions du problème de Riemann sont calculés grâce à un solveur de Riemann approché, en l'occurrence un solveur HLLC [73].

IV.4 Validations et Comparaison avec le Modèle sans Pression

Nous allons maintenant examiner le comportement du modèle turbulent sur un cas test pour lequel le modèle sans pression donne de bons résultats. Les résultats associés au modèle turbulent doivent s'en approcher.

IV.4.1 Configuration Unidimensionnelle

Dans cette section, nous étudions l'interaction d'une onde de choc avec un nuage de particules initialement au repos et situé dans la chambre basse pression d'un tube à choc. La densité apparente des particules dans le nuage vaut $\rho_p = 1 \text{ kg/m}^3$. Pour des raisons numériques, on utilisera une densité apparente très faible, mais non nulle dans le reste du tube à choc ($\rho_p = 10^{-3} \text{ kg/m}^3$). Les conditions initiales sont représentées sur la Figure IV.2. La pression du gaz dans la chambre haute pression est de 2 bar et la densité de 10 kg/m^3 . Les conditions du gaz dans la chambre basse pression sont telles que : $P = 1 \text{ bar}$ et $\rho = 1 \text{ kg/m}^3$. On observe les solutions obtenues au même instant, à $t = 2.22 \text{ ms}$.

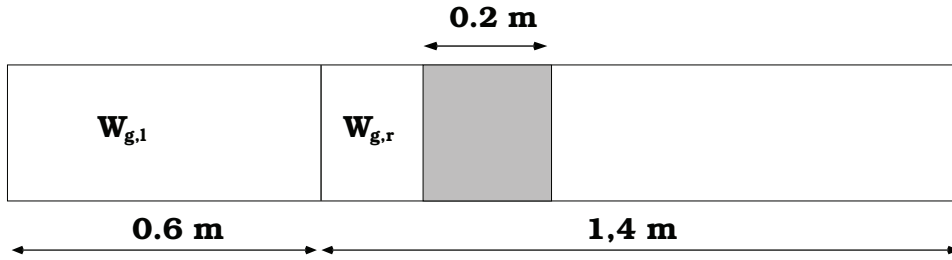


Figure IV.2 – Configuration étudiée : tube à choc contenant un nuage de particules. Le rapport de pression initial est égal à 2. Le nuage de particules est situé entre les abscisses $x = 1 \text{ m}$ et $x = 1.2 \text{ m}$.

• Résultats “de référence ”obtenus avec le modèle sans pression

Une onde de choc se propage dans la chambre basse pression et un faisceau d'ondes de détente se propage dans la chambre haute pression. Le choc interagit avec le nuage de particules et il se produit un phénomène de diffraction. Une partie du choc est transmise dans le nuage et une autre est réfléchi par celui-ci. Le nuage est tout d'abord comprimé, puis il se met progressivement en mouvement dans le sens de l'écoulement. Sur la Figure IV.3, on a représenté les profils des différentes variables de l'écoulement.

IV.4. Validations et Comparaison avec le Modèle sans Pression

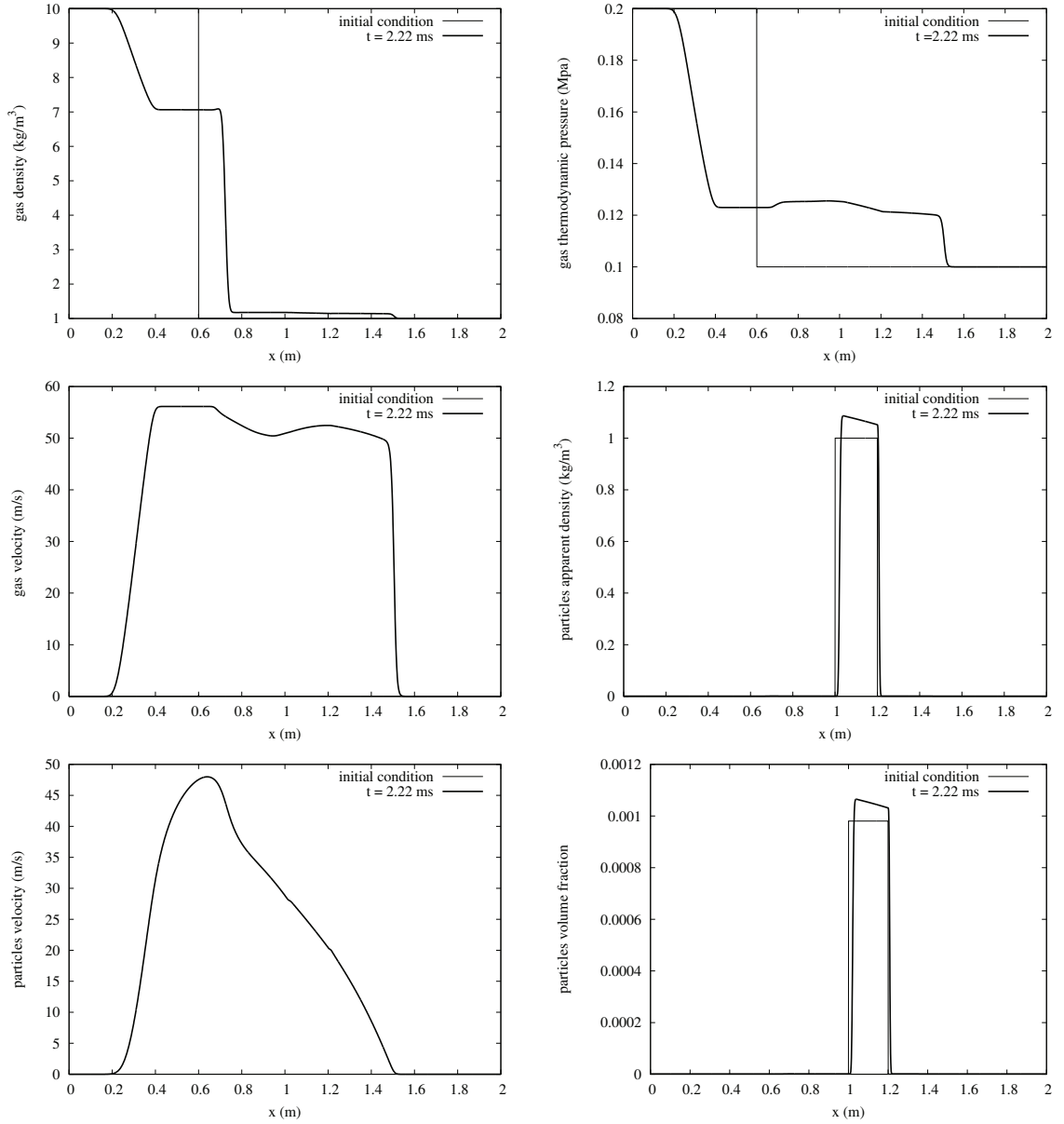


Figure IV.3 – Profils des variables associées au gaz et aux particules à $t = 0$ s et $t = 2.22$ ms dans le cas du tube à choc diphasique (modèle sans pression).

• Résultats obtenus avec le modèle turbulent

L'utilisation du modèle turbulent nécessite l'initialisation de la pression turbulente. Nous utilisons pour les deux phases une pression turbulente initiale très faible de 10 Pa. La viscosité turbulente est choisie égale à $\mu_t = 2.10^{-3} \text{ kg/m/s}$. Cette valeur n'a pas d'importance dans le cas d'un écoulement unidimensionnel, cette remarque sera illustrée plus tard dans ce document. Les variables de l'écoulement sont tracées sur la Figure IV.4.

IV. Modèles d'Écoulements Diphasiques

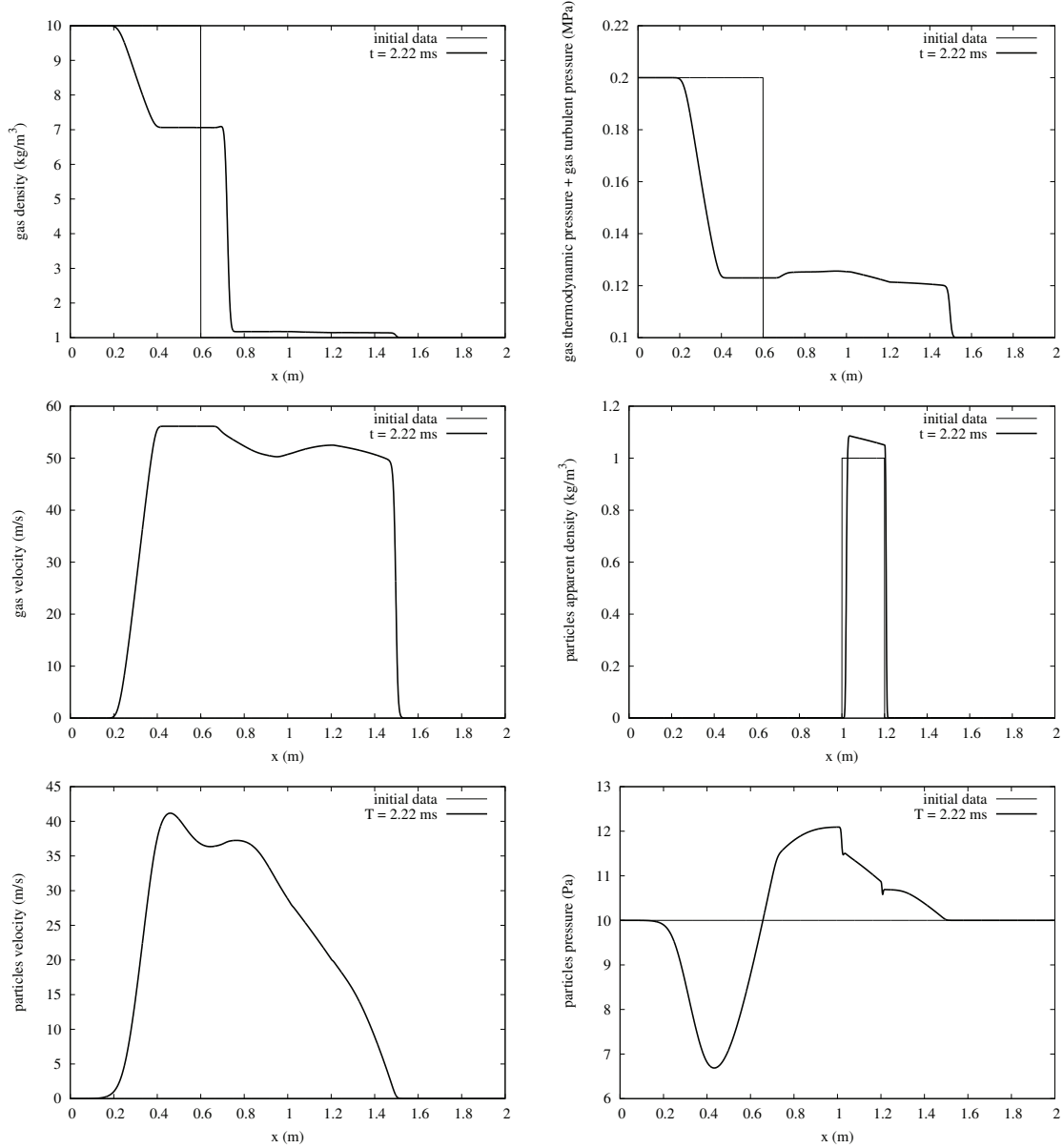


Figure IV.4 – Profils des variables associées au gaz et aux particules à $t = 0$ s et $t = 2.22$ ms dans le cas du tube à choc diphasique (modèle turbulent).

La faible fraction volumique de particules de part et d'autre du nuage ($\alpha_p \simeq 10^{-6}$) implique une rapide accélération de la phase dispersée à l'extérieur du nuage (voir la vitesse des particules sur la Figure IV.4). Cependant, la faible proportion des particules implique qu'elles n'ont pas d'influence sur l'écoulement de la phase porteuse. On peut constater que les profils de vitesse des particules présentent quelques différences sur les Figures IV.3 et IV.4, mais ces dernières ne sont présentes qu'à l'extérieur du nuage où les particules sont quasiment absentes et ce, pour les raisons évoquées précédemment. Ces différences ne sont donc pas significatives. Pour les mêmes raisons, la pression turbulente doit être

IV.4. Validations et Comparaison avec le Modèle sans Pression

observée à l'intérieur du nuage car son évolution à l'extérieur n'a pas de sens physique.

Les Figures IV.3 et IV.4 montrent les mêmes comportements de la vitesse, de la pression et de la densité du gaz. Les profils de densité apparente sont également très proches. Pour comparer plus précisément les profils des variables associées aux particules, on les représente sur un même graphe.

Les profils obtenus avec les différents modèles sont tracés et comparés sur la Figure IV.5 (on a représenté les grandeurs à l'intérieur du nuage uniquement). Les courbes obtenues sont superposées. On peut donc conclure que les deux modèles sont équivalents pour les configurations unidimensionnelles. Nous allons maintenant examiner l'influence de la viscosité turbulente sur le comportement de la phase dispersée.

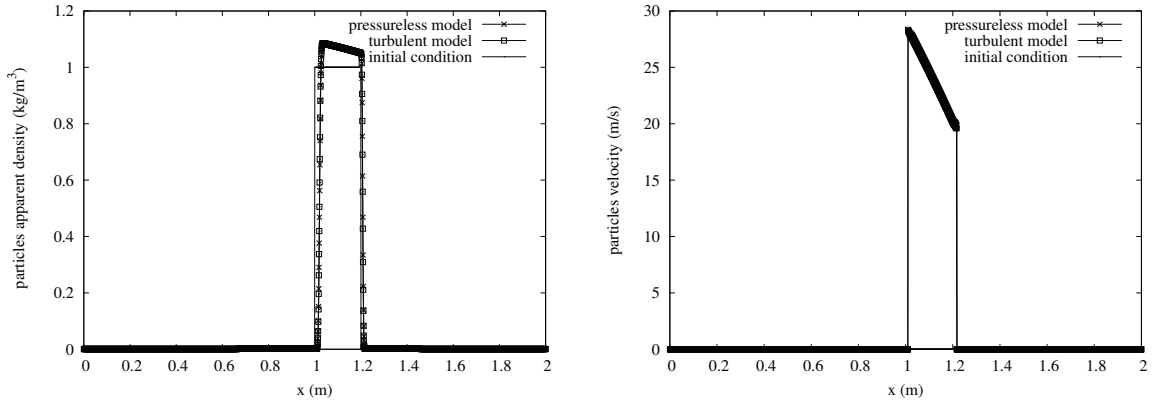


Figure IV.5 – Comparaison des profils obtenus avec les modèles sans pression et turbulent dans le cas du tube à choc. Les vitesses ainsi que les densités sont en accord parfait (résultats présentés à l'instant $t=2.22\text{ms}$).

- **Influence de la viscosité turbulente**

Considérons maintenant le modèle turbulent uniquement, on effectue un même calcul plusieurs fois avec différentes valeurs de la viscosité turbulente : $\mu_t = \mu_0 = 2.10^{-3} \text{ kg/m/s}$, $\mu_t = 10\mu_0$ et $\mu_t = 100\mu_0$. Les profils de densité apparente et de vitesse obtenus avec chacune de ces valeurs ont été tracés sur un même graphe, représenté sur la Figure IV.6.

Ainsi, quelle que soit la valeur de la viscosité turbulente utilisée, les profils obtenus sont identiques. Il est clair que ce paramètre n'a aucune influence sur l'évolution des variables dans le cadre des écoulements unidimensionnels.

- **Influence de la pression turbulente initiale**

Considérons maintenant trois pressions turbulentes initiales différentes ($P_t = 10\text{Pa}$, $P_t = 50\text{Pa}$, $P_t = 250\text{Pa}$). Le cas test demeure identique. La viscosité turbulente est ini-

IV. Modèles d'Écoulements Diphasiques

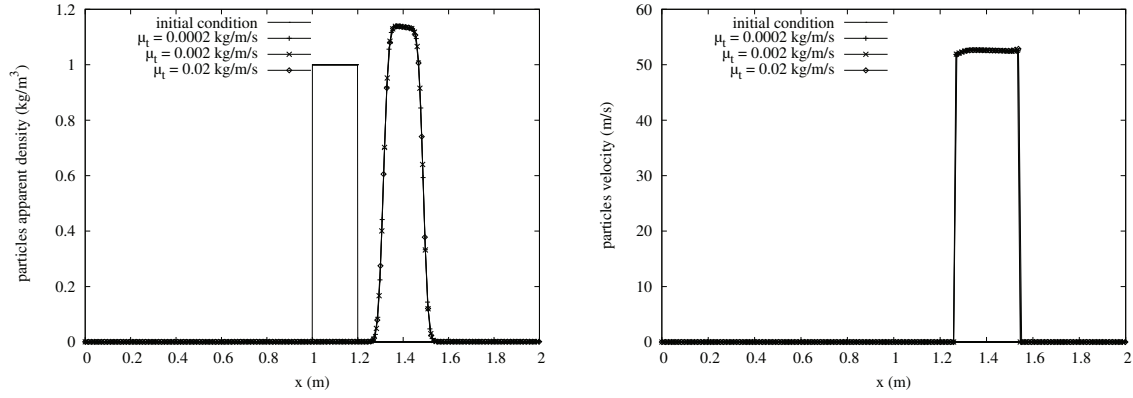


Figure IV.6 – Influence de la viscosité turbulente dans le cas du tube à choc. Les profils de densité apparente et de vitesse des particules dans le nuage ne montrent aucune influence de ce paramètre. Les résultats sont comparés à l'instant $t = 8.6 \text{ ms}$.

tialisée à $\mu_0 = 2.10^{-3} \text{ kg/m/s}$. Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure IV.7. On constate quelques divergences entre les courbes (densité et vitesse). En particulier, une dissymétrie est présente dans le nuage. Celle-ci provient du fait que la production de pression turbulente n'est pas la même de part et d'autre du nuage de particules. Mais ces différences ne sont pas suffisamment significatives pour en déduire un comportement non physique.

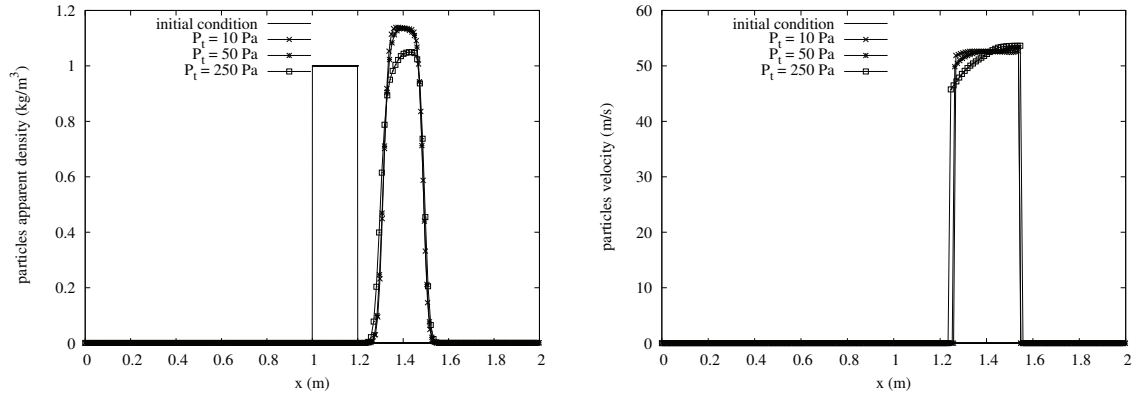


Figure IV.7 – Influence de la pression turbulente initiale dans le cas du tube à choc. Les profils de densité apparente et de vitesse des particules dans le nuage sont tracés pour différentes valeur de P_t à $t = 8.6 \text{ ms}$.

En conclusion, dans les cas unidimensionnels, quels que soient les paramètres turbulents, les deux modèles ont des comportements similaires (quasiment confondus). Ceci est encourageant, sachant que le modèle sans pression est très efficace dans ce type de configuration. Nous allons maintenant voir ce qu'il en est des simulations multi-dimensionnelles.

IV.4.2 Configurations Bidimensionnelles

Considérons maintenant une configuration plus sophistiquée où d'autres effets apparaissent. Elle consiste en l'injection d'un jet de particules dans de l'air initialement au repos. Afin d'exclure les effets dus à la fragmentation (dans le cas de jets liquides), on considère un jet de particules solides.

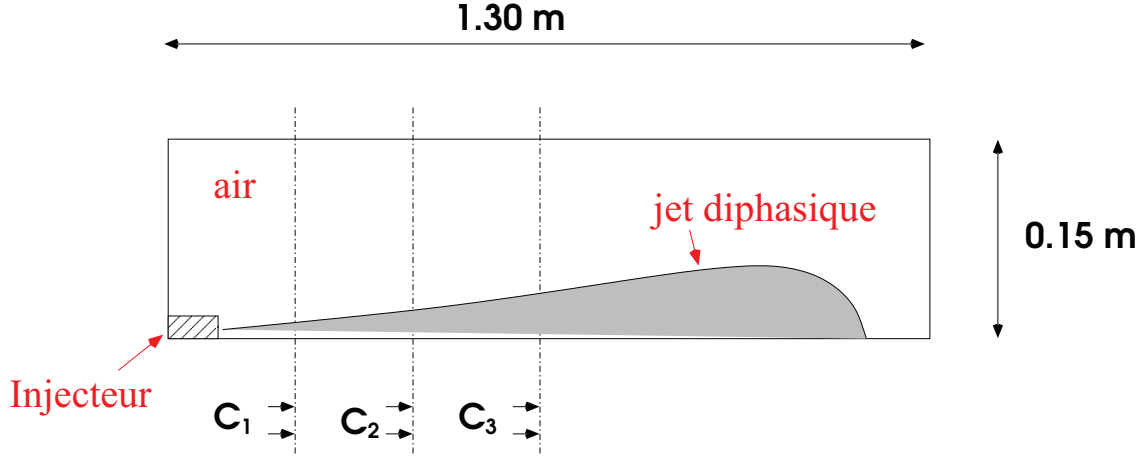


Figure IV.8 – Représentation schématique de la configuration étudiée.

Plusieurs études expérimentales ont été menées indépendamment, notamment dans [35] et [78] utilisant des particules de différentes natures. Les données expérimentales correspondantes ont été utilisées pour la validation du modèle turbulent. On a schématisé le dispositif expérimental sur la Figure IV.8. Un injecteur de quelques millimètres de diamètre génère un jet de particules dans une cavité contenant de l'air dans les conditions atmosphériques. Dans [35] et [78], la densité apparente des particules a été mesurée au niveau de trois plans de coupe positionnés à différentes distances de l'injecteur. On note C_1 , C_2 et C_3 ces plans de coupe, schématisés sur la Figure IV.8. Les configurations étudiées par les auteurs sont résumées dans la TABLE IV.1.

	Tsuji [78]	Hishida [35]
Diamètre des particules (μm)	500	64
densité du matériau (kg/m^3)	1020	2590
vitesse d'injection (m/s)	24	30
Densité apparente d'injection (kg/m^3)	0.2	1.0
Diamètre de l'injecteur D (mm)	20	13

TABLE IV.1 – Données Expérimentales associées aux jets de particules étudiés dans [35] et [78].

Il Reste par ailleurs à spécifier les conditions aux limites utilisées, la valeur des paramètres turbulents ainsi que des conditions initiales.

• Conditions aux limites

Le domaine contient 6 limites distinctes représentées sur la Figure IV.9. Les calculs numériques sont effectués en 2 dimensions dans une configuration axi-symétrique.

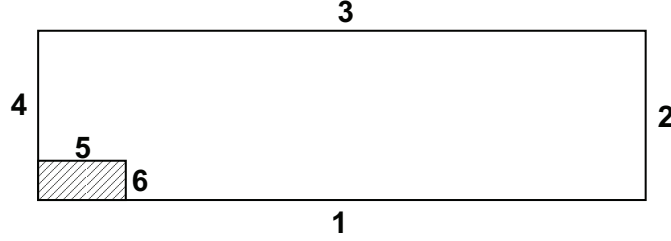


Figure IV.9 – Conditions aux limites.

La limite **1** est traitée par une condition de symétrie. Les limites **2** et **3** sont des limites de type absorption. La limite **4** est connectée à un réservoir (de gaz et de particules). Le bord **5** de l'injecteur correspond à une paroi. Au niveau de l'injecteur (limite **6**), on impose une injection supersonique de particules (supersonique par rapport à la vitesse du son turbulente des particules c_{pt}).

• Conditions initiales

Le gaz est initialement au repos dans les conditions atmosphériques avec une pression turbulente initiale faible ($P_t = 10 \text{ Pa}$). La fraction volumique des particules est non nulle dans la totalité du domaine de calcul. Elle correspond à une densité apparente de particules de 10^{-3} kg/m^3 . La pression turbulente de la phase dispersée est prise égale à la pression turbulente dans le gaz ($P_{pt} = 10 \text{ Pa}$). La viscosité turbulente est prise égale à $\mu_t = 2.10^{-3} \text{ kg/m/s}$.

• Comparaison qualitative

Sur la Figure IV.10, sont présentés les contours de densité apparente obtenus avec le modèle sans pression et le modèle turbulent. Les résultats sont très différents, le jet calculé avec le modèle sans pression ne présente aucun élargissement et les trajectoires des particules correspondent à des ligne droites contrairement à celui calculé avec le modèle turbulent, qui présente un élargissement important et progressif.

• Comparaison avec les données expérimentales de [35]

Le domaine de calcul contient 280×100 mailles dans les direction **x** et **y**. La géométrie est celle représentée sur la Figure IV.8. Les paramètres de calculs sont résumés dans la TABLE IV.1. Sur la Figure IV.11, la densité apparente normalisée calculée avec le modèle turbulent est confrontée aux résultats expérimentaux issus de [35] à l'état stationnaire (la densité apparente est normalisée par la densité apparente au centre du jet).

IV.4. Validations et Comparaison avec le Modèle sans Pression

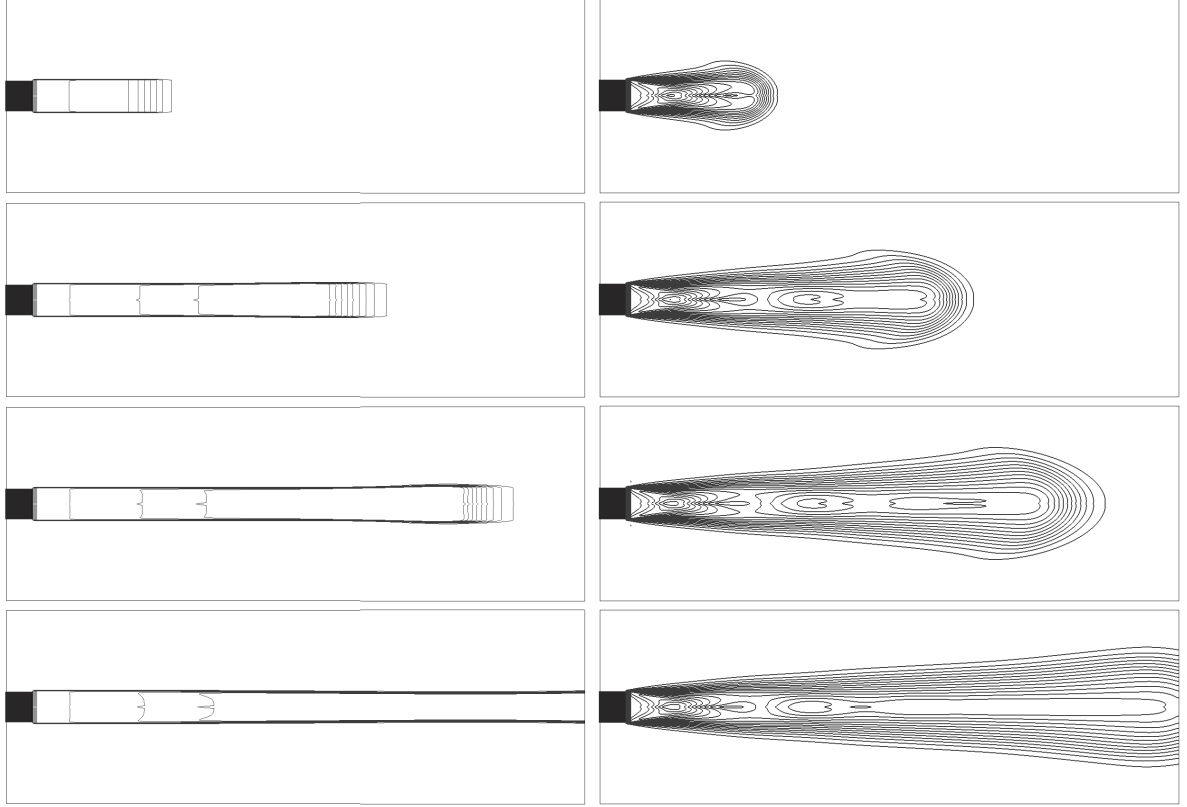


Figure IV.10 – Contours de densité apparente dans la configuration de la référence [35] tracés à différents instants ($t_1 = 2.8ms$, $t_2 = 9.6ms$, $t_3 = 18.2ms$ et $t_4 = 30ms$). Les résultats issus du modèle sans pression sont représentés à gauche, ceux associés au modèle turbulent sont représentés à droite.

On constate sur la Figure IV.11 que plus le plan de coupe est éloigné de l'injecteur, plus le jet est large. Ceci est dû aux effets turbulents parfaitement reproduits par la simulation.

• Comparaison avec les données expérimentales de [78]

Nous avons effectué les mêmes simulations pour la configuration proposée dans [78]. La densité apparente de particules normalisée est tracée à l'état stationnaire et est confrontée aux résultats expérimentaux sur la Figure IV.12. Dans cette configuration également, les résultats issus de la simulation et les résultats expérimentaux présentent un très bon accord.

Dans les deux cas étudiés, les résultats obtenus avec le modèle turbulent sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux. On peut néanmoins constater que le dernier graphe de la Figure IV.12 présente un moins bon accord que les précédents. Cependant l'apparition de bruit sur les signaux expérimentaux indique qu'une barre d'erreur est présente (mais non représentée). D'autre part, la grandeur tracée sur les graphes corre-

IV. Modèles d'Écoulements Diphasiques

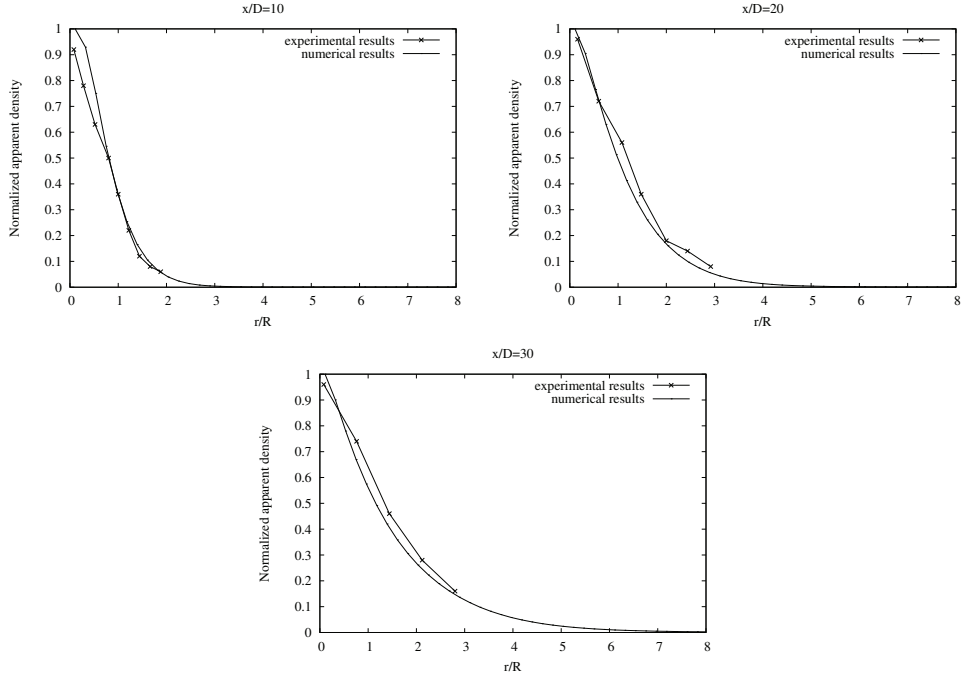


Figure IV.11 – Représentation de la densité apparente normalisée ρ_p/ρ_{p0} au niveau des trois plans de coupe $C_1 = 10 D$, $C_2 = 20 D$ et $C_3 = 30 D$.

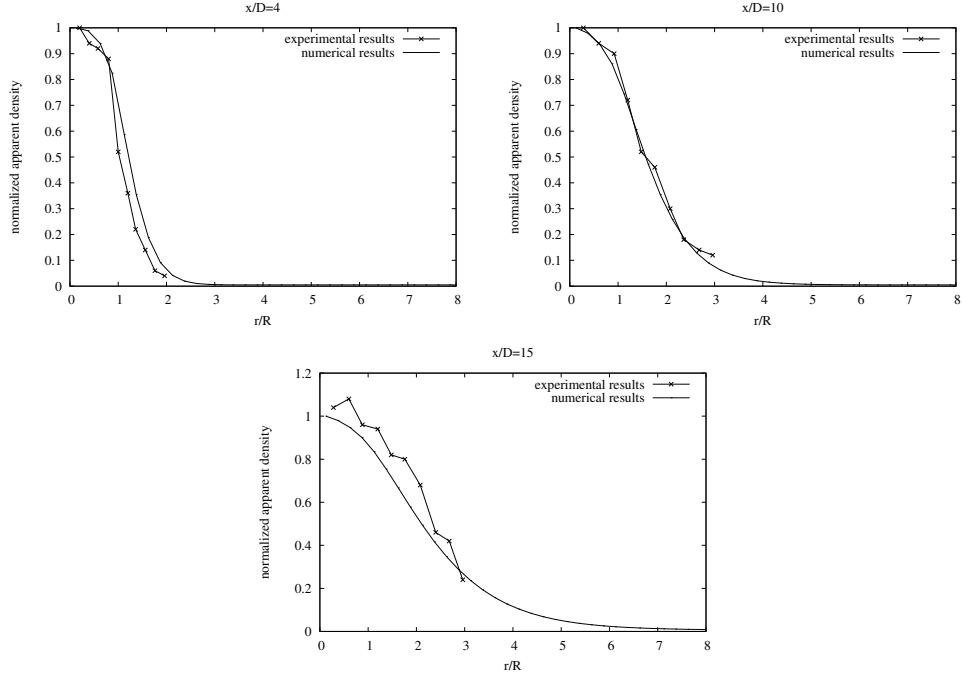


Figure IV.12 – La densité apparente normalisée ρ_p/ρ_{p0} est représentée au niveau des trois plans de coupe $C_1 = 4 D$, $C_2 = 10 D$ et $C_3 = 15 D$.

IV.4. Validations et Comparaison avec le Modèle sans Pression

spond au rapport ρ_p/ρ_{p0} . A la distance normalisée de $15 D$, ρ_p et ρ_{p0} sont faibles, ce qui implique une moindre précision sur le rapport ρ_p/ρ_{p0} .

On peut noter que les résultats des Figures IV.12 et IV.11 ont été obtenus avec la même viscosité turbulente égale à $2.10^{-3} kg/m/s$, ce qui est assez remarquable au vu des matériaux totalement différents utilisés par les auteurs de [78] et [35]. Si l'on procède aux mêmes simulations avec le modèle sans pression, on ne constate aucun élargissement du jet, ce qui est le cas également si l'on utilise une viscosité turbulente nulle (Figure IV.13).

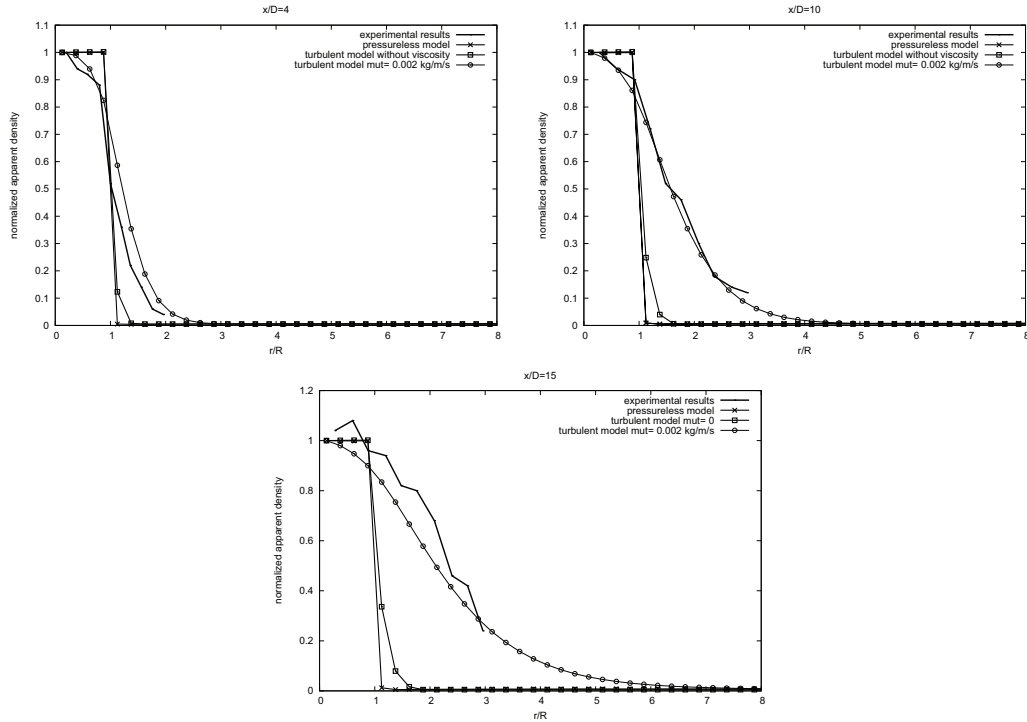


Figure IV.13 – La densité apparente normalisée ρ_p/ρ_{p0} est représentée au niveau des trois plans de coupe $C_1 = 4 D$, $C_2 = 10 D$ et $C_3 = 15 D$. On compare les résultats issus de la résolution du modèle sans pression ainsi que du modèle turbulent, avec et sans viscosité.

Finalement, un nouveau modèle pour les écoulements gaz particules dilués a été développé, celui-ci étant strictement hyperbolique contrairement au modèle sans pression. Le modèle turbulent peut reproduire des phénomènes impossibles à simuler avec le modèle classique, à l'aide d'un simple modèle de collisions. En effet, la production de turbulence dans ce modèle est due à la viscosité turbulente qui simule ces collisions entre particules, ce qui permet l'obtention de résultats bien meilleurs que le modèle sans pression dans ce type de configurations.

Nous avons cependant implémenté le modèle sans pression dans le code de calcul tridimensionnel, pour des raisons de coût numérique. En effet, les équations d'Euler sans pression

IV. Modèles d'Écoulements Diphasiques

nous permette de ne résoudre le système d'équations qu'aux endroits où des particules sont présentes. Le modèle turbulent admet une vitesse du son turbulente qui doit être définie en tous points et ne permet donc pas l'utilisation d'une densité apparente nulle.

Chapitre V

Résultats Numériques

Dans ce chapitre, nous présentons des résultats issus de simulations effectuées avec le code de calcul tridimensionnel. Certains de ces résultats sont confrontés avec des résultats expérimentaux, d'autres sont présentés à titre d'illustrations caractérisant les aptitudes du code de calcul à simuler des écoulements variés.

V.1 Simulation d'ondes de souffle “Blast wave”

Nous présentons ici des résultats associés à l'étude de la propagation d'onde de choc en présence d'obstacles. Les résultats obtenus sont confrontés avec des données expérimentales disponibles sur plusieurs configurations différentes. Le premier cas présenté correspond à l'étude de la propagation d'une onde de souffle dans un canyon urbain. L'explosion est générée par la détonation d'une charge d'explosif solide, les signaux de surpression seront comparés avec ceux issus de [57]. Nous étudions par la suite des ondes de souffle provoquées par la détonation d'un mélange gazeux réactif. Les signaux de surpression expérimentaux ainsi que les conditions initiales sont issus dans ce cas de [77].

V.1.1 Evolution d'une onde de choc dans un canyon urbain

On étudie ici la propagation d'une onde de choc générée par l'explosion d'une charge d'explosif secondaire. Dans [57], les auteurs reproduisent une explosion de 1000 kg de TNT située entre deux murs et ce, à échelle réduite. Les expériences ont été menées à échelle $1/40^{eme}$. La charge correspond à un équivalent TNT de 15.625 g, modélisé par une charge de 11.09 g de DEMEX 100 auquel est ajouté un détonateur électrique contenant 0.75 g d'explosif primaire.

La configuration étudiée est représentée sur la Figure V.1 Deux murs de hauteur H identique, se font face et sont séparés d'une distance W . La hauteur H ainsi que la distance W séparant les parois sont variables. Les quatre configurations étudiées sont résumées dans la TABLE V.1.

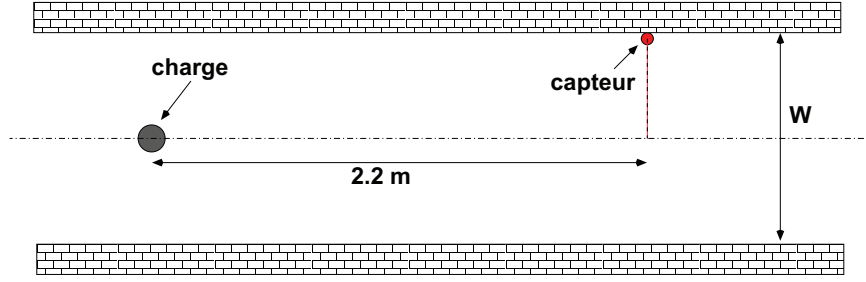


Figure V.1 – Configuration étudiée : une charge explosive est située au milieu d’une “rue” modélisée par deux murs parallèles. Un capteur de pression est placé aux abords de l’un de ces murs.

	W (mm)	H (mm)
Cas (a)	400	150
Cas (b)	400	600
Cas (c)	1200	150
Cas (d)	1200	600

TABLE V.1 – Résumé des configurations étudiées

L’objectif est ici de reproduire numériquement ces expériences et de comparer les résultats issus de nos simulations avec les résultats expérimentaux. On se place dans le cas d’une explosion à volume constant. Ce qui implique que l’on fait l’hypothèse que l’explosif est instantanément pulvérisé par la détonation. On considère donc l’explosif comme un gaz dont il faut évaluer les caractéristiques thermodynamiques. Pour déterminer les conditions initiales, on utilise un autre code dédié à ce type de calculs permettant de caractériser l’explosion à volume constant suivant le type d’explosif utilisé. Deux espèces chimiques sont nécessaires pour ce calcul, l’une correspond à l’explosif et l’autre à l’air. Les paramètres thermodynamiques associés à chacune des espèces sont les suivants :

$$\begin{aligned} \gamma_{Air} &= 1.4 & C_{v_{Air}} &= 719 \text{ J/Kg/K} \\ \gamma_{explo} &= 3.15 & C_{v_{explo}} &= 1110 \text{ J/Kg/K} \end{aligned}$$

La pression et la densité au sein de la charge sont telles que :

$$P = 155477 \text{ Bar} \quad \rho = 1806 \text{ kg/m}^3$$

Des conditions limites d’absorption sont utilisées pour ces calculs. Le domaine est constitué de mailles cubiques d’arête 1 cm. Les signaux expérimentaux ont été obtenus à partir de [57] grâce à un logiciel permettant d’extraire un nuage de points à partir d’une image. Il s’agit du logiciel **PlotDigitizer** compatible avec tous les systèmes d’exploitation. Les résultats sont reportés sur la Figure V.2 où nous avons tracé les signaux de surpression

V.1. Simulation d'ondes de souffle "Blast wave"

obtenus numériquement, comparés aux signaux expérimentaux issus de [57]. Dans les quatre configurations, on constate que la dynamique des ondes est bien reproduite par la simulation, l'accord entre les courbes est assez bon dans toutes les configurations étudiées.

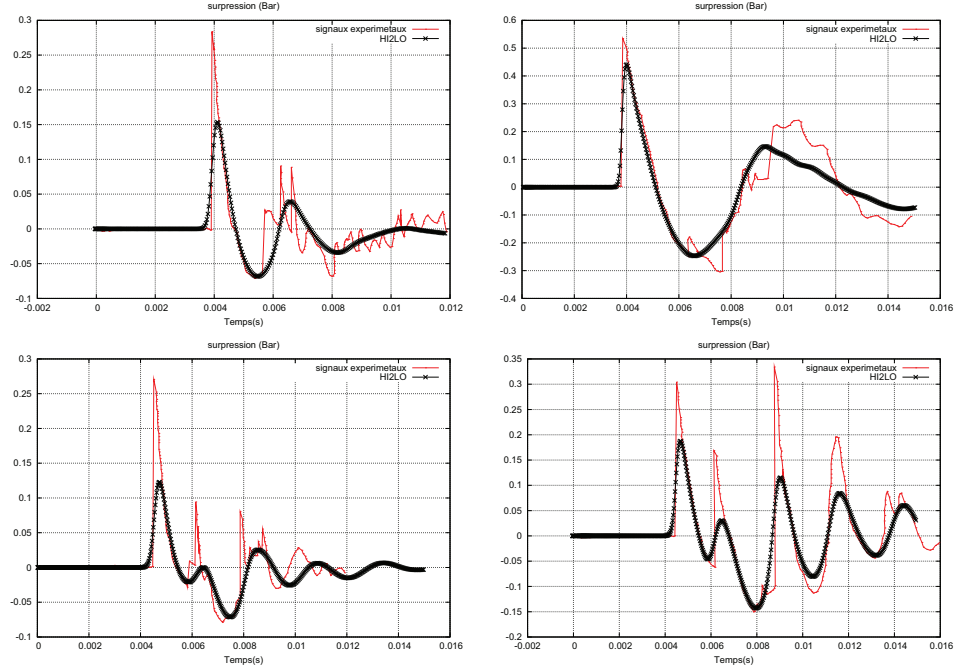


Figure V.2 – Comparaison des signaux de surpression associés aux quatre configurations. Les signaux extraits de [57] sont présentés en rouge, ceux issus de la simulation sont représentés par des symboles, en noir.

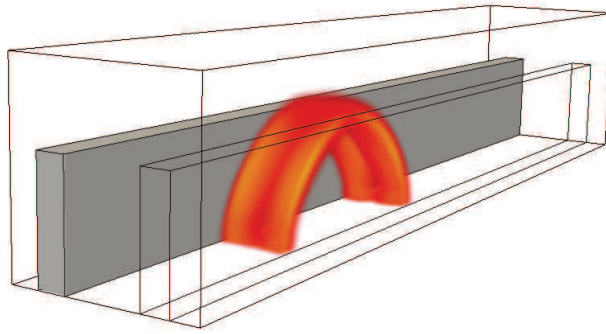


Figure V.3 – Visualisation tridimensionnelle du champ de densité à l'instant $t=0.6$ ms.

Sur la Figure V.3, on peut voir le champ de densité du gaz après 0.6 ms de temps physique.

V.1.2 Interaction d'une Onde de Choc avec un Obstacle Parallélépipédique

Dans la thèse de Sophie Trelat [77], l'interaction d'onde de pression (ou onde de souffle) avec des obstacles de différentes natures a été étudiée. Nous allons reproduire par la simulation certaines des configurations traitées et comparer les signaux de surpression expérimentaux aux signaux calculés numériquement.

Présentation du dispositif

L'onde de choc est générée expérimentalement par la détonation d'un mélange gazeux propane-oxygène dans les proportions stoechiométriques. On utilise une explosion à volume constant pour modéliser la charge. Sur la Figure V.4 à gauche, on a représenté la configuration étudiée. Un parallélépipède est positionné à une distance “ d ” d'une charge hémisphérique gazeuse. La charge hémisphérique de rayon “ r_0 ” est confinée via une bulle de savon et un anneau métallique.

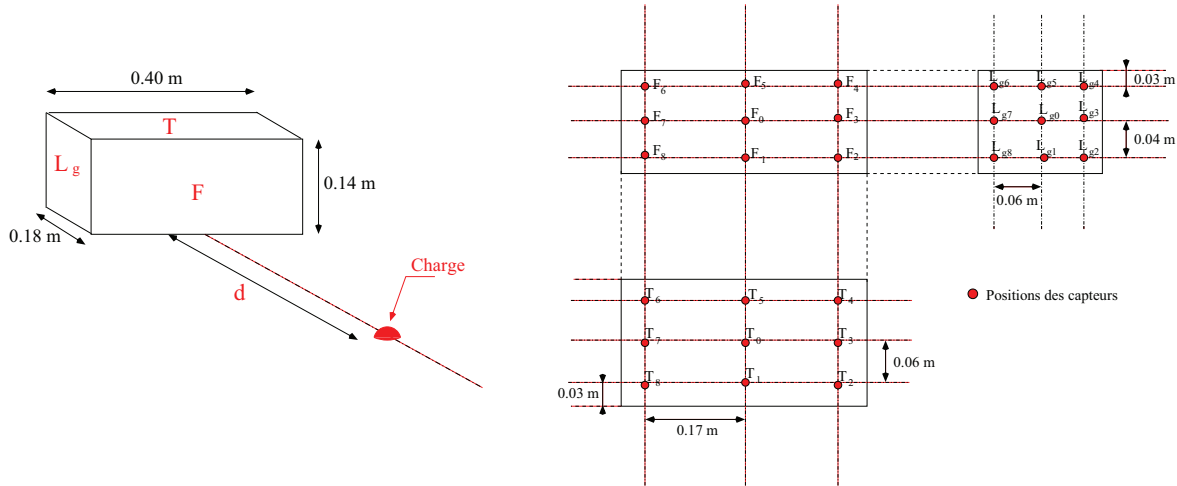


Figure V.4 – A gauche : schématisation de la configuration étudiée et dimensions de l'obstacle. A droite : positions des capteurs eulériens sur l'obstacle.

Des capteurs eulériens sont positionnés sur l'obstacle et sont visibles à droite sur la Figure V.4. Nous n'avons pas représenté les capteurs se situant sur la face arrière ni ceux localisés sur la face latérale droite. Ceux-ci sont positionnés de manière symétrique à ceux situés sur la face avant et la face latérale gauche respectivement.

Configuration 1

On se place premièrement dans le cas où la distance séparant l'obstacle du centre de la charge et le rayon de la charge sont tels que :

$$d = 0.1m \quad r_0 = 0.03m$$

V.1. Simulation d'ondes de souffle "Blast wave"

Comme dans le cas étudié dans la section précédente, les signaux de pression expérimentaux sont récupérés à l'aide du logiciel libre "**PlotDigitizer**". On considère le mélange des produits de détonation associés à l'explosion comme constituant une seule espèce, dont les paramètres thermodynamiques sont :

$$\gamma_{explo} = 1.206 \quad \text{et} \quad C_{v_{explo}} = 1385 J/kg/K$$

Le reste du domaine contient de l'air dans les conditions atmosphériques dont les paramètres thermodynamiques ont été indiqués précédemment. Les conditions initiales de pression et de température à l'intérieur de la charge sont les suivantes :

$$P_0 = 18.97 \text{ Bar} \quad \text{et} \quad \rho_0 = 1,82 \text{ kg/m}^3$$

Pour ce premier cas, les signaux de pression sont étudiés au niveau de 4 capteurs, l'un positionné sur la face avant de l'obstacle, les trois autres sur la face latérale gauche de celui-ci (voir Figure V.4 à droite) :

$$F_7, \quad L_{g0}, \quad L_{g3} \quad \text{et} \quad L_{g7}.$$

Les résultats obtenus numériquement sont comparés avec les signaux expérimentaux sur la Figure V.5. On obtient un bon accord entre les courbes. Des différences sont néanmoins visibles, celles-ci peuvent être dues au processus de moyenne effectué au sein des cellules de calcul, ainsi qu'à l'incertitude sur la position des capteurs numériques qui ne peuvent être positionnés exactement à la position souhaitée.

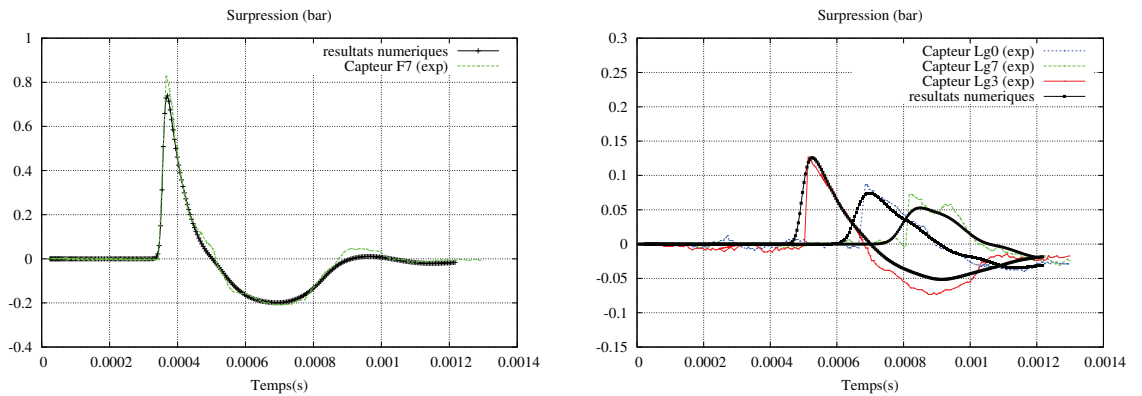


Figure V.5 – Comparaison des signaux obtenus numériquement (symboles) avec les signaux expérimentaux issus de [77].

Sur les Figures V.6 et V.7, nous avons représenté le champ de pression à différents instants afin d'apprécier l'évolution et la réflexion de l'onde de choc incidente. Sur la Figure V.6, nous avons choisi une visualisation en volume. Sur la Figure V.7, le champs de pression au niveau d'une section est présenté à différents instants (la section est normale à l'axe $\mathbf{z}$ et est située à $0.07m$ de hauteur).

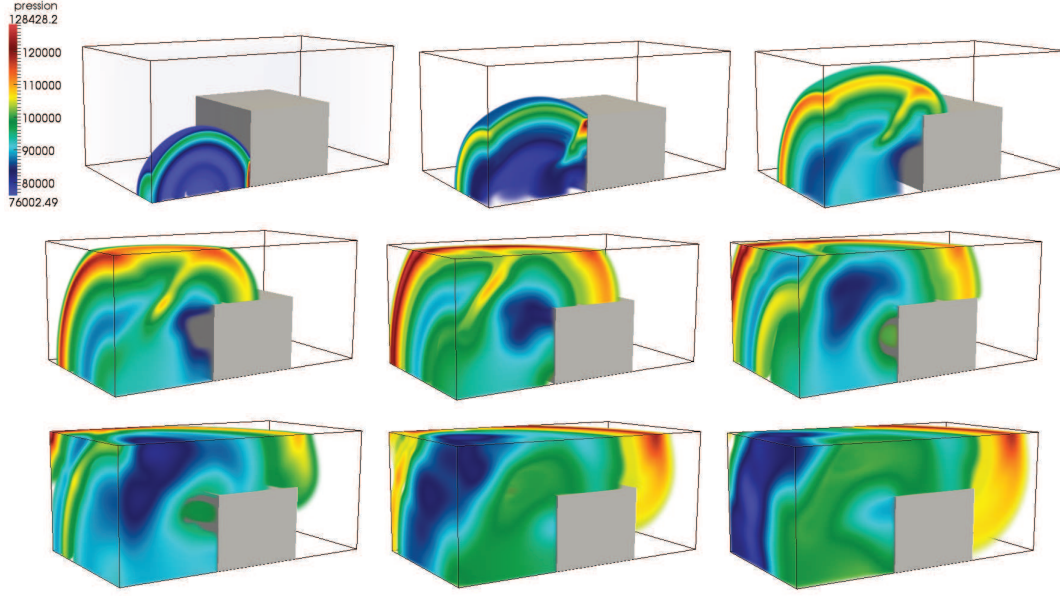


Figure V.6 – Représentation volumique de la pression à différents instants ($0.12ms$, $0.24ms$, $0.36ms$, $0.48ms$, $0.60ms$, $0.72ms$, $0.84ms$, $0.96ms$, $1.08ms$).

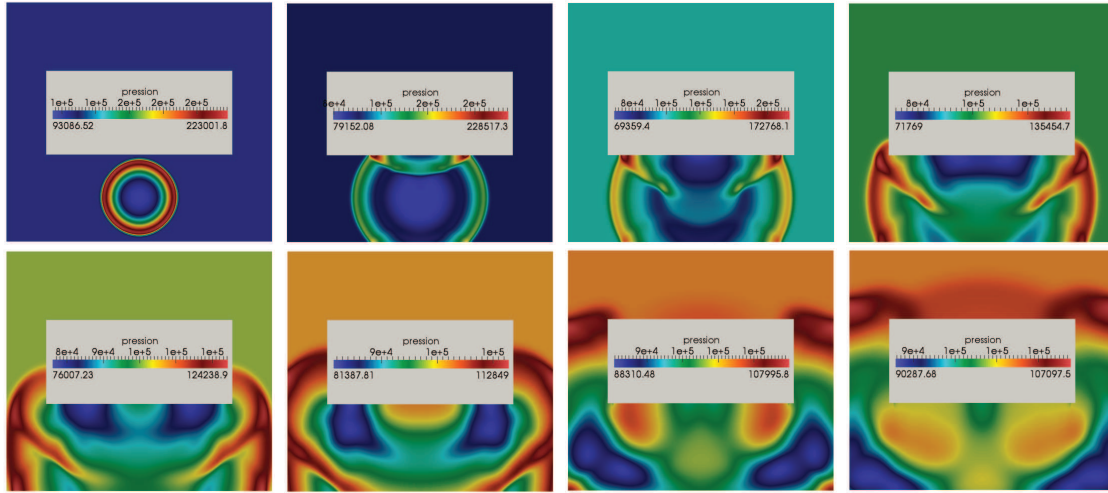


Figure V.7 – Représentation de la pression à différents instants au niveau d'une section normale à l'axe z ($0.12ms$, $0.24ms$, $0.36ms$, $0.48ms$, $0.60ms$, $0.72ms$, $0.96ms$, $1.08ms$).

Configuration 2

Nous étudions maintenant une seconde configuration mettant en jeu une charge plus importante. L'obstacle est déplacé de quelques centimètres. Ainsi :

$$d = 0.16m \quad r_0 = 0.041m$$

V.1. Simulation d'ondes de souffle "Blast wave"

On étudie les signaux de pression au niveau de sept capteurs, dont six localisés sur l'obstacle :

$$F_0, \quad T_0, \quad T_1, \quad T_5, \quad R_0 \quad \text{et} \quad R_1.$$

L'un des capteurs (le capteur (1)) se situe au niveau du sol dans l'axe de la charge, à dix centimètres du centre de celle-ci. La configuration étudiée est schématisée sur la Figure V.8.

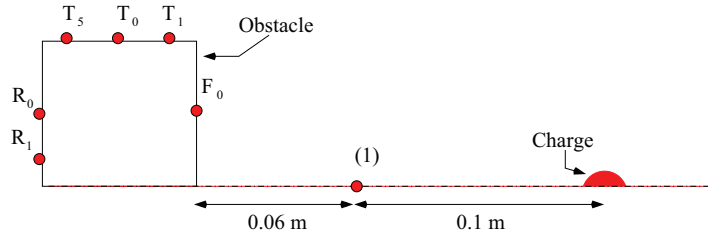


Figure V.8 – Configuration étudiée. Tous les capteurs se situent sur un même plan.

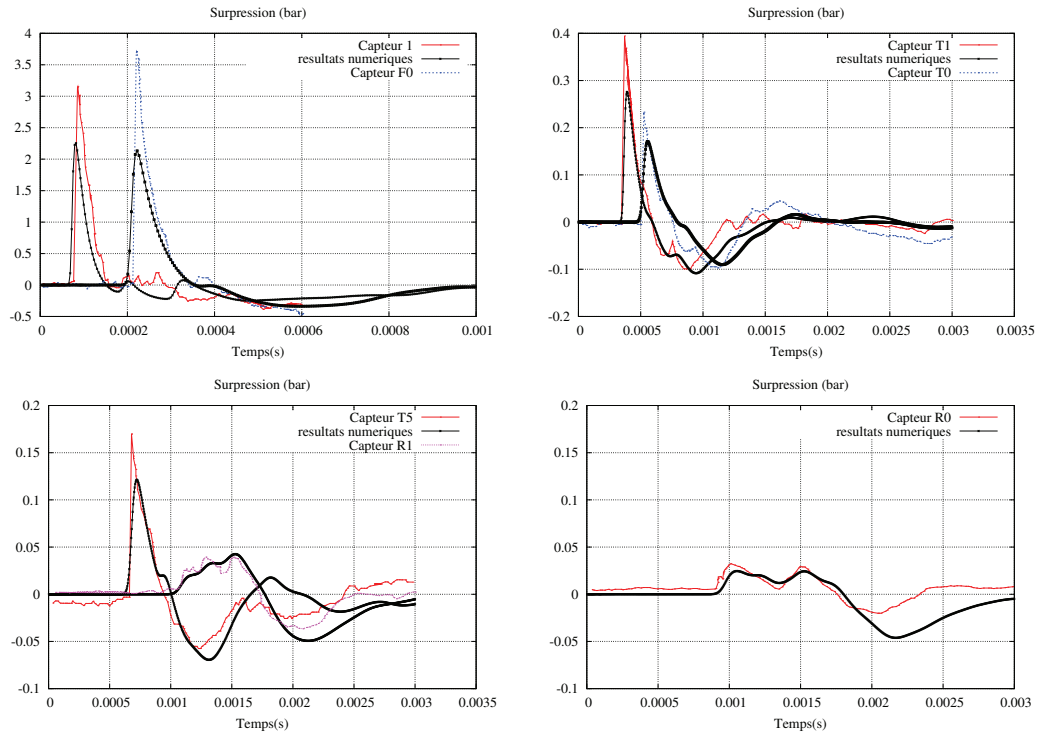


Figure V.9 – Comparaison des signaux obtenus numériquement (symboles) avec les signaux expérimentaux issus de [77].

Les signaux de pression obtenus numériquement sont comparés aux signaux expérimentaux de [77] sur la Figure V.9. Dans cette configuration également, les signaux de pression expérimentaux et numériques présentent un bon accord. Il est utile de préciser que les détonations en phase gazeuse impliquent des phénomènes nettement plus lents que ceux associés à la détonation d'un explosif solide. Ainsi l'hypothèse de l'explosion à volume

constant peut être discutée. Cependant les résultats sont satisfaisants, en particulier la dynamique des ondes est correctement reproduite par les simulations.

V.2 Transport et Diffusion d’Espèces Chimiques

Dans cette section, nous représentons quelques résultats liés au transport et à la diffusion d’espèces chimiques à l’aide du schéma ADER présenté plus tôt dans ce mémoire. Certaines précisions sont à apporter quant à l’utilisation de ce schéma particulier.

V.2.1 De la Bonne Utilisation du Schéma ADER

Le schéma ADER à l’ordre 3 est utilisé pour la résolution des équations régissant l’évolution des fractions massiques des différentes espèces. Ainsi, deux schémas d’intégration sont utilisés en même temps, ce qui peut poser des problèmes. En effet, lorsqu’une discontinuité de fraction massique est présente dans un milieu, elle implique une discontinuité de densité mais également des variables thermodynamiques de mélange. Ces grandeurs sont recalculées à chaque itération et dépendent des fractions massiques des espèces présentes. L’utilisation de deux schémas différents implique deux diffusions numériques distinctes et peut engendrer des oscillations de pression, vitesse et température. Plus les caractéristiques thermodynamiques des espèces diffèrent, plus les oscillations sont importantes. L’erreur commise dépend donc également du saut de fraction massique. Dans le cadre des phénomènes de dispersion dans l’atmosphère, les fractions massiques des polluants sont en général assez faibles, ce qui limite fortement ces oscillations.

Pour illustrer ces propos, étudions le transport unidimensionnel d’une discontinuité de fraction massique à vitesse constante ($u = 10m/s$). Nous utilisons deux espèces chimiques distinctes : de l’air et du dioxyde de carbone dans deux configurations différentes. Sur la Figure V.10, sont représentées les profils obtenus dans le cas du transport d’une interface séparant deux gaz purs. La Figure V.11 montrent une configuration similaire mais impliquant des saut de fractions massiques très faibles au niveau de l’interface.

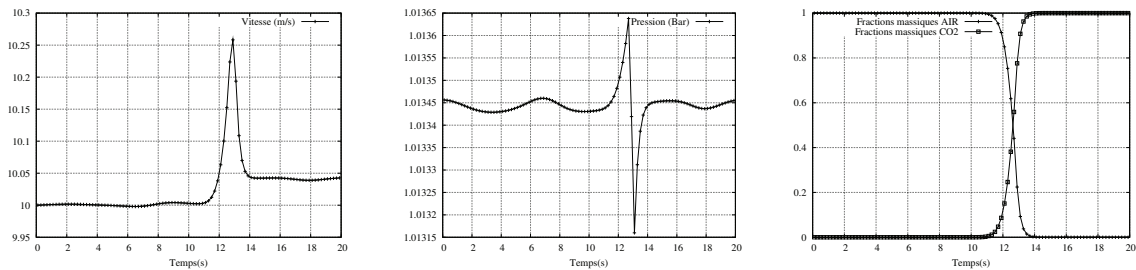


Figure V.10 – Profils de pression, vitesse et fractions massiques dans le cas du transport d’une discontinuité séparant deux gaz purs.

V.2. Transport et Diffusion d'Espèces Chimiques

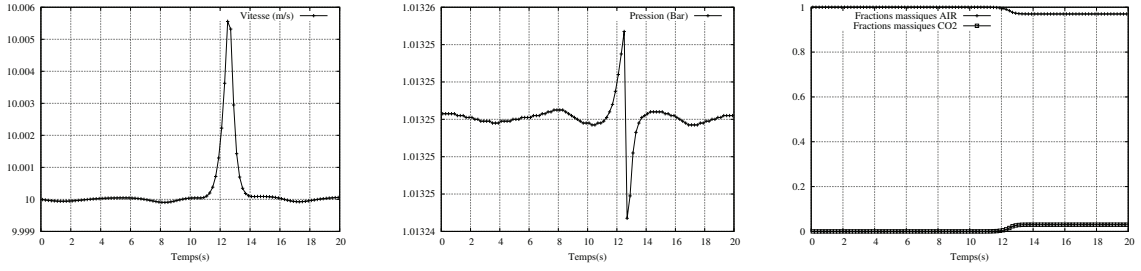


Figure V.11 – Profils de pression, vitesse et fractions massiques dans le cas du transport d'une discontinuité (le saut de fraction massique) est ici très faible).

Lorsque l'on transporte une interface séparant 2 gaz purs (Figure V.10), l'erreur commise est plus importante, ici l'erreur sur la vitesse est de 2.5%, celle sur la pression de 0.04%. Si le saut de fraction massique est faible (Figure V.11), l'erreur commise sur la vitesse est de l'ordre de 0.06%, celle sur la pression étant de l'ordre de 0.002%. Plus la composition des mélanges diffère de part et d'autre de la discontinuité, plus le saut associé aux variables thermodynamiques de mélange est important, ce saut contribuant en grande partie à ces oscillations.

V.2.2 Transport Multidimensionnel d'espèces

Ici nous comparons simplement les résultats issus de simulations effectuées à l'aide d'un schéma à l'ordre un et ceux issus de simulations faites avec le schéma ADER à l'ordre 3. On pourra ainsi apprécier le gain apporté par l'utilisation de ce schéma sur des configurations multi-dimensionnelles.

Considérons premièrement l'écoulement d'un gaz contenant deux espèces, de l'air et de la vapeur d'eau. On place une discontinuité cylindrique de fraction massique et on advecte le gaz diagonalement à vitesse constante (7 m.s^{-1}), comme illustré sur la Figure V.12 à gauche.

$$\begin{aligned} \gamma_{H_2O} &= 1.32 & \text{et} & & C_{v_{H_2O}} &= 1410 \text{ J/kg/K} \\ \gamma_{Air} &= 1.4 & \text{et} & & C_{v_{Air}} &= 719 \text{ J/kg/K} \end{aligned}$$

Sur la Figure V.13, sont comparés les résultats obtenus avec le schéma à l'ordre un et ceux obtenus avec le schéma ADER à l'ordre 3. La même échelle de couleur a été utilisée dans les deux cas. Le schéma ADER préserve les discontinuités de fraction massique, en réduisant considérablement les effets de la diffusion numérique.

On s'intéresse maintenant à un cas similaire de transport simple, à travers un réseau d'obstacles, représenté sur la Figure V.12 à droite. Ce réseau, composé de 20 obstacles est placé sur la trajectoire du nuage. Chacun des obstacles mesure 0.15 m de côté et ils sont séparés de 0.15 m. Un maillage est utilisé pour ce calcul, à savoir des mailles de 0.17 m de côté. L'état du gaz dans le domaine ainsi que sa vitesse sont les mêmes que dans le

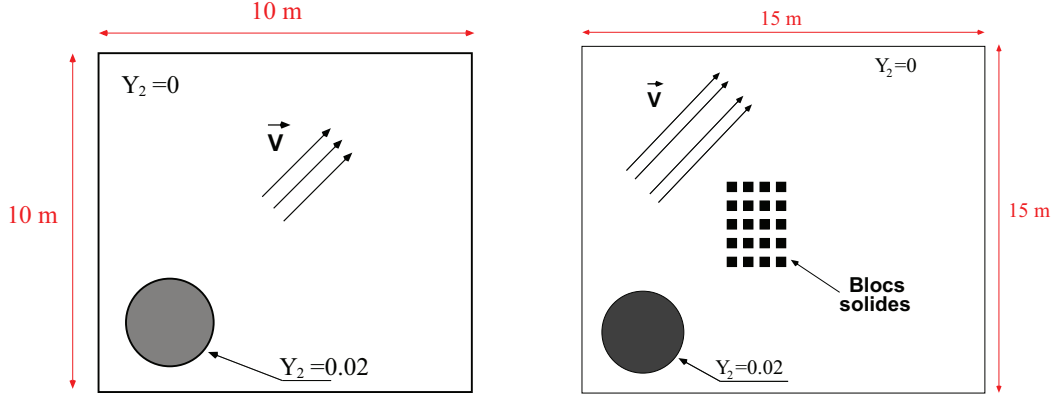


Figure V.12 – Configurations étudiées. A gauche : transport d’un “nuage” à vitesse à constante. A droite : transport d’un “nuage” à vitesse à constante à travers un réseau de solides. Le maillage utilisée comporte 90×90 cellules.

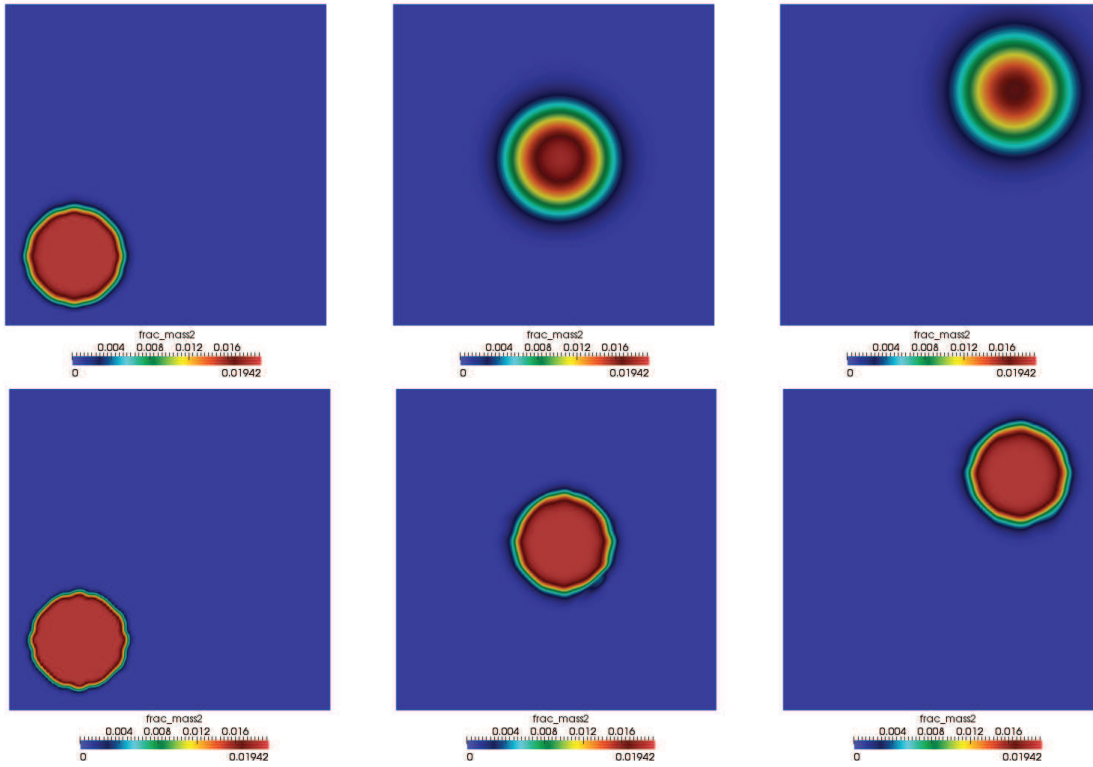


Figure V.13 – En haut, sont représentés les contours de fraction massique de l’espèce 2 calculés avec le schéma à l’ordre 1 à trois instants différents. En bas, le schéma ADER à l’ordre 3 est utilisé. Les courbes sont représentées aux mêmes instants $t_1 = 0.0354s$, $t_2 = 0.53s$ et $t_3 = 1.06s$.

cas précédent. Les obstacles solides sont modélisés par des obstacles internes au mailles de calcul. Les résultats sont reportés sur la Figure V.14 où sont comparés les fractions

V.2. Transport et Diffusion d'Espèces Chimiques

massiques obtenues avec le schéma à l'ordre 1 avec celles obtenues avec le schéma ADER à l'ordre 3.

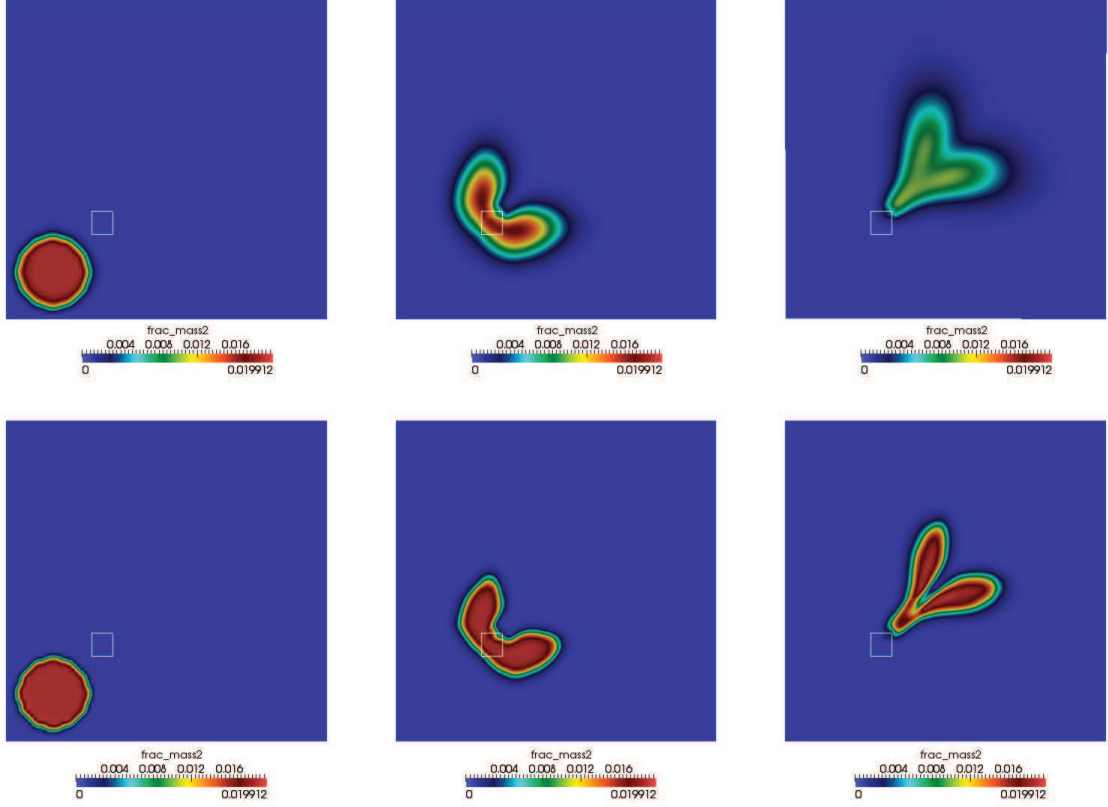


Figure V.14 – En haut, on a représenté la fraction massique de l'espèce 2 calculée avec le schéma à l'ordre un à trois instants différents. En bas, le schéma ADER à l'ordre 3 est utilisé ($t_1 = 0.044s$, $t_2 = 0.65s$ et $t_3 = 1.3s$).

Cette dernière configuration nous permet également d'apprécier l'interaction du nuage avec le réseau d'obstacles. Ceux-ci ne sont pas visibles mais l'on peut deviner leur présence par l'influence qu'ils exercent sur l'écoulement. Dans ce cas également, la diffusion numérique est réduite de manière significative. Ainsi, les simulations impliquant des "interfaces gaz-gaz" seront systématiquement opérées avec le schéma ADER à l'ordre 3.

V.2.3 Eclatement d'un Réservoir en Présence d'Obstacles

Dans les simulations précédentes, les termes de transfert diffusif étaient inactifs. Dans cette section, nous proposons d'étudier l'influence de ces termes dans plusieurs configurations. Le premier cas présenté est celui de l'éclatement d'un réservoir sous pression en présence d'obstacles solides.

Considérons le problème suivant : un réservoir sous pression est positionné aux abords d'un réseau d'obstacles cubiques ordonnés de volume 1 m^3 . Ce réservoir contient un mélange d'air et de vapeur d'eau. Le réservoir éclate à l'instant initial, provoquant une fuite dans le domaine, comme schématisé sur la Figure V.15.

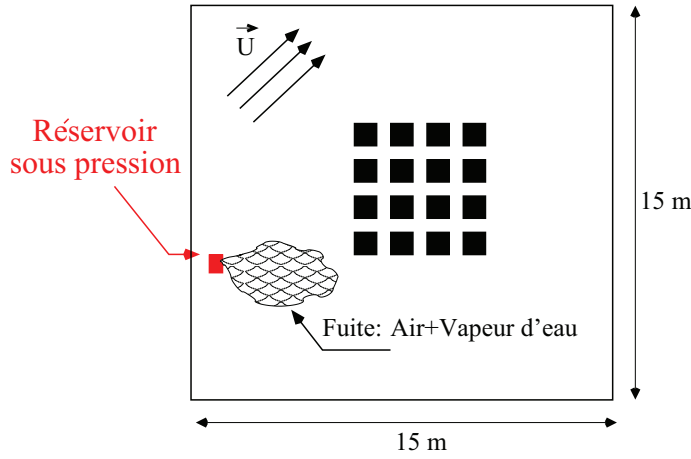


Figure V.15 – Configuration étudiée : éclatement d'un réservoir sous pression en présence d'obstacles. Le maillage utilisé comporte 150×150 cellules

Le réseau de solides est cette fois modélisé par des mailles solides contrairement au cas précédent où l'on utilisait des obstacles internes aux cellules. On utilise des conditions aux limites de type vitesse imposée avec :

$$u_x = 3\text{ m.s}^{-1} \quad \text{et} \quad u_y = 3\text{ m.s}^{-1}$$

Un obstacle solide interne est positionné aux abords du réseau de solides, l'une de ses faces éclate au cours du calcul, on utilise une condition de type réservoir pour modéliser l'éclatement. Les caractéristiques du réservoir sont les suivantes :

$$Y_{vap} = 0.1, \quad Y_{air} = 0.9, \quad P_0 = 1.2\text{ Bar} \quad \text{et} \quad T_0 = 320\text{ K}.$$

Le reste du domaine contient de l'air dans les conditions atmosphériques. Ce calcul est effectué plusieurs fois avec quatre valeurs différentes du coefficient de diffusion. Les résultats sont présentés sur la Figure V.16 où la fraction massique de la vapeur d'eau obtenue avec chacune des valeurs du coefficient de diffusion est représentée (3 secondes après l'éclatement).

V.2. Transport et Diffusion d'Espèces Chimiques

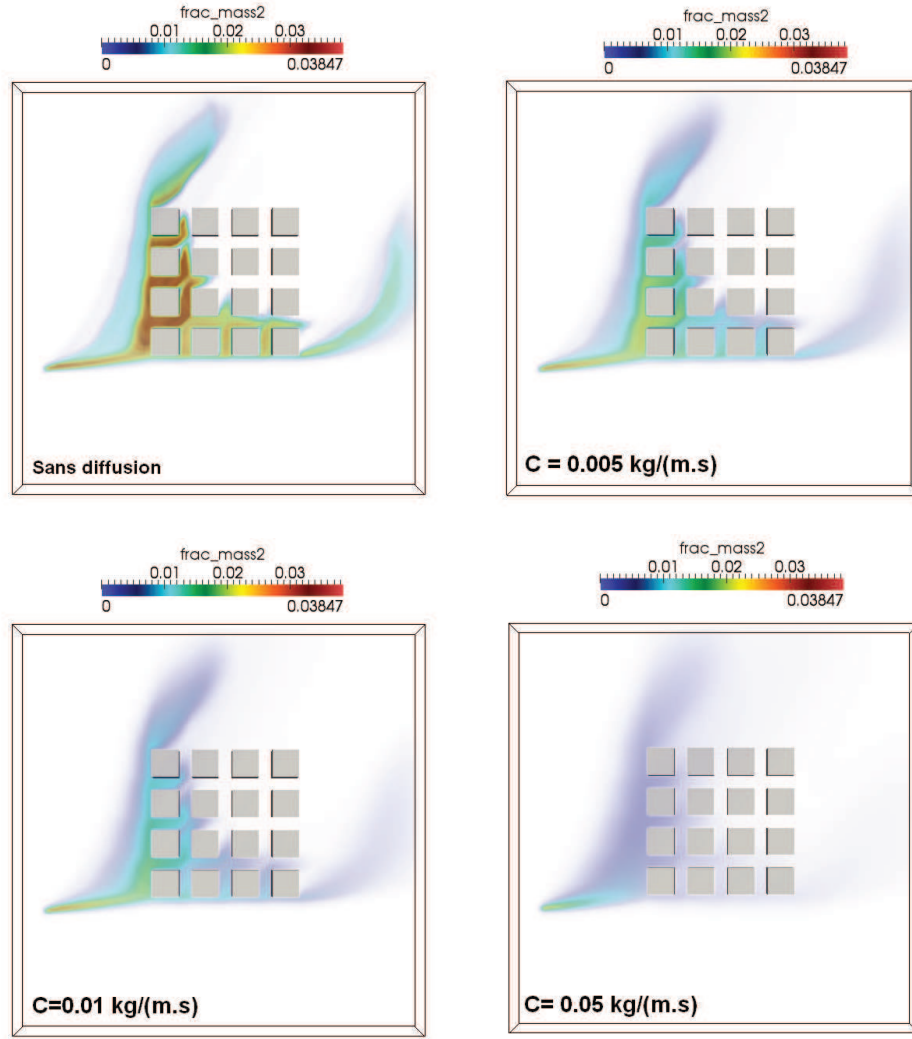


Figure V.16 – Fraction massique de la vapeur d'eau, 3 s après l'éclatement du volume interne. 4 coefficients diffusifs différents ont été utilisés : $C = 0 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, $C = 0.005 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, $C = 0.01 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ et $C = 0.05 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$

Le flux diffusif est nul au niveau des parois solides. On utilise une visualisation en volume pour la fraction massique. L'opacité du signal dépend de la valeur de celui-ci. Ainsi plus la fraction massique est élevée, plus la représentation de celle-ci est opaque. L'échelle employée est commune à tous les résultats de la Figure V.16 et correspond à celle associée au cas où le coefficient de diffusion est nul. Ainsi, nous sommes en mesure de contrôler la diffusion des espèces dans le domaine via le coefficient diffusif C .

Sur la Figure V.17, on représente la fraction massique de la vapeur d'eau obtenue sans diffusion, comparé au cas où $C = 0.05 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$. L'opacité des niveaux les plus faibles a été amplifiée afin d'apprécier correctement l'étalement du nuage formé.

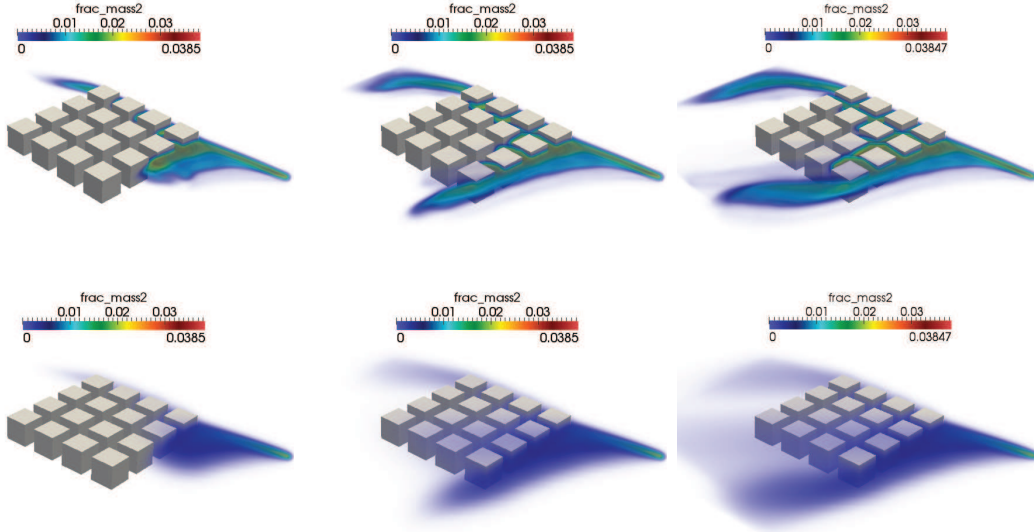


Figure V.17 – Comparaison des champs de fractions massiques de l’espèce 2 (vapeur d’eau) obtenus sans diffusion (en haut) et avec une diffusivité de $0.05 \text{ kg}/(\text{m.s})$ (en bas), à trois instants différents. $t_1 = 1.s$, $t_2 = 2.s$ et $t_3 = 3.s$

• Flux non nul au niveau des parois

On se place dans la configuration précédente, avec un coefficient diffusif non nul ($C = 0.01 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$). Cette fois, le flux diffusif ne s’annule pas au niveau des parois. Nous allons observer les effets liés à l’ajout de ce “dépôt” sur la solution. Dans le cas présent, on impose la fraction massique de l’air égale à 1 au niveau des parois. Sur la Figure V.18, on compare les champs de fractions massiques obtenus avec et sans dépôt.

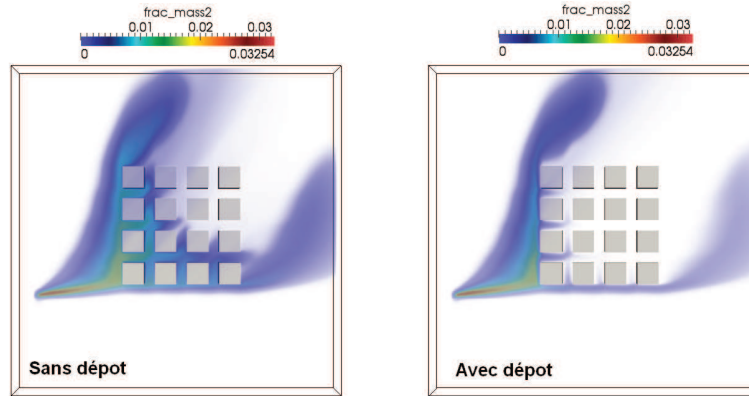


Figure V.18 – Comparaison des champs de fractions massiques de la vapeur d’eau obtenus pour une diffusivité moléculaire de $0.01 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, avec et sans dépôt.

L’utilisation de flux non nuls au niveau des parois nous permet de modéliser un dépôt

V.3. Simulation d'explosion en milieu urbain en présence de particules solides

sur celles-ci. Cependant, il est nécessaire de calibrer les valeurs des fractions massiques que l'on impose au niveau des parois car elles ont une influence directe sur la vitesse de déposition.

V.3 Simulation d'explosion en milieu urbain en présence de particules solides

On se place dans un milieu urbain et l'on y considère une charge de 1000 *kg* de TNT (modélisée par une explosion à volume constant). Nous avons choisi un quartier situé aux abords du quartier de la Défense à Paris (Figure V.19)

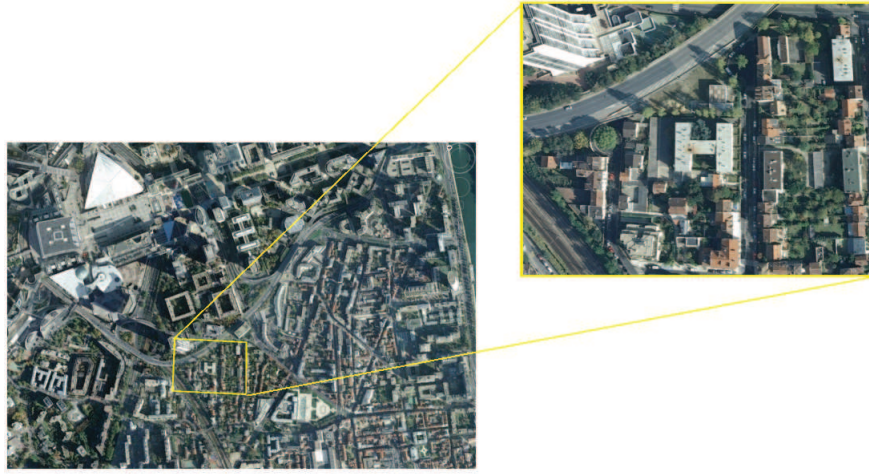


Figure V.19 – Vu satellite de Paris (obtenu via le logiciel “Google-Earth”). Le domaine d'intérêt y est encadré en jaune.

Les buildings sont modélisés par des mailles solides. La charge ne contient que du TNT, on place aux abords de la charge un nuage contenant un mélange d'air et de Chlore. D'autre part, une couche hémisphérique de particules d'aluminium microniques est située autour de la charge. On considère les particules d'aluminium comme des particules inertes. On sait qu'une couche de particules soumise à une forte explosion se déstabilise pour former des jets de tailles bien définies. Le code n'est pas capable à l'heure actuelle de reproduire cette instabilité de jets. Par ailleurs, c'est un modèle d'écoulement dilué qui est implémenté, il n'est donc pas possible de traiter des densités de particules trop élevées. Voilà pourquoi on utilise une calotte sphérique quelque peu éloignée de la charge initiale. La position de celle-ci est visible sur la Figure V.20. Les paramètres thermodynamiques des espèces utilisées sont les suivants :

$$\begin{aligned} \gamma_{Air} &= 1.4 & \text{et} & & C_{v_{Air}} &= 719 \text{ J/kg/K} \\ \gamma_{Cl_2} &= 1.325 & \text{et} & & C_{v_{Cl_2}} &= 360,75 \text{ J/kg/K} \\ \gamma_{TNT} &= 3.007 & \text{et} & & C_{v_{TNT}} &= 820, \text{ J/kg/K} \end{aligned}$$

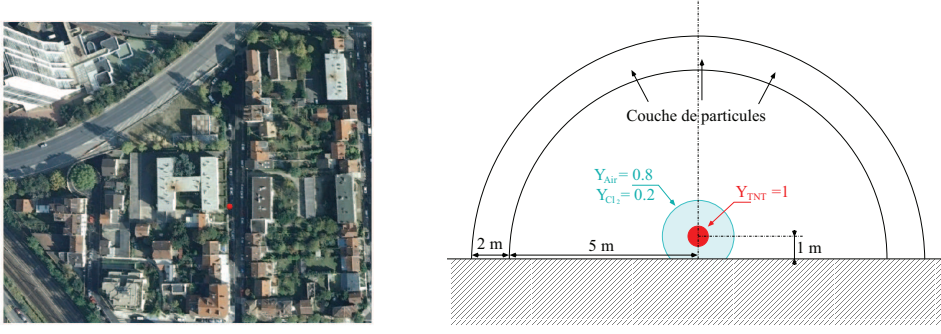


Figure V.20 – La charge est initialement positionnée au niveau de la sphère rouge. Les dimensions du domaines sont $228\text{ m} \times 186\text{ m} \times 100\text{ m}$.

On utilise des billes de $25\text{ }\mu\text{m}$ de rayon, les paramètres utilisés sont :

$$C_p = 900, \text{ J/kg/K}, \quad \rho = 2700\text{ kg/m}^3$$

Au niveau des parois solides, on utilise une condition de glissement pour les particules, ceci reste admissible tant que des particules solides sont utilisées et que leur diamètre est faible. En effet, les particules microniques suivent l'hydrodynamique de la phase porteuse. La densité apparente des particules au sein de la couche est :

$$\rho_p = 1\text{ kg/m}^3 \iff \alpha_p = 3,7 \cdot 10^{-4}$$

où α_p correspond à la fraction volumique occupée par les particules. On utilise des conditions de types météorologiques pour ce calcul. Ainsi, des conditions limites de type vitesse imposée sont utilisées avec un profil de vitesse du vent variant avec l'altitude tel que :

$$u(z) = 2.24 \left(\frac{z}{10} \right)^{0.15} \quad (\text{V.1})$$

Les profils de pression, densité et température varient avec l'altitude. La végétation n'est ici pas prise en compte, cela serai possible à travers l'utilisation de surfaces d'échange nous permettant de modéliser arbres et buissons. Le calcul est effectué sur un maillage comportant 4 240 800 cellules, ce qui correspond à des cellules de 1 m^3 . Les termes de diffusion massique sont actifs mais pas le dépôt sur les surfaces solides, avec :

$$C = 0.1\text{ kg/m/s}$$

V.3.1 Evolution au Temps Court

Nous allons premièrement observer l'évolution du champ de pression, après passage de l'onde de choc incidente, la pression s'atténue rapidement et tend vers la pression atmosphérique. Sur la Figure V.21, est représenté qualitativement le champ de pression via une représentation volumique afin d'apprécier le choc incident. On constate que celui-ci est influencé par les infrastructures présentes. Cependant, plus on monte en altitude,

V.3. Simulation d'explosion en milieu urbain en présence de particules solides

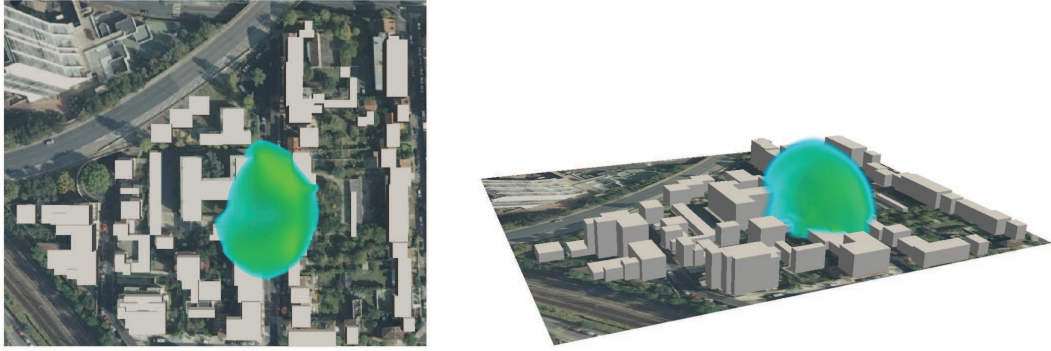


Figure V.21 – Visualisation tridimensionnelle de l'onde de choc à $t = 40 \text{ ms}$ à travers le champ de pression. A gauche on a représenté une vue quasi-isométrique et à droite une vue de dessus.

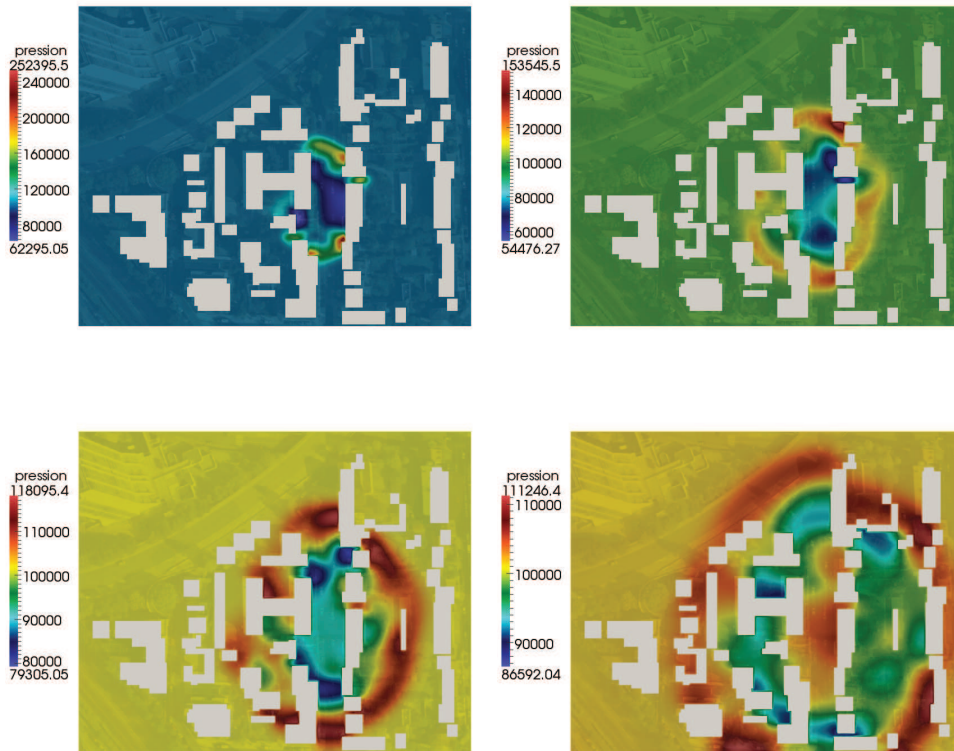


Figure V.22 – Visualisation du champ de pression au niveau d'une section à une altitude de 4 m aux instants de $t_1 = 40 \text{ ms}$, $t_2 = 80 \text{ ms}$, $t_3 = 120 \text{ ms}$ et $t_4 = 200 \text{ ms}$.

moins les effets des obstacles sont importants. Afin d'apprécier correctement l'influence des buildings sur le choc incident, on a tracé sur la Figure V.22 le champs de pression au niveau d'une section proche du sol à différents instants.

V.3.2 Evolution au Temps plus long

Nous allons maintenant examiner l'évolution du nuage de dichlore pendant les 10 premières secondes ainsi que celle du nuage de particules. Sur les Figures V.23 et V.24, nous avons représenté la fraction massique du dichlore sous deux points de vue différents. Après l'explosion, la mise en mouvement du gaz s'atténue assez rapidement et le champ de pression revient rapidement à des niveaux acceptables. Après avoir subi les multiples réflexions d'ondes dues à la présence de nombreuses infrastructures, le nuage toxique est advecté par le vent.

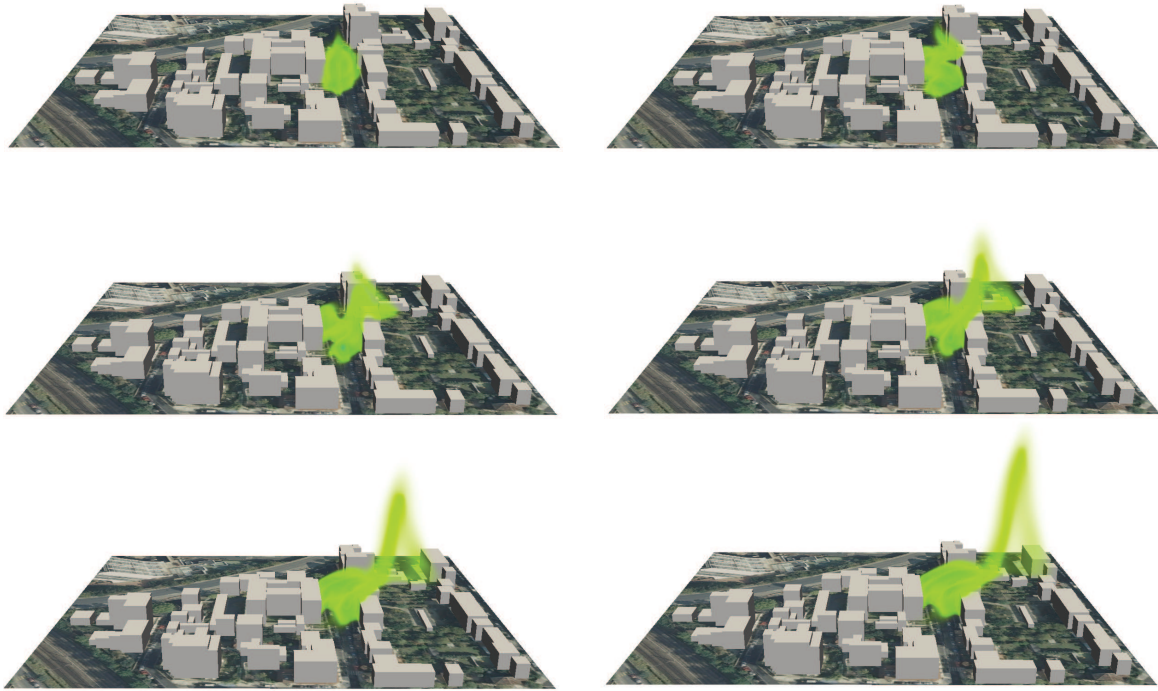


Figure V.23 – Représentation volumique du nuage de dichlore à différents instants : $t_1 = 0.04$ s, $t_2 = 0.54$ s, $t_3 = 3.24$ s, $t_4 = 5.94$ s, $t_5 = 8.64$ s et $t_6 = 10.8$ s.

La charge étant quelque peu confinée par les infrastructures, l'explosion induit un jet de gaz en altitude dont la vitesse décroît rapidement. Ce mouvement entraîne le nuage de dichlore dont une partie monte au delà de 60 mètres. On constate que les niveaux de fractions massiques du dichlore sont assez faibles en altitude. Celui-ci étant un gaz dense, la majeure partie du nuage toxique reste localisée près du sol.

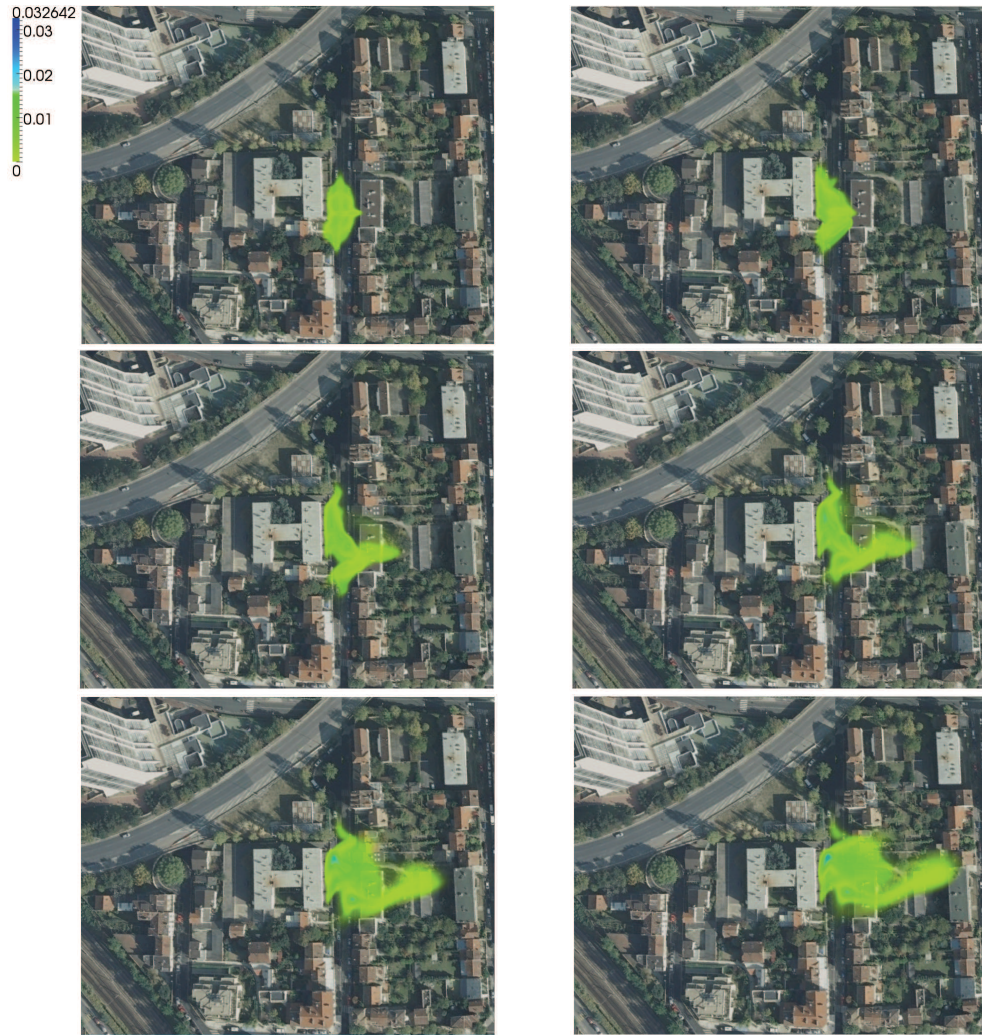


Figure V.24 – Représentation volumique du nuage de dichlore à différents instants : $t_1 = 0.04 \text{ s}$, $t_2 = 0.54 \text{ s}$, $t_3 = 3.24 \text{ s}$, $t_4 = 5.94 \text{ s}$, $t_5 = 8.64 \text{ s}$ et $t_6 = 10.8 \text{ s}$ en vue de dessus.

Nous allons maintenant observer l'évolution du nuage de particules. Sur les Figures V.25 et V.26 est représentée la densité apparente des particules d'aluminium à différents instants et sous deux points de vue différents.

Le nuage de particules se disperse rapidement dans l'air, et retombe ensuite sous l'effet de la gravité. Après 1.62 s , la majeure partie des particules sont retombées au sol et le nuage en altitude ne contient que des traces de ces particules (la densité apparente y est proche de zéro). Par ailleurs, les zones de densité apparente importante se situent au niveau des parois solides proches du centre de l'explosion.

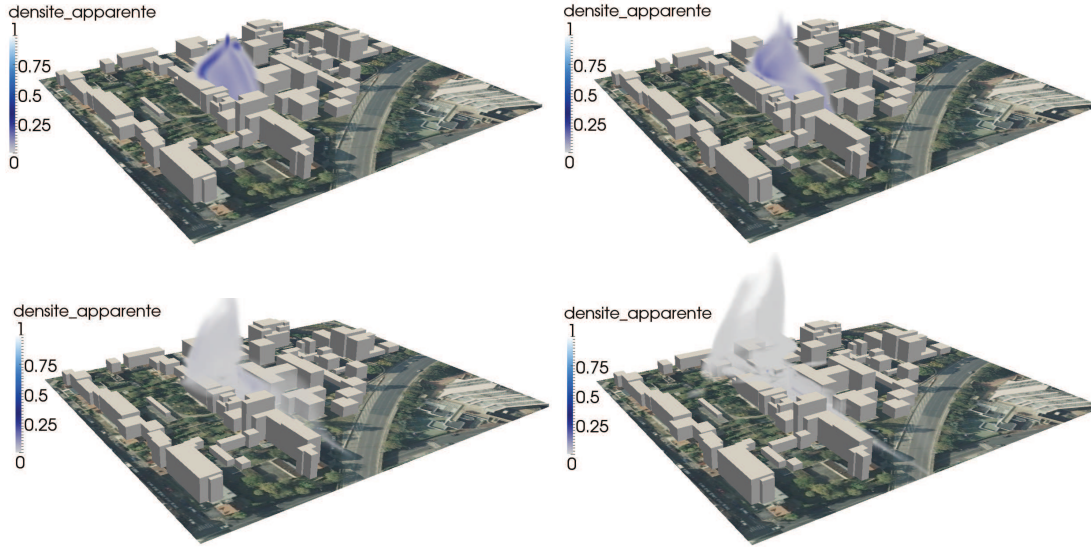


Figure V.25 – Représentation volumique du nuage de particules à différents instants : $t_1 = 0.04 \text{ s}$, $t_2 = 0.54 \text{ s}$, $t_3 = 1.62 \text{ s}$ et $t_4 = 3.24 \text{ s}$.

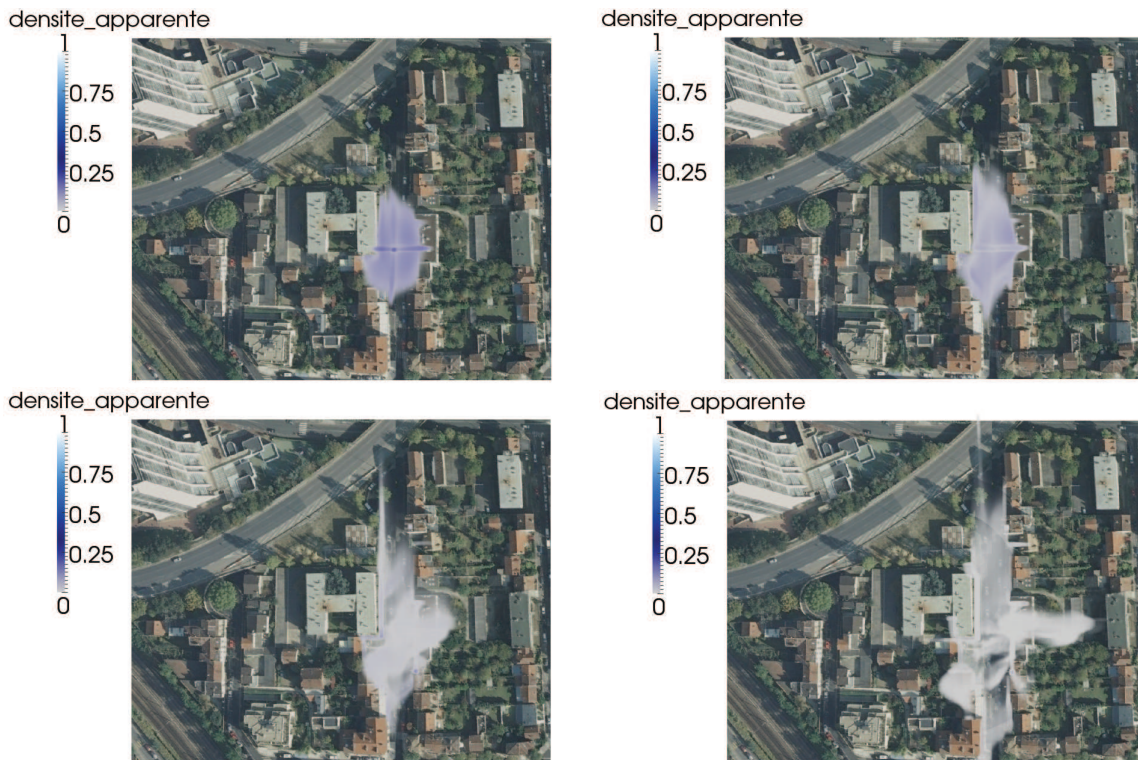


Figure V.26 – Représentation volumique du nuage de particules en vue de dessus à différents instants : $t_1 = 0.04 \text{ s}$, $t_2 = 0.54 \text{ s}$, $t_3 = 1.62 \text{ s}$ et $t_4 = 3.24 \text{ s}$.

V.4 Dispersion à Très Grande Echelle

Nous étudions maintenant la dispersion d'un nuage de polluant issu de l'éclatement d'un réservoir. Des données numériques d'élévation sont utilisés pour modéliser le relief

V.4. Dispersion à Très Grande Echelle

du terrain. On a choisi pour ce calcul une partie de l'île d'Umnak (Alaska USA), la zone d'intérêt est représentée sur la Figure V.27.

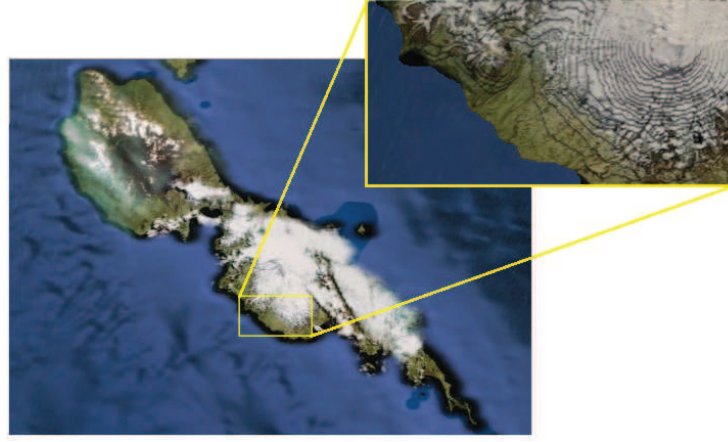


Figure V.27 – Vue satellite de l'île d'Umnak. La zone d'intérêt y est encadrée en jaune.

On utilise des conditions limites météo pour ce calcul, incluant un profil de vent logarithmique de faible amplitude, l'atmosphère est stratifiée sous l'effet de la gravité. Un obstacle interne à une cellule de calcul est présent dans le domaine, sa position est visible sur la Figure V.28. L'une des faces de l'obstacle est perméable et débite un mélange d'air et de dioxyde de carbone pendant plusieurs minutes.

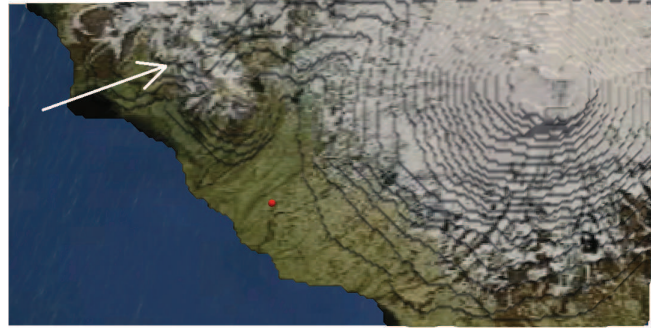


Figure V.28 – Les dimensions du domaine sont : 16 km de long, 8 km de large et 4 km de hauteur. La sphère rouge indique la position de l'obstacle. La flèche blanche indique la direction du vent.

Les caractéristiques thermodynamiques des gaz utilisés pour ce calcul sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \gamma_{Air} &= 1.4 \quad \text{et} \quad C_{v_{Air}} = 719 \, J/kg/K \\ \gamma_{CO_2} &= 1.2937 \quad \text{et} \quad C_{v_{CO_2}} = 657, \, J/kg/K \end{aligned}$$

Le calcul est effectué sur 1 000 000 de mailles. La fuite de gaz est issue d'un réservoir

de 40 m^3 , celui-ci éclate à $t = 0$ et débite alors le mélange gazeux pendant 200s. Les caractéristiques du réservoir sont les suivantes :

$$\begin{aligned} Y_{Air} &= 0.98 \quad \text{et} \quad Y_{CO_2} = 0.02 \\ P_0 &= 150 \text{ Bar}, \quad T_0 = 600K \end{aligned}$$

Les termes de diffusion massiques sont activées pour ce calcul ($C = 0.2 \text{ kg/m/s}$). Sur les Figures V.29 et V.30, on a représenté les champs de densité, de pression et de vitesse à l'état initial, afin d'apprécier la stratification de l'atmosphère.

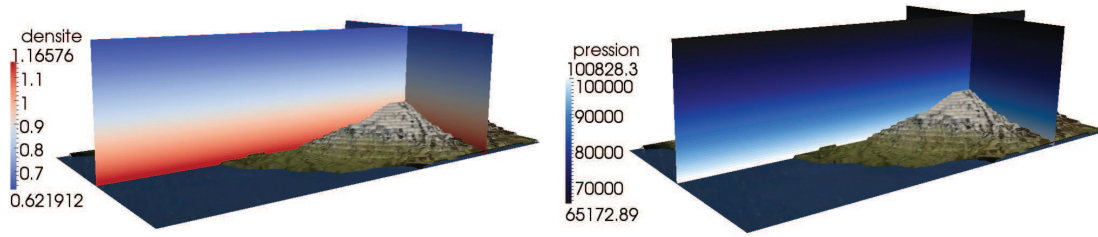


Figure V.29 – Champs de densité et de pression à $t = 0 \text{ s}$

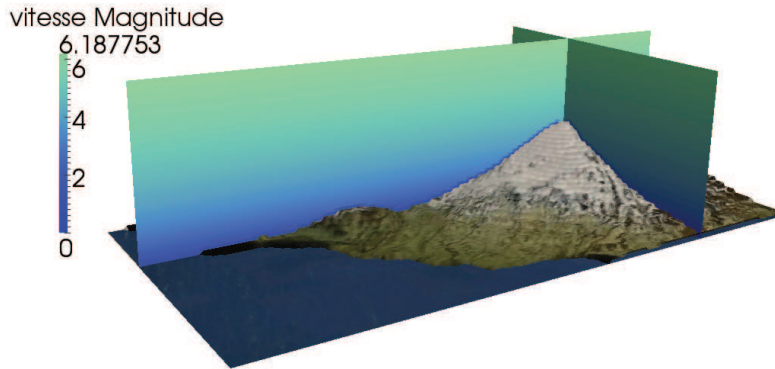


Figure V.30 – Norme du champ de vitesse à $t = 0 \text{ s}$

Nous allons maintenant observer le devenir du nuage gazeux résultant de l'éclatement du réservoir. Sur la Figure V.31, on peut voir la fraction massique du dioxyde de carbone à plusieurs instants. A partir de la troisième figure (au milieu à gauche), le réservoir ne débite plus et se comporte alors comme un obstacle solide ordinaire. Le nuage est ensuite transporté par le vent. On peut apprécier le cisaillement du vent à travers l'évolution du nuage. La Figure V.32 représente la fraction massique du dioxyde de carbone aux mêmes instants, mais cette fois en vue de dessus.

V.4. Dispersion à Très Grande Echelle

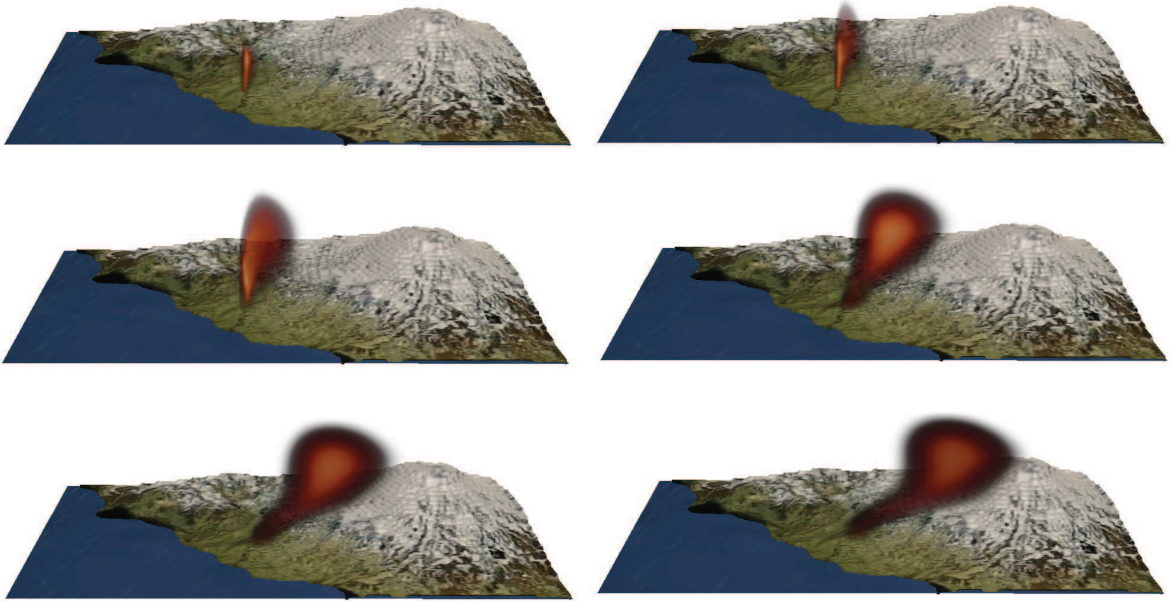


Figure V.31 – Nuage de polluant à plusieurs instants : $t_1 = 40 \text{ s}$, $t_2 = 100 \text{ s}$, $t_3 = 220 \text{ s}$, $t_4 = 420 \text{ s}$, $t_5 = 620 \text{ s}$ et $t_6 = 800 \text{ s}$.

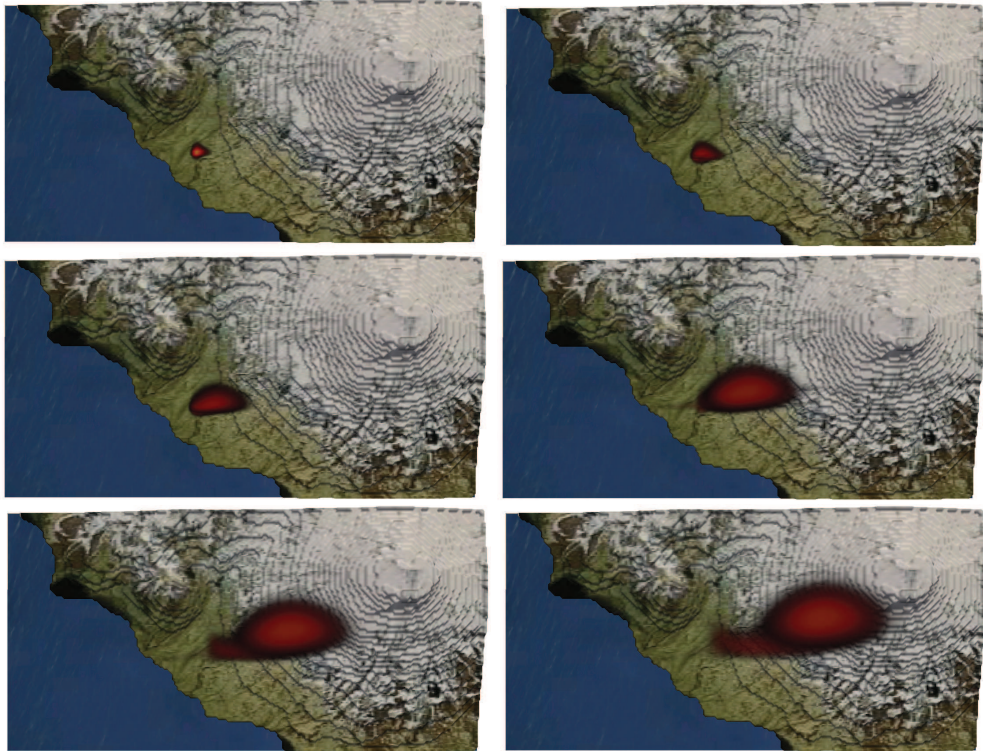


Figure V.32 – Nuage de polluant à plusieurs instants en vue de dessus : $t_1 = 40 \text{ s}$, $t_2 = 100 \text{ s}$, $t_3 = 220 \text{ s}$, $t_4 = 420 \text{ s}$, $t_5 = 620 \text{ s}$ et $t_6 = 800 \text{ s}$.

Chapitre VI

Sur la Formation de Jets de Particules

Les explosions mettant en jeu des couches de particules, sont caractérisées par la formation de jets dont la taille et le nombre sont parfaitement observables. Un phénomène similaire est observé pour une explosion entourée d'une couche fluide, celui-ci se fragmentant très rapidement sous l'effet de l'explosion. Quel que soit l'état de surface de la couche, des jets à peu près semblables sont observés. L'origine de cette instabilité est à ce jour inconnue.

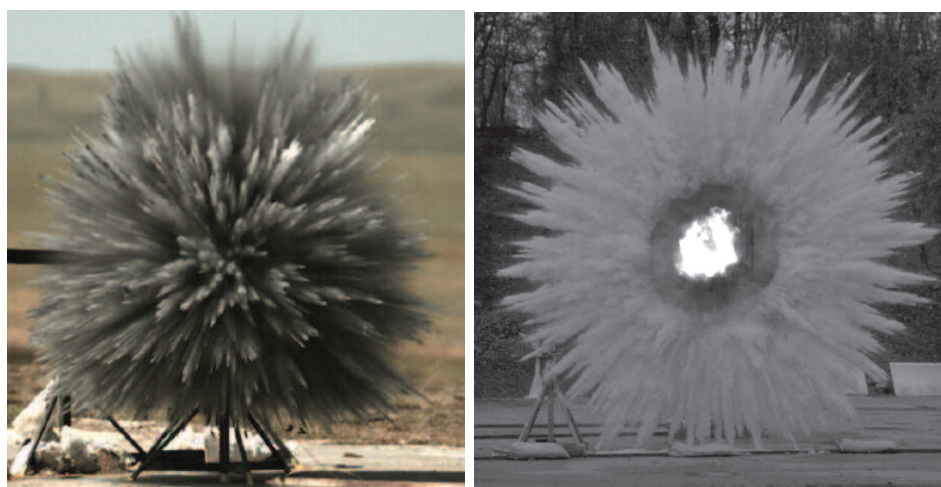


Figure VI.1 – A gauche : dispersion de particules d'acier lors d'une explosion [25]. A droite : explosion confinée afin de se ramener à une géométrie cylindrique.

Ces jets jouent un rôle important dans la dispersion d'un nuage de particules résultant d'une explosion. C'est pourquoi nous souhaitons apporter un critère de sélection permettant de prédire le nombre de jets se formant effectivement. Ceci afin de déterminer des conditions initiales appropriées pour nos simulations. Pour comprendre ce phénomène, des études numériques ont été conduites. Ces études sont détaillées dans [67]. Des travaux

expérimentaux ont été initiés quasiment en parallèle et se poursuivent dans le cadre de la thèse de Vincent Rodriguez (équipe DTF, laboratoire IUSTI).

VI.1 Difficultés des Simulations Multi-Dimensionnelles

Les simulations multi-dimensionnelles induisent des instabilités purement numériques posant problème pour l'étude et la compréhension de l'instabilité. La rugosité du maillage implique la formation de structures (instabilité de Richtmyer-Meshkov), mais ses structures sont créées artificiellement et dépendent du maillage utilisé. Pour illustrer ces propos, nous présentons des simulations en gaz purs. Pour cela, les équations d'Euler bidimensionnelles sont résolues. En raison de la viscosité numérique qui tend à gommer les structures formées lors du calcul, un schéma numérique à l'ordre 2 de type MUSCL avec limiteur de pente est utilisé.

Les schémas numériques d'ordre élevés de type MUSCL nécessitent l'utilisation d'un limiteur de pente pour éviter les oscillations parasites apparaissant lors de la propagation de discontinuités. Ces limiteurs peuvent être plus ou moins "raide" et ont une influence sur la solution obtenue. Considérons une explosion dans une configuration cylindrique (Figure VI.2). Aucune perturbation n'est introduite autre que celles induites par la rugosité liée à l'utilisation du maillage cartésien.

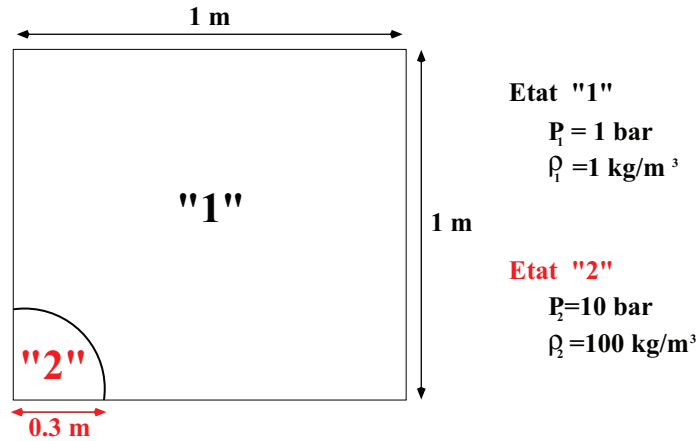


Figure VI.2 – Schématisation d'une explosion cylindrique

L'utilisation de formes arrondies sur un maillage cartésien introduit une certaine rugosité responsable de l'apparition d'une instabilité de type Richtmyer-Meshkov. Nous allons comparer les solutions obtenues en utilisant différents limiteurs de pente afin d'en noter l'influence. Nous utilisons successivement 5 limiteurs de pente pour ce test, **Minmod**, **Van Leer**, **Superbee**, **Van albeda** et **VMC**. Les caractéristiques de ces limiteurs sont détaillés dans [74]. Les résultats sont comparés sur la Figure VI.3.

VI.1. Difficultés des Simulations Multi-Dimensionnelles

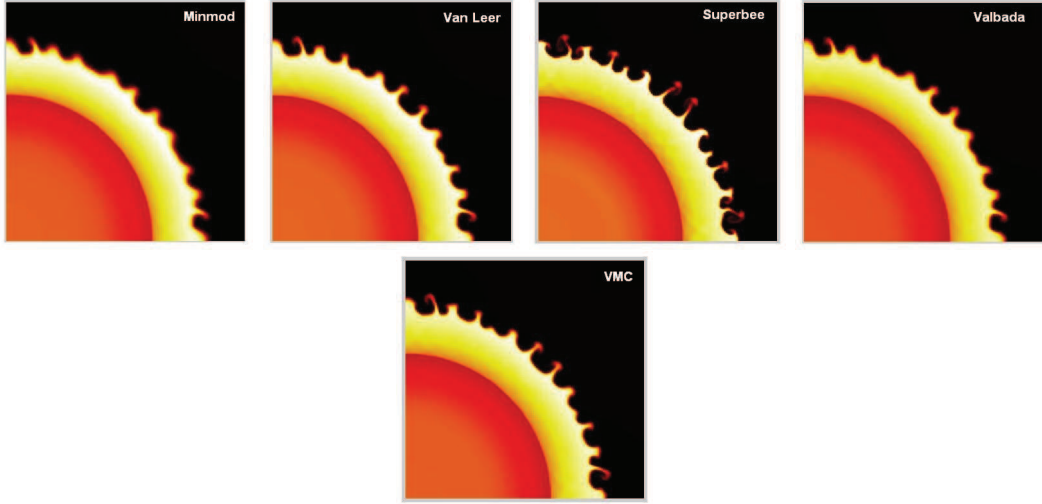


Figure VI.3 – Comparaison des champs de densité obtenus au même instant en utilisant différents limiteurs de pente.

Sur la Figure VI.3, on observe un nombre de structures allant de 12 à 14. Plus le limiteur atténue la viscosité numérique, plus le nombre de structures formées est important. Ainsi, la viscosité numérique du schéma influence directement la sélection d'une longueur d'onde.

On se place maintenant sur un maillage donné avec un limiteur de pente donné et l'on fait varier la rayon initial de la charge. Deux simulations sont effectuées pour deux rayons de charges différentes ($r = r_0 = 0.3m$ et $r = 2r_0 = 0.6m$). Dans les deux cas, on peut évaluer la longueur d'onde associée aux structures formées. Les résultats sont visibles sur les Figures VI.4 et VI.5.

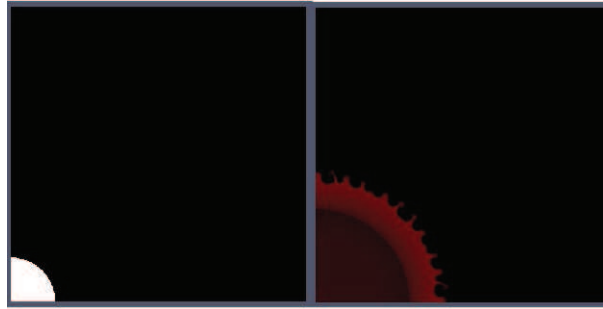


Figure VI.4 – Densité du gaz à l'instant initial et peu après l'explosion dans le cas $r = r_0$: 12 structures formées, ce qui correspond à une longueur d'onde $\lambda_1 = 0.039m$

Les longueurs d'onde obtenues sont très proches, $\lambda_1 = \lambda_2 \approx 0.04m$. On peut donc penser légitimement que la rugosité du maillage est responsable de la sélection opérée. Finalement, la rugosité numérique de l'interface initiale ainsi que la viscosité numérique du schéma influencent directement la sélection d'une longueur d'onde. Ceci illustre les diffi-

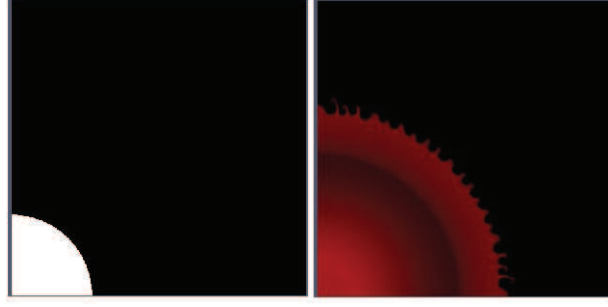


Figure VI.5 – Densité du gaz à l’instant initiale et peu après l’explosion dans le cas $r = 2r_0$: 19 structures formées, ce qui correspond à une longueur d’onde $\lambda_2 = 0.04m$

cultés numériques associées à ce type de simulations. Le phénomène numérique entrant en jeu ici peut être compris à partir de l’équation d’évolution de la vorticit   not  e ω . On obtient cette   quation en prenant le rotationnel de l’  quation d’  volution de la quantit   de mouvement :

$$\begin{aligned} \nabla \wedge \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{\nabla P}{\rho} \right) &= 0 \\ \frac{\partial \nabla \wedge \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \wedge (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) + \nabla \wedge \left(\frac{\nabla P}{\rho} \right) &= 0 \end{aligned}$$

Or, la vorticit   ω correspond au rotationnel du vecteur vitesse $\mathbf{u}$:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \nabla \wedge (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) = \frac{1}{\rho^2} \nabla \rho \wedge \nabla P. \quad (\text{VI.1})$$

L’  quation (VI.1) correspond    l’  quation d’  volution de la vorticit  , dont la production se traduit par le membre de droite. Le gradient de pression se propage suivant la normale    l’interface. Le gradient de densit   est perpendiculaire aux lignes de maillage. L’interface suivant initialement une repr  sentation en “escalier”, le gradient de densit   est soit align   avec l’axe des abscisses soit avec l’axe des ordonn  es (Figure VI.6).

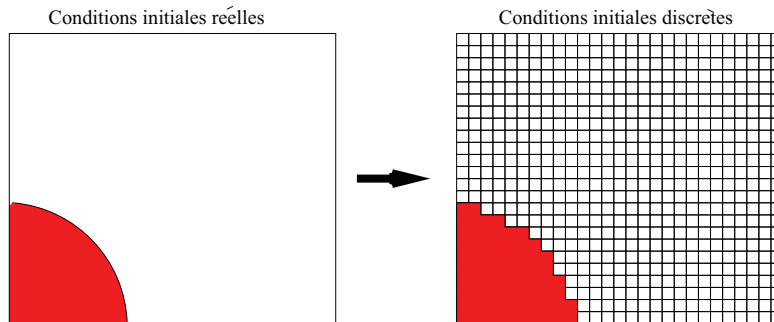


Figure VI.6 – Repr  sentation des conditions initiales discr  tes : “en escalier”.

Dans tous les cas, le produit $\nabla \rho \wedge \nabla P$ n’est pas nul et conduit    l’apparition de jets. Certains jets sont gomm  s par la diffusion num  rique, d’autres s’apparient pour former

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

un jet plus important.

En regard des problèmes causés par les simulations multi-dimensionnelles sur des maillages cartésiens structurés, nous avons choisi de procéder à une étude préliminaire et analytique du problème. Dans la suite de ce chapitre, nous étudions la stabilité d'une couche de fluide soumise à une accélération dans des configurations basiques d'écoulement. Nous traitons en détail le cas de la géométrie cylindrique puis des résultats sphériques seront présentés. Les détails des calculs associés à la configuration sphériques sont présentés dans l'Annexe B.

VI.2 Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

La stabilité d'un anneau de fluide soumis à un gradient de pression a été étudiée dans [42] et [41]. Ils ont prouvé que les oscillations d'un cylindre de liquide creux rempli par un gaz sont linéairement instables. La solution du problème linéaire est obtenue en utilisant une méthode de séparation des variables. L'amplitude de la solution dépend du temps et du nombre d'onde (caractérisant le nombre de jets ou "fingers" initialement présents à la surface libre). L'étude de la solution de ce problème est importante. En effet, si nous arrivons à observer un comportement particulier de la solution pour un nombre d'onde spécifique, nous pourrions alors conclure que ce nombre d'onde correspond à une longueur d'onde privilégiée, c'est à dire à une taille de jet de particules privilégiée.

VI.2.1 Solution de référence

Dans cette section, nous établissons les équations pour un cylindre de fluide creux oscillant. Considérons un fluide incompressible dans un anneau de rayon intérieur $R_1(t)$ et de rayon extérieur $R_2(t)$ (Figure VI.7).

La conservation de la masse implique,

$$R_2^2 - R_1^2 = R_{20}^2 - R_{10}^2 = L^2 = \text{constante} \quad (\text{VI.2})$$

où l'indice "0" correspond à la configuration initiale. Soit $P(t, r)$ la pression du fluide. La pression à l'extérieur de l'anneau est la pression atmosphérique :

$$P|_{r=R_2} = P_a = \text{constante} \quad (\text{VI.3})$$

A l'intérieur de l'anneau, la pression suit la loi des gaz polytropiques :

$$P|_{r=R_1} = P_0 \left(\frac{R_{10}^2}{R_1^2} \right)^\gamma \quad (\text{VI.4})$$

où γ est le coefficient polytropique du gaz et P_0 , la pression au sein de la charge. On suppose l'écoulement irrotationnel. Il est donc possible d'exprimer un potentiel Φ satisfaisant

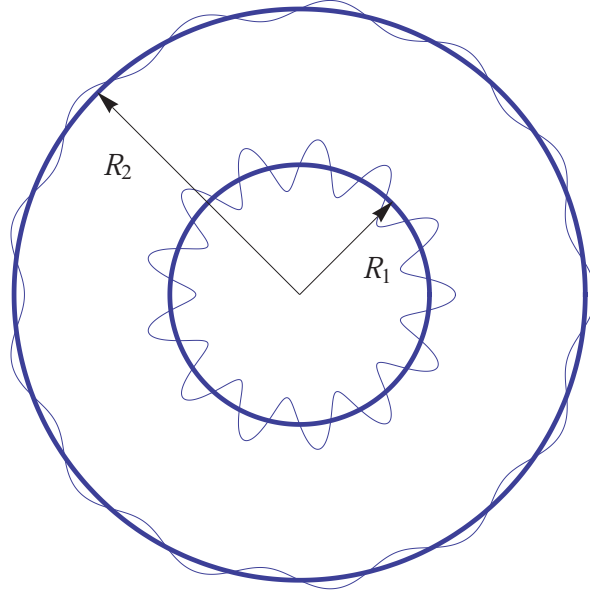


Figure VI.7 – Représentation d'un anneau de rayon interne $R_1(t)$ et externe $R_2(t)$. $R_1(t)$ et $R_2(t)$ sont soumis à des perturbations sinusoïdales qui font l'objet de notre étude.

l'équation de Laplace dans le domaine $R_1 < r < R_2$, $0 < \theta < 2\pi$:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Phi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} = 0$$

Ce potentiel satisfait les conditions dynamiques pour la pression (relations (VI.3) et (VI.4)) et les conditions cinématiques (la vitesse du fluide étant égale à la vitesse des interfaces). Ce potentiel s'écrit sous la forme :

$$\Phi(r, t) = \frac{dR_1}{dt} R_1 \ln r = \frac{dR_2}{dt} R_2 \ln r$$

Car la conservation de la masse implique :

$$\frac{dR_1}{dt} R_1 = \frac{dR_2}{dt} R_2$$

L'intégrale de Bernoulli s'écrit :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 + \frac{P}{\rho} = f(t) \quad (\text{VI.5})$$

Cette égalité représente l'intégrale première de l'équation d'évolution du potentiel des vitesses. Elle nous permet de relier les variables d'écoulement en $r = R_1(t)$ et $r = R_2(t)$:

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 + \frac{P}{\rho} \right|_{r=R_1} = \left. \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 + \frac{P}{\rho} \right|_{r=R_2}$$

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

En injectant l'expression du potentiel Φ et des pressions au niveau des interfaces, nous obtenons l'équation d'évolution d'une bulle cylindrique :

$$\frac{d^2 R_1}{dt^2} R_1 \ln \frac{R_1}{R_2} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \left(\ln \frac{R_1}{R_2} + \frac{1}{2} \left(1 - \left(\frac{R_1}{R_2} \right)^2 \right) \right) + \frac{P_0 \left(\frac{R_{10}^2}{R_1^2} \right)^\gamma - P_a}{\rho} = 0 \quad (\text{VI.6})$$

L'équation (VI.6) nous permet d'obtenir l'évolution de $R_1(t)$. La conservation de la masse nous permet ensuite d'exprimer celle de $R_2(t)$. Elle vérifie la conservation de l'énergie et admet des solutions oscillantes. Sur la Figure VI.8, nous avons tracé les solutions de référence obtenues pour deux rapports de pressions différents. On note que l'amplitude des oscillations est déterminée par le rapport de pressions tandis que la période dépend essentiellement de la masse de la couche. Nous pouvons voir que l'épaisseur de la couche évolue au cours du temps. En particulier, dans le cas d'un rapport de pression égal à 10^5 , l'épaisseur adimensionnée atteint une valeur de 10^{-3} . Dans ce cas, les rayons interne et externe sont quasiment confondus.

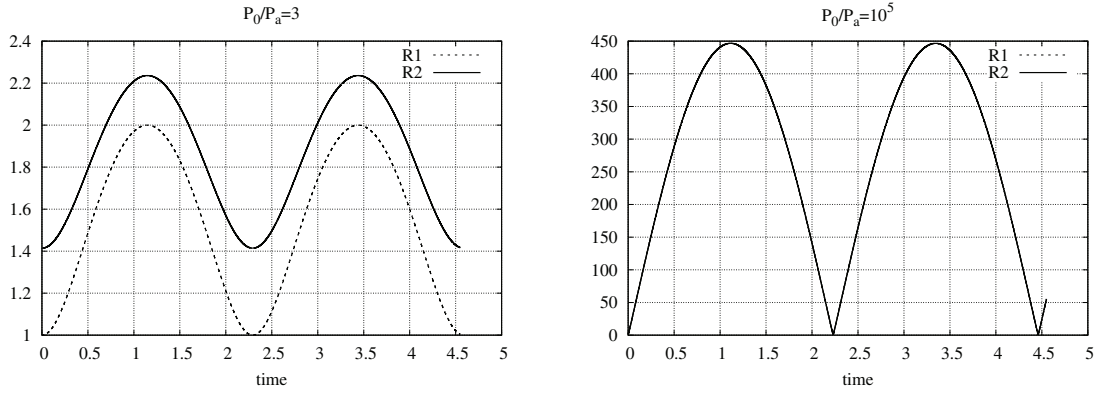


Figure VI.8 – Représentation de la solution de référence pour deux rapports de pressions différents : à gauche $P_0/P_a = 3$, à droite, $P_0/P_a = 10^5$. La solution est tracée sur deux périodes d'oscillation.

Nous allons maintenant introduire des perturbations dans le système d'équation. Exprimerons premièrement la solution perturbée correspondant à la somme de la solution de référence plus une petite perturbation en coordonnées polaires.

$$\tilde{\varphi} = \Phi(r, t) + \varphi'(r, \theta, t), \quad \tilde{P} = P(r, t) + P'(r, \theta, t), \quad \tilde{R}_i(r, \theta, t) = R_i(t) + R'_i(r, \theta, t).$$

On peut maintenant réécrire les équations en terme de variables perturbées. Pour cela nous devons linéariser les équations autour de la solution de référence

VI.2.2 Linéarisation des Equations

Nous souhaitons linéariser les équations autour de la solution de référence (Φ, P, R_1, R_2) déterminée dans la section précédente. L'intégrale de Bernoulli au niveau des limites per-

turbées $\tilde{R}_i$ s'écrit :

$$\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \theta} \right)^2 \right) \Big|_{r=\tilde{R}_i} = - \frac{\tilde{P}}{\rho} \Big|_{r=\tilde{R}_i} + f(t)$$

La linéarisation de l'intégrale de Bernoulli sur la surface extérieure $r = R_2(\theta, t)$ induit la relation :

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) R_2' \Big|_{r=R_2} = 0 \quad (\text{VI.7})$$

Dans l'approximation linéaire, cette relation doit être considérée sur la frontière non perturbée $r = R_2$. Considérons maintenant la frontière interne $r = \tilde{R}_1(\theta, t)$. On a :

$$\tilde{P} \Big|_{r=\tilde{R}_1} = P_0 \left(\frac{\pi R_{10}^2}{\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \tilde{R}_1^2 d\theta} \right)^\gamma$$

En linéarisant cette dernière expression, on obtient :

$$P' \Big|_{r=R_1} = P_0 \left(\frac{R_{10}^2}{R_1^2} \right)^\gamma \left(-\frac{\gamma}{\pi R_1} \int_0^{2\pi} R_1' d\theta \right)$$

En particulier si :

$$\int_0^{2\pi} R_1' d\theta = 0 \quad (\text{VI.8})$$

Alors :

$$P' \Big|_{r=R_1} = 0$$

L'équation pour la frontière interne $r = R_1$ est alors la même que celle associée à la frontière externe (VI.7) :

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) R_1' \Big|_{r=R_1} = 0 \quad (\text{VI.9})$$

En utilisant les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial r} &= \frac{dR_1}{dt} \frac{R_1}{r} \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t \partial r} &= \frac{d^2 R_1}{dt^2} \frac{R_1}{r} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \frac{1}{r} \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} &= -\frac{dR_1}{dt} \frac{R_1}{r^2} \end{aligned}$$

On obtient :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) \Big|_{r=R_1} = \frac{d^2 R_1}{dt^2}$$

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

Ceci nous permet de reformuler les équations (VI.7) et (VI.9) qui deviennent :

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{dR_1}{dt} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{d^2 R_1}{dt^2} R'_1 \Big|_{r=R_1} = 0 \quad (\text{VI.10})$$

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{dR_2}{dt} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{d^2 R_2}{dt^2} R'_2 \Big|_{r=R_2} = 0 \quad (\text{VI.11})$$

Les conditions aux limites cinématiques (égalité de la vitesse du fluide avec celles des frontières) s'écrivent :

$$\frac{\partial \tilde{R}_i}{\partial t} + \frac{\tilde{R}_{i\theta}}{\tilde{R}_i^2} \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \theta} = \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial r} \Big|_{r=\tilde{R}_i} \quad (\text{VI.12})$$

Cette condition devient après linéarisation :

$$\frac{\partial R'_i}{\partial t} = \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} R'_i \Big|_{r=R_i}$$

En utilisant la relation suivante :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} = -\frac{dR_1}{dt} \frac{R_1}{r^2}$$

On obtient :

$$R'_{it} = \frac{\partial \varphi'}{\partial r} - \frac{dR_1}{dt} \frac{R'_i}{R_1} \Big|_{r=R_i} \quad (\text{VI.13})$$

Par ailleurs, le potentiel perturbé φ' satisfait l'équation de Laplace au sein de la couche fluide :

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \varphi'}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \varphi'}{\partial \theta^2} = 0 \quad (\text{VI.14})$$

VI.2.3 Équations d'Amplitude

Dans cette section, nous établissons les équations d'évolution associées aux amplitudes des perturbations. On emploie la méthode de séparation des variables pour résoudre l'équation de Laplace. Ainsi, on recherche des solutions sous la forme :

$$R'_i = \xi_i(t) \sin k\theta \quad (\text{VI.15})$$

$$\varphi' = (A(t)r^k + B(t)r^{-k}) \sin k\theta \quad (\text{VI.16})$$

où “ k ” est le nombre d'onde. Il est à noter que les amplitudes des perturbations $\xi_i(t)$ ainsi que les fonctions $A(t)$ et $B(t)$ sont dépendantes du nombre d'onde k , mais pour des raisons de lisibilité nous préférons ne pas faire apparaître un indice supplémentaire. Les conditions limites cinématiques et dynamiques obtenues dans la section précédente sont

résumées ci-dessous :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{dR_1}{dt} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{d^2 R_1}{dt^2} R'_1 \Big|_{r=R_1} = 0 \\ \frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{dR_2}{dt} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{d^2 R_2}{dt^2} R'_2 \Big|_{r=R_2} = 0 \\ \frac{\partial R'_1}{\partial t} = \frac{\partial \varphi'}{\partial r} - \frac{dR_1}{dt} \frac{1}{R_1} R'_1 \Big|_{r=R_1} \\ \frac{\partial R'_2}{\partial t} = \frac{\partial \varphi'}{\partial r} - \frac{dR_2}{dt} \frac{1}{R_2} R'_2 \Big|_{r=R_i} \end{array} \right.$$

Ce système peut être réécrit en utilisant les relations (VI.15) et (VI.16). On obtient alors un système d'équations différentielles ordinaires portant sur les amplitudes des perturbations $\xi_1(t)$, $\xi_2(t)$, $A(t)$ et $B(t)$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{dA}{dt} r^k + \frac{dB}{dt} r^{-k} \right) + k \frac{dR_1}{dt} (Ar^{k-1} - Br^{-k-1}) + \frac{d^2 R_1}{dt^2} \xi_1 \Big|_{r=R_1} = 0 \\ \left(\frac{dA}{dt} r^k + \frac{dB}{dt} r^{-k} \right) + k \frac{dR_2}{dt} (Ar^{k-1} - Br^{-k-1}) + \frac{d^2 R_2}{dt^2} \xi_2 \Big|_{r=R_2} = 0 \\ \frac{d\xi_1}{dt} = k (Ar^{k-1} - Br^{-k-1}) - \frac{dR_1}{dt} \frac{\xi_1}{R_1} \Big|_{r=R_1} \\ \frac{d\xi_2}{dt} = k (Ar^{k-1} - Br^{-k-1}) - \frac{dR_2}{dt} \frac{\xi_2}{R_2} \Big|_{r=R_2} \end{array} \right. \quad (\text{VI.17})$$

Les deux dernières équations du système (VI.17) nous permettent d'exprimer les fonctions $A(t)$ et $B(t)$:

$$A = \frac{R_2^{-k} \frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - R_1^{-k} \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{k \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right)} \quad \text{et} \quad B = \frac{R_2^k \frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - R_1^k \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{k \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right)}$$

Impliquant les relations suivantes :

$$\begin{aligned} AR_1^k &= \frac{\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k \frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{k \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right)}, & BR_1^{-k} &= \frac{\left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{k \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right)}, \\ AR_2^k &= \frac{\frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{k \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right)}, & BR_2^{-k} &= \frac{\frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - \left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{k \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right)} \end{aligned}$$

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

Ces quatre dernières relations sont à injecter dans les deux premières équations du système (VI.17), qui sont équivalentes à :

$$\begin{aligned}\frac{d(AR_1^k)}{dt} + \frac{d(BR_1^{-k})}{dt} + \frac{d^2 R_1}{dt^2} \xi_1 &= 0 \\ \frac{d(AR_2^k)}{dt} + \frac{d(BR_2^{-k})}{dt} + \frac{d^2 R_2}{dt^2} \xi_2 &= 0\end{aligned}$$

Ainsi, on obtient :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \left(\frac{\left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k + \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right) \frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - 2 \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k} \right) + k \frac{d^2 R_1}{dt^2} \xi_1 &= 0 \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{2 \frac{d(R_1 \xi_1)}{dt} - \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k + \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right) \frac{d(R_2 \xi_2)}{dt}}{\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k} \right) + k \frac{d^2 R_2}{dt^2} \xi_2 &= 0\end{aligned}$$

En opérant le changement de variables suivant :

$$\zeta_1 = R_1 \xi_1, \quad \text{et} \quad \zeta_2 = R_2 \xi_2$$

Le système précédent s'écrit :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k + \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right) \frac{d\zeta_1}{dt} - 2 \frac{d\zeta_2}{dt}}{\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k} \right) + \frac{k}{R_1} \frac{d^2 R_1}{dt^2} \zeta_1 &= 0 \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{2 \frac{d\zeta_1}{dt} - \left(\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k + \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k \right) \frac{d\zeta_2}{dt}}{\left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k} \right) + \frac{k}{R_2} \frac{d^2 R_2}{dt^2} \zeta_2 &= 0 \end{aligned} \right. \quad (\text{VI.18})$$

Nous allons reformuler une nouvelle fois le système (VI.18). Au préalable procédons à quelques définitions. Soient f_k et g_k deux fonctions telles que :

$$f_k(R_1, L) = \left(\frac{R_1}{R_2} \right)^k + \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^k = \left(\frac{R_1}{\sqrt{L^2 + R_1^2}} \right)^k + \left(\frac{R_1}{\sqrt{L^2 + R_1^2}} \right)^{-k}$$

$$g_k(R_1, L) = \left(\frac{R_1}{R_2}\right)^k - \left(\frac{R_2}{R_1}\right)^k = \left(\frac{R_1}{\sqrt{L^2 + R_1^2}}\right)^k - \left(\frac{R_1}{\sqrt{L^2 + R_1^2}}\right)^{-k}$$

Il est possible de montrer que :

$$f_k^2 - g_k^2 = 4 \quad (\text{VI.19})$$

D'autre part :

$$\frac{df_k}{dR_1} = g_k \frac{kL^2}{R_1 R_2^2} \quad \text{et} \quad \frac{dg_k}{dR_1} = f_k \frac{kL^2}{R_1 R_2^2} \quad (\text{VI.20})$$

Le système (VI.18) s'écrit donc :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{f_k \frac{d\zeta_1}{dt} - 2 \frac{d\zeta_2}{dt}}{g_k} \right) + \frac{k}{R_1} \frac{d^2 R_1}{dt^2} \zeta_1 &= 0 \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{f_k \frac{d\zeta_2}{dt} - 2 \frac{d\zeta_1}{dt}}{g_k} \right) - \frac{k}{R_2} \frac{d^2 R_2}{dt^2} \zeta_2 &= 0 \end{aligned}$$

En utilisant les relations (VI.19) et (VI.20) on obtient :

$$\begin{aligned} g_k \left(f_k \frac{d^2 \zeta_1}{dt^2} - 2 \frac{d^2 \zeta_2}{dt^2} \right) + \frac{2kL^2}{R_1 R_2^2} \frac{dR_1}{dt} \left(f_k \frac{d\zeta_2}{dt} - 2 \frac{d\zeta_1}{dt} \right) + \frac{kg_k^2}{R_1} \frac{d^2 R_1}{dt^2} \zeta_1 &= 0 \\ g_k \left(f_k \frac{d^2 \zeta_2}{dt^2} - 2 \frac{d^2 \zeta_1}{dt^2} \right) + \frac{2kL^2}{R_1 R_2^2} \frac{dR_1}{dt} \left(f_k \frac{d\zeta_1}{dt} - 2 \frac{d\zeta_2}{dt} \right) - \frac{kg_k^2}{R_2} \frac{d^2 R_2}{dt^2} \zeta_2 &= 0 \end{aligned}$$

La conservation de la masse (VI.2) implique :

$$R_1 \frac{dR_1}{dt} = R_2 \frac{dR_2}{dt}$$

En dérivant cette équation par rapport au temps, on obtient :

$$R_1 \frac{d^2 R_1}{dt^2} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 = R_2 \frac{d^2 R_2}{dt^2} + \left(\frac{dR_2}{dt} \right)^2 = R_2 \frac{d^2 R_2}{dt^2} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \frac{R_1^2}{R_2^2}$$

Ainsi, la dérivée seconde du rayon externe $\frac{d^2 R_2}{dt^2}$ peut être exprimée comme une fonction des dérivées du rayon interne $R_1(t)$:

$$\frac{1}{R_2} \frac{d^2 R_2}{dt^2} = \frac{1}{R_2^2} \left(R_1 \frac{d^2 R_1}{dt^2} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \left(1 - \frac{R_1^2}{R_2^2} \right) \right)$$

Finalement, les équations d'évolution pour les perturbations modifiées ζ_i sont :

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

$$g_k \left(f_k \frac{d^2 \zeta_1}{dt^2} - 2 \frac{d^2 \zeta_2}{dt^2} \right) + \frac{2kL^2}{R_1 R_2^2} \frac{dR_1}{dt} \left(f_k \frac{d\zeta_2}{dt} - 2 \frac{d\zeta_1}{dt} \right) + \frac{kg_k^2}{R_1} \frac{d^2 R_1}{dt^2} \zeta_1 = 0$$

$$g_k \left(f_k \frac{d^2 \zeta_2}{dt^2} - 2 \frac{d^2 \zeta_1}{dt^2} \right) + \frac{2kL^2}{R_1 R_2^2} \frac{dR_1}{dt} \left(f_k \frac{d\zeta_1}{dt} - 2 \frac{d\zeta_2}{dt} \right) - \frac{kg_k^2}{R_2^2} \left(R_1 \frac{d^2 R_1}{dt^2} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \left(1 - \frac{R_1^2}{R_2^2} \right) \right) \zeta_2 = 0$$

VI.2.4 Synthèse du Modèle Intégro-Différentiel

Le modèle mathématique à résoudre est composé des équations d'évolution de l'écoulement de base et des équations d'évolution sur les perturbations modifiées. Le système complet s'écrit :

$$\frac{d^2 R_1}{dt^2} R_1 \ln \frac{R_1}{R_2} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \left(\ln \frac{R_1}{R_2} + \frac{1}{2} \left(1 - \left(\frac{R_1}{R_2} \right)^2 \right) \right) + \frac{P_0}{P_a} (R_1)^{-3} - 1 = 0.$$

$$g_k \left(f_k \frac{d^2 \zeta_1}{dt^2} - 2 \frac{d^2 \zeta_2}{dt^2} \right) + \frac{2kL^2}{R_1 R_2^2} \frac{dR_1}{dt} \left(f_k \frac{d\zeta_2}{dt} - 2 \frac{d\zeta_1}{dt} \right) + \frac{kg_k^2}{R_1} \frac{d^2 R_1}{dt^2} \zeta_1 = 0 \quad (\text{VI.21})$$

$$g_k \left(f_k \frac{d^2 \zeta_2}{dt^2} - 2 \frac{d^2 \zeta_1}{dt^2} \right) + \frac{2kL^2}{R_1 R_2^2} \frac{dR_1}{dt} \left(f_k \frac{d\zeta_1}{dt} - 2 \frac{d\zeta_2}{dt} \right) - \frac{kg_k^2}{R_2^2} \left(R_1 \frac{d^2 R_1}{dt^2} + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \left(1 - \frac{R_1^2}{R_2^2} \right) \right) \zeta_2 = 0$$

Le système d'équations différentielles d'ordre deux (système (VI.21)) est résolu en transformant le système en une succession d'équations différentielles à l'ordre un. On utilise un schéma d'intégration de type "Runge-Kutta 2".

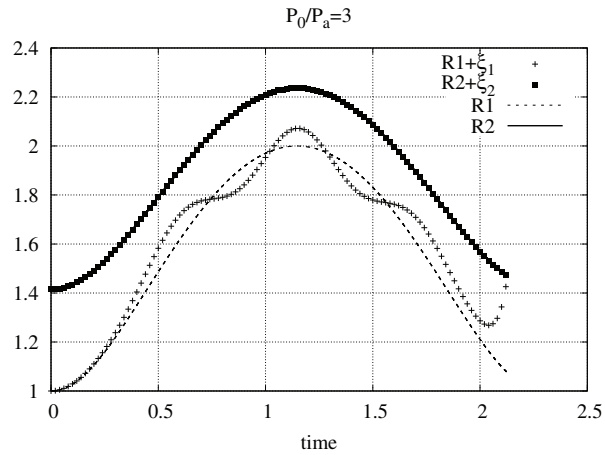


Figure VI.9 – Évolution des rayons perturbés et non perturbés dans le cas d'un rapport de pressions égal à 3 et pour un nombre d'onde $k = 100$.

Sur la Figure VI.9, sont représentées les solutions typiques obtenues pour un cas “académique” avec un rapport de pressions faible. Nous pouvons observer l’évolution du rayon interne perturbé qui oscille dans un premier temps autour de la solution de référence puis rejoint le rayon externe. Cette observation est en accord qualitatif avec les résultats expérimentaux de Vincent Rodriguez. En effet, ces instabilités ont été observées sur la surface interne de l’anneau, bien avant que la surface extérieure ne se déstabilise. Nous constatons également que le rayon externe perturbé suit parfaitement la solution de référence.

• Variables adimensionnées

Les calculs sont réalisés en variables sans dimension

$$\frac{R_i}{R_{10}} \quad \text{et} \quad \frac{\zeta_i}{R_{10}^2} \quad \text{pour } i = 1, 2, \quad \frac{L}{R_{10}} \quad \text{et} \quad \frac{t}{\tau}$$

Nous utiliserons les mêmes notations R_i , ζ_i et L pour les variables adimensionnées. L’échelle de temps τ est définie de la façon suivante :

$$\tau = \sqrt{\frac{\rho R_{10}^2}{p_a}}. \quad (\text{VI.22})$$

VI.2.5 Choix des Données Initiales

• Introduction

Les interfaces étant perturbées, cela entraîne une variation des périmètres internes et externes de l’anneau de fluide. Afin de pouvoir comparer les solutions obtenues pour différents nombres d’onde k , il est nécessaire de conserver ce périmètre perturbé. En effet, les perturbations étant sous forme de fonctions sinusoïdales (proportionnelles à $\sin(k\theta)$), la variation engendrée sur le périmètre dépend fortement du nombre d’onde k . Sur la figure VI.10, nous avons tracé deux interfaces correspondant à deux nombres d’onde différents afin d’illustrer la modification induite sur le périmètre. Plus le nombre d’onde est grand, plus la surface corruguée engendrée est importante. Ainsi, pour conserver la perturbation associée au périmètre, il sera nécessaire de modifier l’amplitude initiale de la perturbation. Plus le nombre d’onde sera grand, plus il faudra diminuer l’amplitude de la perturbation initiale.

• Calcul du périmètre corrugué

Dans le cas cylindrique, l’équation de la surface (interne, par exemple) est donné par :

$$r(t, \theta) = R_1(t) + \xi_1(t) \sin(k\theta)$$

A chaque instant, le périmètre corrugué est donné par l’intégrale suivante :

$$\Pi_1(t) = \int_0^{2\pi} \sqrt{r^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \theta}\right)^2} d\theta = \int_0^{2\pi} \sqrt{k^2 \xi_1(t)^2 \cos^2 k\theta + (R_1(t) + \xi_1(t) \sin k\theta)^2} d\theta$$

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

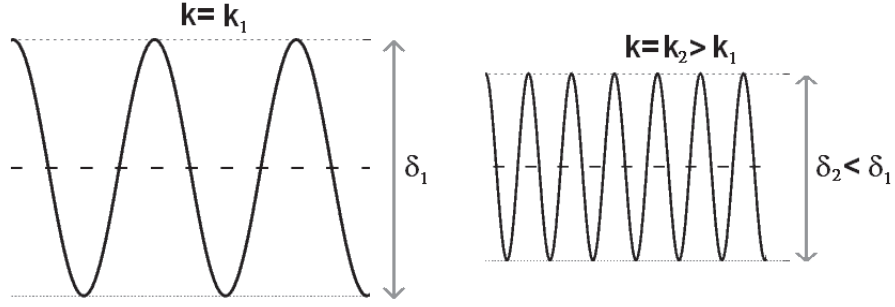


Figure VI.10 – Représentation des interfaces corruguées. Il faut diminuer l'amplitude de la perturbation initiale avec l'augmentation du nombre d'onde pour conserver la surface du périmètre perturbé.

On a :

$$\begin{aligned}
 \Pi_1(t) &= R_1(t) \int_0^{2\pi} \sqrt{k^2 \left(\frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \right)^2 \cos^2 k\theta + \left(1 + \frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \sin k\theta \right)^2} d\theta \\
 &= R_1(t) \int_0^{2\pi} \sqrt{1 + \frac{2\xi_1(t)}{R_1(t)} \sin k\theta + k^2 \left(\frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \right)^2 \cos^2 k\theta + \left(\frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \right)^2 \sin^2 k\theta} d\theta \\
 &\approx R_1(t) \int_0^{2\pi} \left(1 + \frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \sin k\theta + \frac{1}{2} \left(\frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \right)^2 (k^2 \cos^2 k\theta + \sin^2 k\theta) \right) d\theta \\
 &\approx 2\pi R_1(t) + \frac{\pi}{2} \left(\frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \right)^2 (1 + k^2)
 \end{aligned}$$

Finalement, la perturbation de ce périmètre est donné par :

$$\Pi'_1(t) = \Pi_1(t) - 2\pi R_1(t) \approx \frac{\pi}{2} R_1(t) \left(\frac{\xi_1(t)}{R_1(t)} \right)^2 (1 + k^2)$$

Notons $\xi_1(0) = \delta_1$. Pour chaque valeur du nombre d'onde k on choisira $\delta_1(k)$ tel que :

$$\delta_1^2(1 + k^2) = \delta^2 \quad (\text{VI.23})$$

En vérifiant cette condition, la surface corruguée initiale sera la même quel que soit le nombre d'onde k . Donc, l'amplitude de la perturbation initiale doit diminuer avec l'augmentation du nombre d'onde k , afin que le périmètre puisse être conservé. Cette remarque se traduit de la façon suivante. Les conditions initiales pour les équations d'évolution associées aux amplitudes modifiées (deux dernières équations du système (VI.21)) sont :

$$\zeta_1(0) = \delta_1 = \frac{\delta}{\sqrt{1 + k^2}} \quad \zeta_2(0) = 0 \quad (\text{VI.24})$$

$$\frac{d\zeta_1}{dt}(0) = \frac{d\zeta_2}{dt}(0) = 0$$

D'autre part, on a :

$$R_1(0) = 1, \quad \frac{dR_1}{dt}(0) = 0 \quad (\text{VI.25})$$

Les conditions initiales associées à l'interface externe sont quant à elles reliées à celles de l'interface interne par la conservation de la masse (VI.2).

VI.2.6 Notion de stabilité de l'interface

Dans le cadre de ce problème, nous savons que la solution est toujours instable. Cependant, il existe plusieurs manières de décrire l'instabilité de la solution. Il nous faut donc définir la notion de "stabilité" des interfaces pour ce problème. La surface interne est *stable* si :

$$\left. \frac{\partial P}{\partial n} \right|_{r=R_1} = - \left. \frac{\partial P}{\partial r} \right|_{r=R_1} < 0$$

Identiquement, la surface externe est *stable* si :

$$\left. \frac{\partial P}{\partial n} \right|_{r=R_2} = \left. \frac{\partial P}{\partial r} \right|_{r=R_2} < 0$$

où $\frac{\partial(\cdot)}{\partial n}$ représente la dérivée suivant la normale extérieure à la couche fluide.

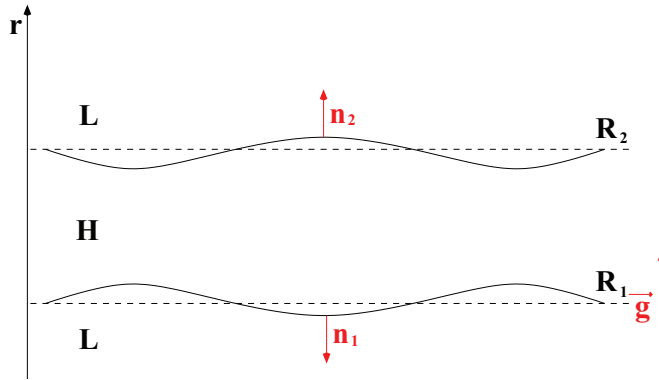


Figure VI.11 – Couche fluide soumise à une accélération

On peut exprimer ces conditions en terme des rayons R_1 et R_2 . En effet :

$$\begin{aligned} - \frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial P}{\partial r} \right|_{r=R_1} &= \left. \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) \right|_{r=R_1} = \frac{d^2 R_1}{dt^2} \\ - \frac{1}{\rho} \left. \frac{\partial P}{\partial r} \right|_{r=R_2} &= \left. \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) \right|_{r=R_2} = \frac{d^2 R_2}{dt^2} \end{aligned}$$

Ces deux dernières relations impliquent alors les conditions suivantes :

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

- La surface interne est stable si :

$$\ddot{R}_1 = \frac{d^2 R_1}{dt^2} < 0 \quad (\text{VI.26})$$

- La surface externe est stable si :

$$\ddot{R}_2 = \frac{d^2 R_2}{dt^2} > 0 \quad (\text{VI.27})$$

Le changement de stabilité intervient donc aux points d'inflexion de $R_i(t)$ $\{i = 1, 2\}$. Sur la Figure VI.12, on a tracé l'évolution de $\ddot{R}_1(t)$ et de $\ddot{R}_2(t)$ au cours du temps dans le cas d'un rapport de pression de 10^5 (sur une période). L'intervalle de temps dans lequel les interfaces R_1 et R_2 sont instables est coloré en gris.

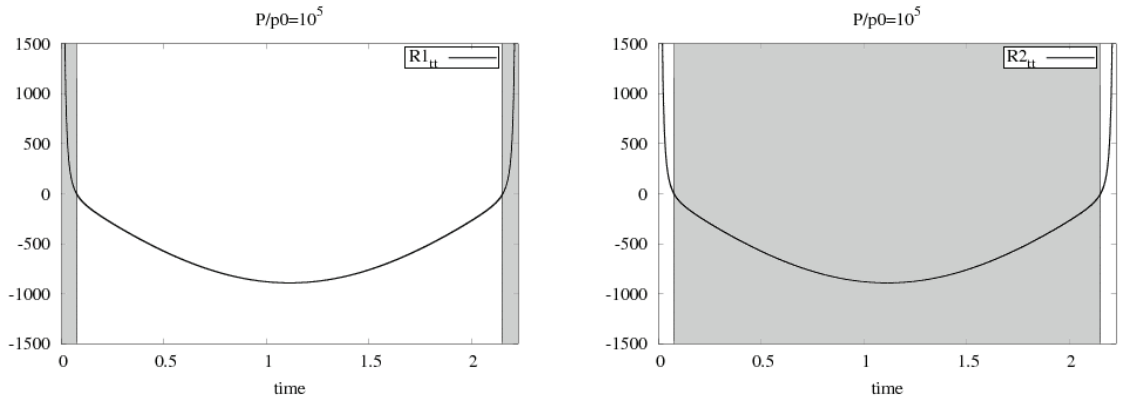


Figure VI.12 – A gauche : évolution de $\ddot{R}_1$ au cours du temps sur une période. Le domaine d'instabilité de la surface interne se trouve dans la phase positive de $\ddot{R}_1$. A droite, évolution de $\ddot{R}_2$ au cours du temps. Le domaine d'instabilité de la surface externe se trouve dans la phase négative de $\ddot{R}_2$.

Comme l'explosion est très forte, les interfaces $R_i(t)$, $\{i = 1, 2\}$ deviennent voisines rapidement. La couche du fluide est très mince et le gradient de pression dans la couche ne varie presque pas quel que soit t compris entre les deux points d'inflexion de $R_i(t)$. *la surface interne est stable et la surface externe est instable* entre les deux points d'inflexion (autrement dit, la majeure partie du temps). Dans le cas d'une couche mince, on considère les points d'inflexion des deux interfaces comme étant confondus.

Soit T la période d'oscillation addimensionnée des interfaces. Nous pouvons voir sur la Figure VI.12, que l'accélération des deux interfaces présente un minimum apparaissant pour $t = T/2$. Ce minimum correspond donc à l'instant où l'instabilité de la surface externe est maximale. A l'opposé, l'instabilité maximale de la surface interne coïncide avec les maximum de $\ddot{R}_1(t)$, à savoir pour $t = 0$ et $t = T$. Nous noterons t_1 et t_2 , les deux instants où la dérivée seconde du rayon interne s'annule (Figure VI.13) :

$$\frac{d^2 R_1}{dt^2}(t_1) = \frac{d^2 R_1}{dt^2}(t_2) = 0 \quad \text{avec} \quad t_1 < t_2$$

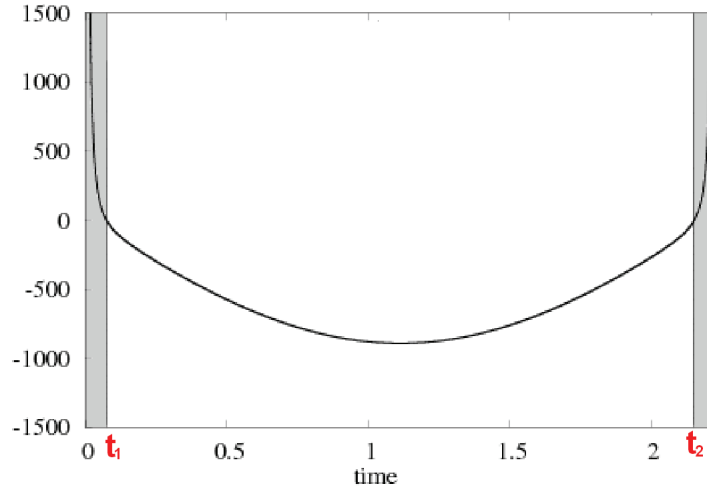


Figure VI.13 – Evolution de l'accélération de l'interface interne. On a figuré en rouge les instants où celle-ci s'annule, notés t_1 et t_2 .

VI.2.7 Sélection du Nombre d'Onde

Dans cette section, on cherche à déterminer un critère de sélection lié au nombre d'onde.

• Temps de Coupure

Soit " $t_c(k)$ ", l'instant où les deux interfaces se rejoignent. Cet instant, que nous appellerons "temps de coupure", dépend du nombre d'onde k et également de l'amplitude de la perturbation δ .

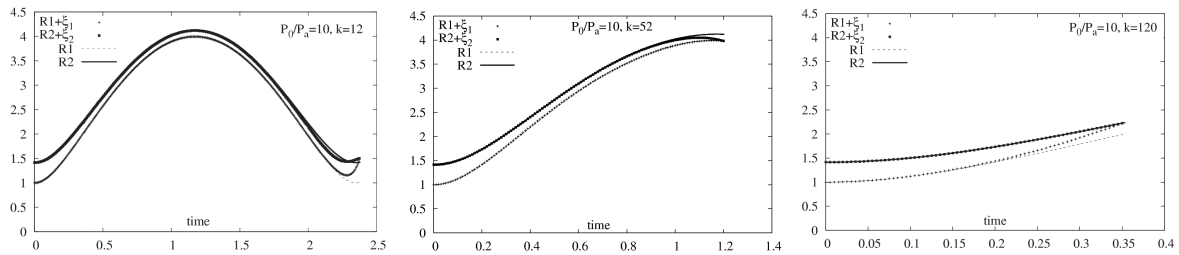


Figure VI.14 – Évolution des rayons perturbés jusqu'à l'intersection des deux interfaces, pour différents nombres d'onde ($k = 12$, $k = 52$, $k = 120$) et un rapport de pression égal à 10.

Sur la Figure VI.14, on a tracé l'évolution des rayons perturbés pour différentes valeurs

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

du nombre d'onde k , dans un cas académique, pour un rapport de pressions faible égal à 10. On constate que le temps de coupure $t_c(k)$ est fortement dépendant du nombre d'onde k : plus ce dernier est élevé, plus le temps de coupure $t_c(k)$ est faible.

Quelle que soit la valeur de la perturbation initiale δ , trois catégories apparaissent. Celles-ci sont énumérées ci-dessous et illustrées par la configuration associée à la Figure VI.14.

- L'intersection des deux rayons intervient après le second point d'inflexion, c'est à dire :

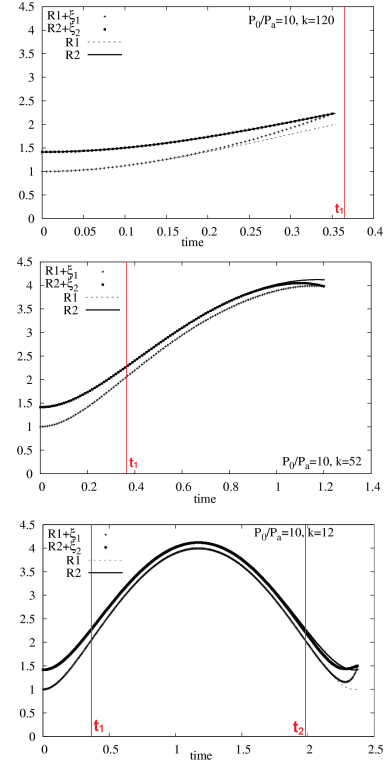
$$t_c(k) > t_2$$

- L'intersection des deux rayons intervient entre les deux points d'inflexion :

$$t_1 < t_c(k) < t_2$$

- L'intersection des deux rayons intervient avant le premier point d'inflexion :

$$t_c(k) < t_1$$



• Hypothèses

On fait l'hypothèse que l'instabilité est causée par la croissance de la surface interne. Cela revient à supposer que l'intersection des interfaces intervient lorsque la frontière interne est instable. C'est effectivement le cas lorsque le temps de coupure $t_c(k)$ est inférieur à t_1 ou encore dans le cas où le temps de coupure $t_c(k)$ est supérieur à t_2 . Nous illustrons cette hypothèse par la Figure VI.15. Il s'agit d'un résultat expérimental montrant un anneau de farine soumis à une onde de choc provenant du centre de l'anneau. Sur ces photos prises à différents instants, on constate que l'interface interne se déstabilise bien avant l'interface externe.

Il reste donc deux configurations possibles : $t_c(k) < t_1$ et $t_c(k) > t_2$. La dernière configuration est écartée. Pour justifier cela, on se place dans le cas d'une charge de rayon

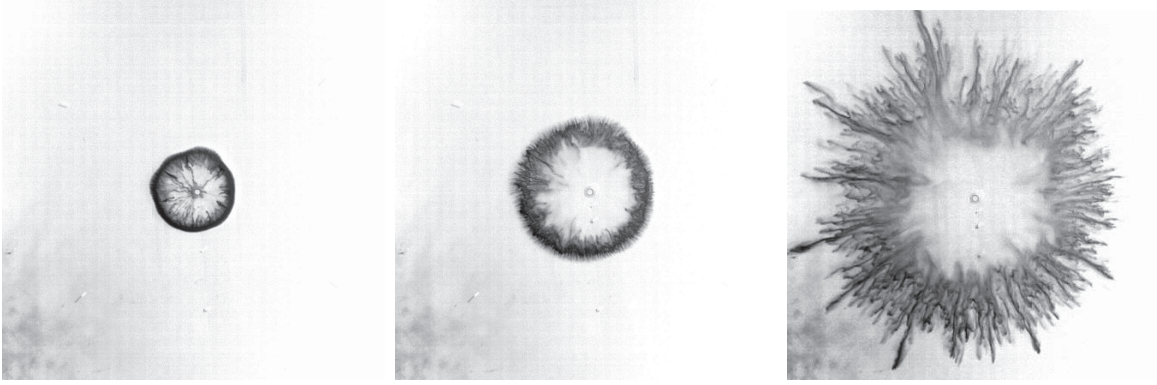


Figure VI.15 – Anneau de farine soumis à une onde de choc (de faible amplitude). Visualisation des interfaces à différents instants (5 ms , 12 ms et 32 ms).

$R_{10} = 10\text{ cm}$ et d'un rapport de pressions de 10^5 . On peut calculer l'échelle de temps τ grâce à la définition (VI.22) :

$$\tau = \sqrt{\frac{\rho R_{10}^2}{p_a}} = 0.01\text{ s}$$

D'autre part, on peut déterminer les valeurs de t_1 et t_2 :

$$t_1 = 0.0755 \quad t_2 = 2.15$$

Ces valeurs doivent être multipliées par τ pour obtenir les instants physiques correspondant. Ainsi on obtient :

$$(t_1)_{physique} = 0.755\text{ ms} \quad \text{et} \quad (t_2)_{physique} = 21.5\text{ ms}.$$

À l'échelle d'une explosion, 21.5 ms est un temps “très long”. En effet, à cet instant, l'instabilité a déjà eu le temps de croître et le nombre d'onde critique a déjà été sélectionné. De l'ensemble de ces considérations, nous formulons l'hypothèse suivante : **“le nombre de jets est défini par le nombre d'onde critique k_c tel que” $t_c(k_c) \approx t_1$** . Ainsi, pour un rapport de pressions et une perturbation donnés, on peut déterminer k_c correspondant au nombre minimum de jets formés.

VI.2.8 Résultats Numériques

Dans cette section, nous cherchons à déterminer la valeur du nombre d'onde critique “ k_c ” suivant la valeur de la perturbation initiale δ . Rappelons que “ δ ” correspond à la perturbation du périmètre de l'interface interne. Pour une perturbation donnée, nous étudierons l'évolution du temps de coupure $t_c(k)$ et chercherons à déterminer k_c tel que $t_c(k_c) \approx t_1$.

VI.2. Stabilité d'un cylindre creux soumis à un gradient de pression

• Exemple 1

On utilise les conditions initiales (VI.24) et (VI.25) respectivement pour les perturbations modifiées (ζ_1, ζ_2) et pour le rayon interne (R_1) . On se place dans la configuration suivante,

$$\frac{P_0}{P_a} = 10^5, \quad \delta_1(0) = \frac{\delta}{\sqrt{1+k^2}}, \quad \text{et} \quad \delta = 10^{-3}$$

On peut évaluer le premier instant où l'accélération de la surface interne s'annule (t_1), ainsi que la période d'oscillation T :

$$t_1 = 0.0755 \quad \text{et} \quad T = 2.229$$

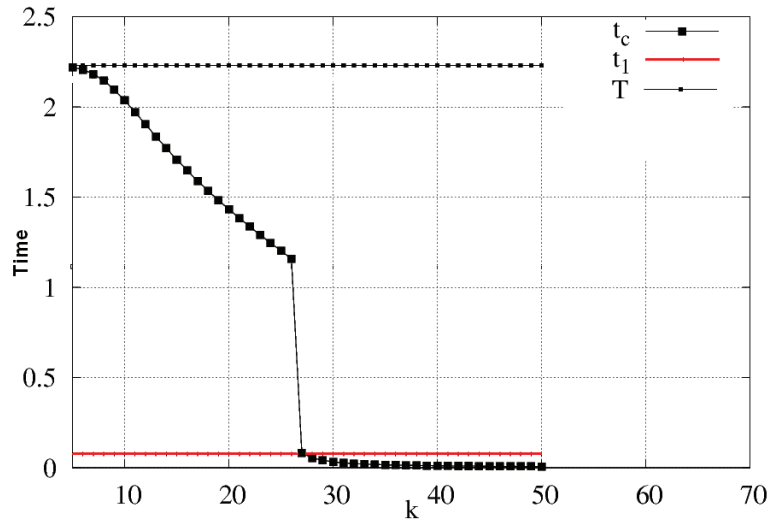


Figure VI.16 – Evolution du temps de coupure $t_c(k)$ en fonction de k comparé à t_1 (en rouge) et à la période T .

Sur la Figure VI.16, on représente l'évolution du temps de coupure t_c en fonction du nombre d'onde k . On constate qu'il existe k_c tel que $t_c(k_c) \approx t_1$. Le nombre d'onde critique k_c est facilement identifiable, en raison de la présence d'un saut sur la courbe. Dans le cas présent nous obtenons,

$$k_c = 28.$$

Afin de mieux visualiser l'évolution de l'interface, on procède à une reconstruction bidimensionnelle de cette dernière (Figure VI.17).

Nous allons maintenant diminuer la valeur de la perturbation du périmètre δ . Cela revient à diminuer l'amplitude de la perturbation initiale δ_1 .

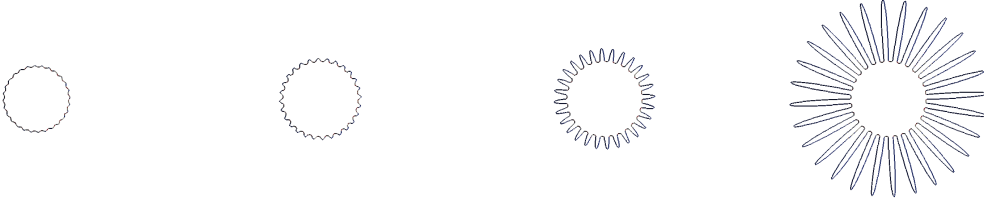


Figure VI.17 – Evolution de l'interface interne après reconstruction

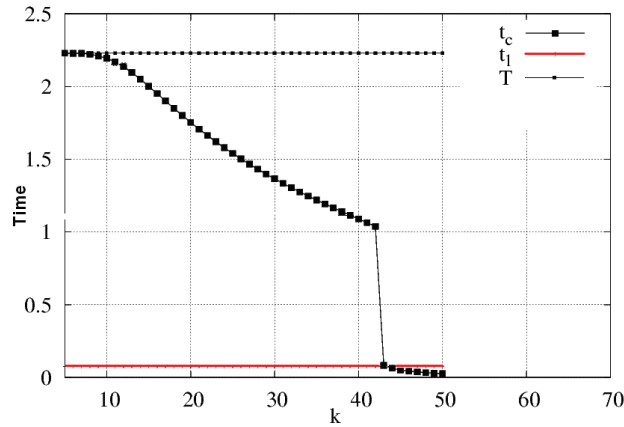
• Exemple 2

On reprend les mêmes conditions initiales que dans l'exemple précédent (VI.24) et (VI.25) et le même rapport de pressions. La valeur de la perturbation initiale δ est divisée par 10.

$$\frac{P_0}{P_a} = 10^5, \quad \delta_1(0) = \frac{\delta}{\sqrt{1+k^2}}, \quad \text{et} \quad \delta = 10^{-4}$$

La période d'oscillation et le premier point d'inflexion ne changent pas. En effet, ceux-ci ne dépendent que du rapport de pression et de la masse de la couche :

$$t_1 = 0.0755 \quad \text{et} \quad T = 2.229$$


 Figure VI.18 – Évolution du temps de coupure $t_c(k)$ en fonction de k comparé à t_1 (en rouge) et à la période T .

Sur la Figure VI.18, on a tracé l'évolution du temps de coupure t_c en fonction du temps. Dans ce deuxième cas, on note également la présence d'un saut, nous permettant d'identifier aisément le nombre d'onde critique k_c , dont la valeur est clairement différente du cas précédent.

$$k_c = 42$$

Comme pour le cas précédent, nous procédons à une reconstruction bidimensionnelle de l'interface interne (Figure VI.19).

VI.3. Etude en Configuration Sphérique

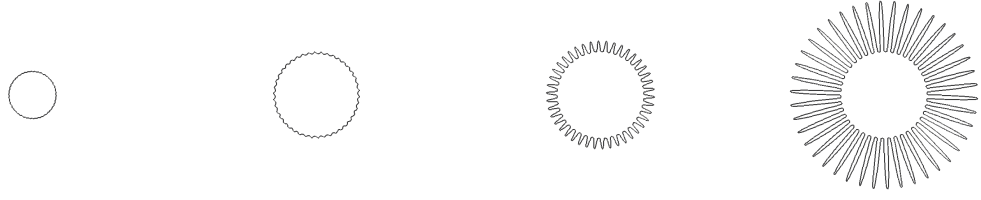


Figure VI.19 – Évolution de l'interface interne après reconstruction

irr Plaçons nous maintenant dans une géométrie sphérique :

VI.3 Etude en Configuration Sphérique

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus dans le cas d'une géométrie sphérique (Figure VI.20). Les détails des calculs sont fournis dans l'Annexe B. Nous présentons ici des résultats obtenus à l'issu de ces calculs. La stabilité d'une couche sphérique est étudiée. Les hypothèses de départ sont les mêmes que pour la configuration cylindrique.

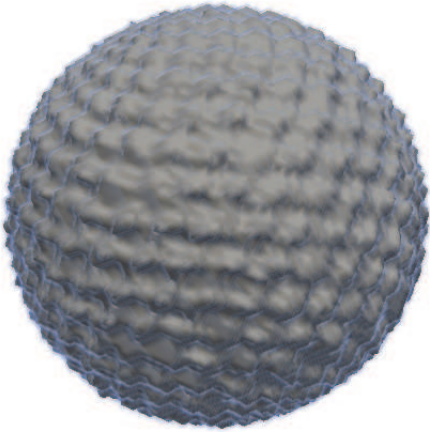


Figure VI.20 – Schématisation de la sphère corruguée de rayon interne $R_1(t)$ et de rayon externe $R_2(t)$

On considère une couche de fluide incompressible ainsi qu'un écoulement irrotationnel au sein de celle-ci. La conservation de la masse se traduit par la relation suivante :

$$L^3 = R_2^3(t) - R_1^3(t) = \text{const} \quad (\text{VI.28})$$

La pression à l'intérieur de la sphère obéit à la loi des gaz parfaits. La pression au-delà de la couche fluide est égale à la pression atmosphérique à l'état standard.

$$P|_{R_1} = P_0 \left(\frac{R_{01}^3}{R_1^3} \right)^\gamma \quad (\text{VI.29})$$

$$P|_{R_2} = P_a \quad (\text{VI.30})$$

Compte tenu des hypothèses, il est possible d'exprimer un potentiel Φ satisfaisant l'équation de Laplace en coordonnées sphériques ainsi que les conditions aux limites dynamiques. Ce potentiel s'écrit :

$$\Phi(r, t) = -\frac{R_1^2}{r} \frac{dR_1}{dt} = -\frac{R_2^2}{r} \frac{dR_2}{dt}$$

VI.3.1 Synthèse du Modèle Intégro Différentiel et Conditions Initiales

• Modèle Intégro Différentiel

On cherche préalablement la solution décrivant l'écoulement de base. Pour cela, on utilise les hypothèses d'incompressibilité, d'irrotationalité ainsi que les relations (VI.28), (VI.29) et (VI.30). On obtient alors l'équation d'évolution d'une bulle oscillante.

$$R_1 \frac{d^2 R_1}{dt^2} \left(\frac{R_1}{R_2} - 1 \right) + \left(\frac{dR_1}{dt} \right)^2 \left(-\frac{3}{2} + 2 \frac{R_1}{R_2} - \frac{1}{2} \frac{R_1^4}{R_2^4} \right) + \frac{P_0 \left(\frac{R_{10}^3}{R_1^3} \right)^\gamma - P_a}{\rho} = 0 \quad (\text{VI.31})$$

Des perturbations sont ensuite introduites sur le potentiel, la pression et les rayons :

$$\varphi = \Phi(r, t) + \varphi'(r, \theta, \psi, t), \quad P = P(r, t) + P'(r, \theta, \psi, t), \quad \tilde{R}_i = R_i(r, t) + R'_i(r, \theta, \psi, t)$$

Les équations d'amplitudes sont obtenues par linéarisation autour de la solution de référence, de l'équation d'évolution du rayon ainsi que des conditions limites. L'équation de Laplace est alors résolue par une méthode de séparation des variables et l'on cherche les solutions sous la forme :

$$\varphi(t, r, \theta, \psi) = \left(A(t)r^k + \frac{B(t)}{r^{k+1}} \right) \sin(m\psi) \tilde{P}_k^m(\cos\theta)$$

$$\text{et } R'_i(t, \theta, \psi) = \xi_i(t) \sin(m\psi) \tilde{P}_k^m(\cos\theta) \quad \{i = 1, 2\}$$

où $0 < m \leq k$ et $\tilde{P}_k^m$ est la fonction de Legendre associée normalisée (décrite dans l'Annexe B). ξ_1 et ξ_2 sont les amplitudes des perturbations. $A(t)$ et $B(t)$ correspondent également à des amplitudes et sont à déterminer. Nous présentons ci-dessous les équations d'amplitude obtenues après calculs. Ces équations impliquent les variables $X_1(t)$ et $X_2(t)$ qui correspondent à des perturbations modifiées. Notons l'apparition d'un second nombre d'onde, noté m .

$$\begin{aligned} \ddot{X}_1 + \left(\frac{h_k \dot{f}_k}{f_k h_k - (2k+1)^2} - \frac{1}{g_k} \dot{g}_k \right) \dot{X}_1 + \frac{(2k+1) \dot{h}_k}{f_k h_k - (2k+1)^2} \dot{X}_2 + \frac{g_k k(k+1)}{f_k h_k - (2k+1)^2} \left(h_k \frac{\ddot{R}_1 X_1}{R_1^2} - (2k+1) \frac{\ddot{R}_2 X_2}{R_2^2} \right) &= 0 \\ \ddot{X}_2 + \left(\frac{f_k \dot{h}_k}{f_k h_k - (2k+1)^2} - \frac{1}{g_k} \dot{g}_k \right) \dot{X}_2 + \frac{(2k+1) \dot{f}_k}{f_k h_k - (2k+1)^2} \dot{X}_1 + \frac{g_k k(k+1)}{f_k h_k - (2k+1)^2} \left((2k+1) \frac{\ddot{R}_1 X_1}{R_1^2} - f_k \frac{\ddot{R}_2 X_2}{R_2^2} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{VI.32})$$

Avec,

$$X_1 = R_1^2 \xi_1 \quad X_2 = R_2^2 \xi_2$$

Les fonctions g_k , f_k et h_k sont des fonctions dépendantes de $R_1(t)$, $R_2(t)$ ainsi que du nombre d'onde k . Ces fonctions sont définies dans l'Annexe B. La résolution de l'équation (VI.31) nous permet d'obtenir $R_1(t)$. La conservation de la masse (VI.28) est ensuite utilisée pour le calcul de $R_2(t)$. Les équations du système (VI.32) nous donnent accès aux perturbations modifiées $X_1(t)$ et $X_2(t)$, dont on peut déduire les valeurs des perturbations ξ_1 et ξ_2 .

VI.3. Etude en Configuration Sphérique

• Conditions Initiales

Identiquement au cas cylindrique, nous voulons conserver la valeur de la surface perturbée. Soit “ δ_1 ” l’amplitude initiale de la perturbation :

$$\xi_1(0) = \delta_1$$

Alors δ_1 sera fonction du nombre d’onde k de façon à conserver la valeur de la surface de la sphère perturbée quel que soit k . Soit S , la surface de la sphère perturbée et S_0 , la surface de la sphère de rayon $R_1(t)$. On impose :

$$S = S_0 + \Pi' = \text{const} \implies \Pi' = \text{constante}$$

Notons que la surface de la sphère corruguée est indépendante du nombre d’onde m . On peut exprimer une condition initiale pour $X_1(t)$, permettant de conserver la surface initiale de la sphère perturbée (détaillée dans l’annexe B) :

$$X_1(0) = \delta_1 = \frac{\sqrt{2}\delta}{\sqrt{3 + k(k+1)}}$$

D’autre part :

$$X_2(0) = 0 \text{ et } \frac{dX_1}{dt}(0) = \frac{dX_2}{dt}(0) = 0$$

$$R_1(0) = 1 \text{ et } \frac{dR_1}{dt}(0) = 0$$

On rappelle que toutes les variables sont adimensionnées. Nous allons maintenant présenter quelques résultats numériques.

VI.3.2 Résultats Numériques

La configuration sphérique ne modifie en rien les conditions de stabilité de la couche, comparé au cas cylindrique. Ainsi, la stabilité de la couche fluide est toujours reliée au signe de l’accélération des interfaces interne et externe (conditions (VI.26) et (VI.27)). Notre hypothèse pour la sélection du nombre d’onde est également inchangée. Ainsi, le nombre d’onde critique k_c est obtenu en cherchant le temps $t_c(k)$ égale à t_1 (instant où l’accélération de la surface interne s’annule), c’est à dire :

$$t_c(k_c) \approx t_1$$

Procédons maintenant à l’étude de l’évolution du temps de coupure en fonction du nombre d’onde k pour différentes valeurs de δ .

• Exemple 1

On se place dans la configuration suivante,

$$\frac{P_0}{P_a} = 10^5, \quad \delta_1 = \frac{\sqrt{2}\delta}{\sqrt{3+k(k+1)}} \quad \text{et} \quad \delta = 10^{-3}$$

Dans ce cas, on peut évaluer la période d'oscillation T ainsi que le temps t_1 , correspondant au premier point d'inflexion associé à l'évolution de la surface interne :

$$t_1 = 0.0205 \quad \text{et} \quad T = 0.26$$

Sur la Figure VI.21, on a représenté l'évolution du temps de coupure $t_c(k)$ en fonction du nombre d'onde k . On constate la présence de deux sauts sur le graphe et l'on peut trouver k_c tel que $t_c(k_c) \approx t_1$.

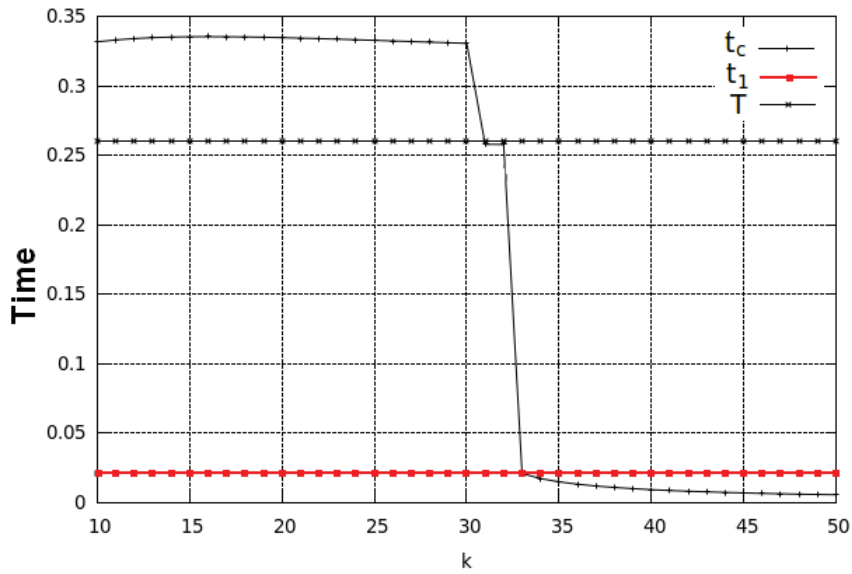


Figure VI.21 – Evolution du temps de coupure t_c en fonction du nombre d'onde k , on a marqué par une droite rouge le temps t_1 ainsi que la période d'oscillation T .

Ainsi dans cette configuration, on obtient :

$$k_c = 35$$

Il reste à déterminer le second nombre d'onde critique m_c . Celui-ci est choisi afin d'assurer une croissance isotrope des jets. Dans le cas présent on obtient :

$$m_c = 17$$

Comme pour le cas cylindrique, nous procédons à la reconstruction multi-dimensionnelle de la solution afin de mieux apprécier les résultats obtenus (Figure VI.22). Cela correspond à un nombre de jets de l'ordre de 500.

VI.3. Etude en Configuration Sphérique

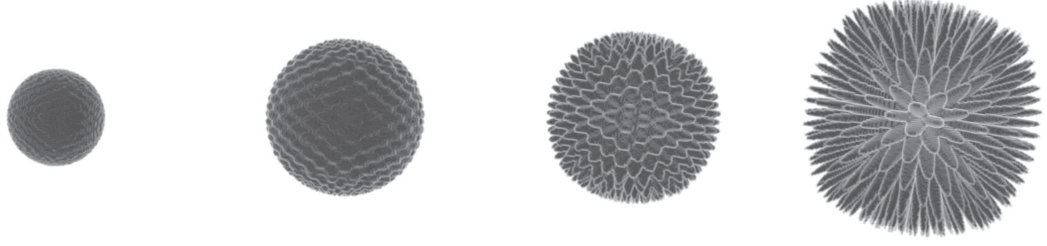


Figure VI.22 – Évolution de l'interface interne après reconstruction

• Exemple 2

On se place dans une configuration similaire à la précédente, en faisant varier uniquement la valeur de δ :

$$\frac{P_0}{P_a} = 10^5, \quad \delta_1 = \frac{\sqrt{2}\delta}{\sqrt{3 + k(k+1)}} \quad \text{et} \quad \delta = 10^{-4}$$

La période d'oscillation T ainsi que t_1 demeurent inchangés, ces valeurs ne dépendant que du rapport de pression et de la masse de la couche.

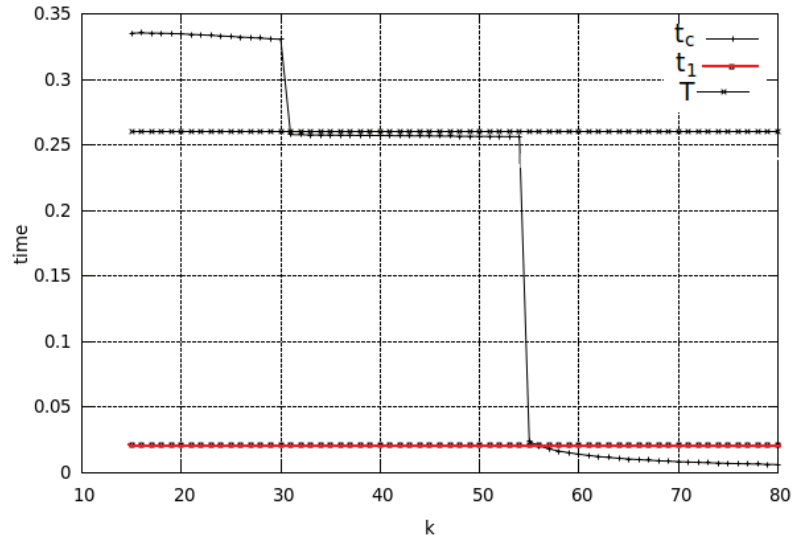


Figure VI.23 – Evolution du temps de coupure t_c en fonction du nombre d'onde k . On a marqué par une droite rouge le temps t_1 , ainsi que la période d'oscillation T .

Sur la Figure VI.23 est tracée l'évolution du temps de coupure t_c en fonction du nombre d'onde k . Dans cette configuration également, on constate la présence de deux sauts sur

le graphe et l'on peut trouver le nombre d'onde critique k_c tel que $t_c(k_c) \approx t_1$:

$$k_c = 56$$

Enfin on évalue le second nombre d'onde m_c :

$$m_c = 27$$

On peut procéder à la reconstruction multi-dimensionnelle de la solution (Figure VI.24). Il est alors possible d'évaluer le nombre de jets effectivement formés, on obtient un nombre d'environ 860.

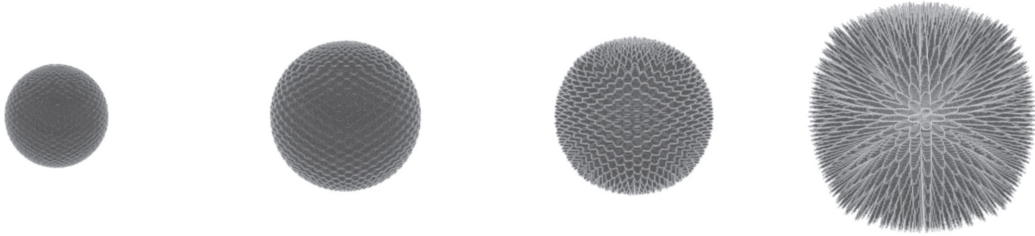


Figure VI.24 – Évolution de l'interface interne après reconstruction

VI.4 Conclusion

Nous avons pu proposer une méthodologie et déterminer un critère nous permettant d'évaluer le nombre de jets se formant lors d'une explosion. Ce critère est obtenu à partir d'une étude de stabilité linéaire. Sa validité est donc limitée et il serait nécessaire d'approfondir cette étude. En incluant les effets de compressibilité et en s'appuyant sur des configurations expérimentales. Ce critère nous permet néanmoins de déterminer des conditions initiales plus appropriées lors d'explosion en présence de particules.

Conclusion et Perspectives

Durant ces travaux, nous avons développé un code de calcul tridimensionnel et parallèle permettant de traiter la dispersion de fluide en milieu fortement hétérogène. Le code de calcul obtenu est basé sur un modèle de milieu hétérogène compressible ainsi que sur la résolution de problèmes de Riemann. Il convient au traitement des géométries complexes, certains obstacles pouvant être traités comme des termes sources et par conséquent, ne nécessitant pas d'être maillés finement. Des comparaisons avec des résultats expérimentaux ont permis de valider le modèle. Par ailleurs, un schéma numérique d'ordre élevé en temps et en espace a été implémenté pour le suivi de la concentration des espèces chimiques. Cela nous a permis de réduire considérablement la diffusion numérique induite par l'utilisation d'un schéma à l'ordre un. L'outil ainsi développé permet la simulation de configurations d'écoulement variées.

Pour reproduire au mieux des situations réelles, de nombreux phénomènes physiques ont été implémentés, tels que les transferts diffusifs thermiques et massiques ou encore la gravité. La reproduction de configurations réalistes est facilitée par la prise en compte de la topographie des terrains via l'utilisation de données numériques d'élévation, disponibles et facilement accessibles. Des conditions aux limites variées peuvent être utilisées ainsi que des conditions météo impliquant des profils de vitesse, température et pression complexes variant avec l'altitude. Le modèle n'est basé que sur la physique et se veut être un outil de diagnostic permettant d'apporter des réponses quantitatives rapides.

Dans le but d'améliorer la qualité de nos simulations, de nombreuses évolutions sont à envisager, notamment dans la précision des termes sources utilisés et dans le traitement des obstacles internes :

- La prise en compte d'obstacles d'orientations arbitraires est un point important à considérer et ce, afin de modéliser de façon précise tout type de géométrie. La difficulté principale liée à cet aspect provient de l'initialisation de ces obstacles d'orientations variées qui s'en trouverait alors complexifiée.
- Il est intéressant d'envisager l'intégration du code de calcul développé pendant ces travaux dans une plate-forme multi-échelle impliquant plusieurs codes. On disposerait ainsi de termes sources calculés par d'autres codes résolvant des modèles

multiphasiques plus complexes, améliorant la précision et la validité des simulations opérées.

- L'outil de simulation développé pourrait être utilisé dans des configurations où le milieu considéré est plus ou moins confiné (réseau de métro, cloisonnement de pièce au sein d'un même bâtiment,...).

Une autre perspective importante associée à ces travaux est liée à l'utilisation et au post-traitement des données recueillies lors des simulations. Ainsi, des modèles d'endommagement pourraient être utilisés afin de donner une indication sur les dégâts causés par une explosion. Les signaux enregistrés par les capteurs eulériens pourraient être traités afin d'estimer par exemple le pourcentage de vitres brisées ou encore l'ampleur des dégâts causés sur les infrastructures. De plus, l'utilisation de tels modèles permettrait de rendre les simulations plus réalistes en nous permettant de faire évoluer dynamiquement les surfaces de contact entre les infrastructures et le milieu environnant.

Bibliographie

- [1] Abgrall, R. (1988). *Generalization of the Roe scheme for computing flows of mixed gases at variable concentrations*. Rech. Aérop., V 6 p 31-43
- [2] Abgrall, R. (1996). *How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations : a quasi conservative approach*. Journal of Computational Physics, V 125 N 1 p 150-160
- [3] Abgrall, R. and Saurel, R. (2003). *Discrete equations for physical and numerical compressible multiphase mixtures*. Journal of Computational Physics, V 186 N0 2 p 361–396
- [4] Arya, S.P.(1999). *Air pollution meteorology and dispersion*. Oxford University Press New York.
- [5] Baer, MR and Nunziato, JW (1986). *A two-phase mixture theory for the deflagration-to-detonation transition (DDT) in reactive granular materials*, International journal of multiphase flow, V12 No 6 p 861-889 .
- [6] Bardos, C. Leroux, A.Y and Nedelec (1979). *First order quasilinear equations with boundary conditions*, Communications in partial differential equations, V4 No 9 p 1017-1034 .
- [7] Boure, JA and Delhay, JM (1982). *General equations and two-phase flow modeling*, Handbook of Multiphase Systems, V1 p 36-95 .
- [8] Bouchut, F. and James, F (1999). *Duality Solutions For Pressureless Gases, Monotone Scalar Conservation Laws, And Uniqueness*, Communications in Partial Differential Equations, V24 p 2173-2189 .
- [9] Bouchut, F. and James, F (2000). *A solution with bounded expansion rate to the model of viscous pressureless gases*, SIAM Journal on Mathematical Analysis, V32 No 1 p 172-193 .
- [10] Brenier, Y. and Grenier, E. (1998). *Sticky particles and scalar conservation laws*, SIAM journal on numerical analysis, V35 p 2317-2328.
- [11] Briggs, G.A. (1974). *Diffusion estimation for small emissions*. JIN : 1973 Annual report, National Oceanic and Atmospheric Administration, OAK Ridge, Tenn. Air Ressources Atmospheric Turbulence And Diffusion Lab.
- [12] Chapman, S. and Cowling, T.G. (1991). *The mathematical theory of non-uniform gases : an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases*, Cambridge Univ Pr

- [13] Chertock, A. and Kurganov, A. and Rykov, Y. (2007). *A new sticky particle method for pressureless gas dynamics*, SIAM journal on numerical analysis, V45 No 6 p 2408-2441.
- [14] Clift, R. and Grace, JR and Weber, ME (1978). *Bubbles, drops, and particles*. Academic Press (New York).
- [15] Colella, P. Graves, D.T. Keen, B.J. and Modiano, D. (2006). *A Cartesian grid embedded boundary method for hyperbolic conservation laws*. Journal of Computational Physics, V 211 N0 1 p 347–366
- [16] Courant, R. and Friedrichs, K. and Lewy, H. (1967). *On the partial difference equations of mathematical physics*. IBM Journal of Research and Development, V 11 N0 2 p 215-234
- [17] Daniel, E. Saurel, R. Larini, M. and Loraud, JC (1993). *A comparison between centered and upwind schemes for two-phase compressible flows*, AIAA, SAE, ASME, and ASEE, Joint Propulsion Conference and Exhibit, 29 th, Monterey, CA
- [18] Daniel, E. Saurel, R. Larini, M. and Loraud, JC (1994). *A multiphase formulation for two phase flows*, International Journal of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow, V4 No 3, p 269-280.
- [19] Davenport, AG, (1965). *The relationship of structure to wind loading*. JWind effects on buildings and structures : proceedings of the conference held at the National Physical Laboratory, Teddington, Middlesex, on 26th, 27th and 28th June, 1963 V 1 p 53
- [20] De Marrais, G.A (1959). *Wind-Speed Profiles at Brookhaven National Laboratory*. Journal of Atmospheric Sciences V 16 p 181-190
- [21] Doury, A. (1976). *Une méthode de calcul pratique et générale pour la prévision numérique des pollutions véhiculées par l'atmosphère*. Centre d'études nucléaires de Saclay
- [22] Drew, D.A. and Passman, S.L. (1999). *Theory of multicomponent fluids*, Springer .
- [23] Dubois, F. and Le Floch, P.(1988). *Boundary conditions for nonlinear hyperbolic systems of conservation laws*. Journal of Differential Equations, V71 No 1, p 93-122 V 1 p 53
- [24] Ferziger, J.H. and Kaper, H.G. (1972). *The mathematical theory of non-uniform gases : an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction, and diffusion in gases*, North Holland
- [25] Frost, D. L. Goroshin, S. and Zang, F. (2011). *Jet formation during explosive particle dispersal*, Proceedings.
- [26] Giovangigli, V. (1999). *Multicomponent flow modeling*, ISBN 0817640487, Birkhauser
- [27] Godlewski, E. and Raviart, P.A (1996). *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*. Applied Mathematical Sciences, V 118, Springer

BIBLIOGRAPHIE

- [28] Godunov, S.K. (1959). *A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics*. Matematicheskii Sbornik, V 89 N0 3 p 271–306
- [29] Hank, S. Saurel, R. and Le Metayer, O. (2011). *A Hyperbolic Eulerian Model for Dilute Two-Phase Suspensions*, Journal of Modern Physics, N 2, p 997-1011.
- [30] Hanna, S.R. and Briggs, G.A. and Hosker Jr, R.P.(1982). *Handbook on atmospheric diffusion*. National Oceanic and Atmospheric Administration, Oak Ridge, TN (USA). Atmospheric Turbulence and Diffusion Lab.
- [31] Harten, A. and Osher, S. (1987). *Uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. I*. SIAM Journal on Numerical Analysis, V 24 N0 2 p 279-309
- [32] Harten, A. Engquist, B. Osher, S. Chakravarthy, S.R. (1987). *Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III*. Journal of Computational Physics, V 71 N0 2 p 231-303
- [33] Heibig, A. (1994). *Existence and uniqueness of solutions for some hyperbolic systems of conservation laws*. Archive for rational mechanics and analysis, V 126 N0 1 p 79-101
- [34] Higton, R.L. (1986). *Initial-Boundary Value Problems for Linear Hyperbolic System*. JSIAM review, V 28 N0 2 p 177-217
- [35] Hishida, K., Kaneko, K. and Maeda, M. (1985). *Turbulence Structure of A Gas-solid Two-phase Circular Jet*. Trans. JSME vol 51, p 2330–2337 *In Japanese*.
- [36] Jiang, G.S. and Shu, C.W. (1996). *Efficient Implementation of Weighted ENO Schemes*. Journal of Computational Physics, V 126 N0 1 p 202-228
- [37] Johansen, H. and Colella, P. (1998). *A Cartesian grid embedded boundary method for Poisson's equation on irregular domains*. Journal of Computational Physics, V 147 N0 1 p 60–85
- [38] Jourdan G., Biamino L. Mariani, C. Houas, L. Massol, A. Igra, O. (2009). *Experimental study of the mitigation of a shock wave through a system of plates*, Proceedings of the 27th International Symposium on Shock Waves, Saint-Petersbourg, Russia, July 2009.
- [39] Karni, S. (1994). *Multicomponent flow calculations by a consistent primitive algorithm*. Journal of Computational Physics, V 112 N0 1 p 31–43
- [40] Korsakissok, I. and Mallet, V. (2009). *Comparative study of Gaussian dispersion formulas within the Polyphemus platform : evaluation with Prairie Grass and Kincaid experiments*. Journal of applied meteorology and climatology, V 48, N0 12 p 2459–2473
- [41] Koshelev, E.A. (1973). *About flow stability of incompressible fluid in a ring under action of a internal pressure*, Dynamics of continuum media, v. 13, pp.57-65
- [42] Kuznetsov, V. M. and Sher, E. N. (1964). *Stability of flow of an ideal incompressible liquid in a cavity and ring*, J. Applied Mech. and Technical Physics, N 2

- [43] Launder, BE and Spalding, DB (1974). *The numerical computation of turbulent flows*. Computer methods in applied mechanics and engineering, V3, N0 2 p 269-289
- [44] Lax, P.D. (1954). *Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation*, Communications on Pure and Applied Mathematics, V7 No 1 p 159-193.
- [45] Lax, P.D. (1973). *Hyperbolic systems of conservation laws and the mathematical theory of shock waves*, Society for Industrial and Applied Mathematics (Philadelphia)
- [46] Le Métayer, O. Massoni, J. and Saurel, R. (2005). *Modelling evaporation fronts with reactive Riemann solvers*. Journal of Computational Physics, V 205 N0 2 p 567–610
- [47] Le Metayer, O. Massol, A. Favrie, N. and Hank, S. (2011). *A discrete model for compressible flows in heterogeneous media*. Journal of Computational Physics, V 230 N0 7 p 2470–2495
- [48] Lewellen, WS and Teske, ME (1976). *Second-order closure modeling of diffusion in the atmospheric boundary layer*. Boundary-Layer Meteorology, V10, N0 1 p 69-90
- [49] Liu, X.D. Osher, S. and Chan, T. (1994). *Weighted essentially non-oscillatory schemes*. Journal of Computational Physics, V 115 N0 1 p 200-212
- [50] Marble, F.E. (1970). *Dynamics of dusty gases*, Annual Review of Fluid Mechanics, V2 No 1 p 397-446.
- [51] Parrish, C. Worland, I. (2012). *Dynamic jet formation from mitigation materials* , 28 th International Symposium on Shock waves, Volume 2, p108-113, Springer
- [52] Pasquill, F. (1961). *The estimation of the dispersion of windborne material*. Meteorologicale Magazine, V 90 N0 1063 p 33-49
- [53] Pasquill, F. (1976). *atmospheric dispersion parameters in gaussian plume modeling. part II : posible, requirements for change in the Turner workbook valves*. Springfield ; NTIS, 1976, microficha
- [54] Petersen, WB (1978). *User's Guide for PAL-A Gaussian Plume Algorithm for Point, Area and Line Source..* EPA Publication. EPA-600/4-78-013, Office of Research and Development, Research Triangle Park, NC
- [55] Plesset, MS (1954). *On the stability of fluid flows with spherical symmetry*. Journal of Applied Physics, V 25 N0 1 p 96-98 .
- [56] Pope, S.B. (2000). *Turbulent flows*. Cambridge, UK : Cambridge University Press
- [57] Rose, TA and Smith, PD. (2002) *Influence of the principal geometrical parameters of straight city streets on positive and negative phase blast wave impulses*. International Journal of Impact Engineering ,Vol. 27, No 4, p 359-376.
- [58] Rudinger, G. (1965). *Some effects of finite particle volume on the dynamics of gas-particle mixtures*, AIAA journal, V3 No 7 p 1217-1222 .
- [59] Rudinger, G. (1973). *Aérothermochimie des suspensions*, Mémoire de science physiques, Gauthier-Villars.
- [60] Sagaut, P. (2006). *Large eddy simulation for incompressible flows : an introduction*. Springer Verlag

BIBLIOGRAPHIE

- [61] Saurel, R. Daniel, E. and Loraud, C. (1994). *Two-phase flows : second-order schemes and boundary conditions*, AIAA journal, N 32, p 1214-1021.
- [62] Saurel, R. and Abgrall, R. (1999). *A multiphase Godunov method for compressible multifluid and multiphase flows*. Journal of Computational Physics, V 150 N 2 p 425-467
- [63] Saurel, R. and Lemetayer, O. (2000). *A multiphase model for compressible flows with interfaces, shocks, detonation waves and cavitation*, Journal of Fluid Mechanics, V431 p 239-271. Cambridge University Press
- [64] Saurel, R. and Gavriluk, S. and Renaud, F. (2003) *A multiphase model with internal degrees of freedom : application to shock-bubble interaction*, Journal of Fluid Mechanics, V 495 ,N 1, p 283-321
- [65] Saurel, R. Chinnayya, A. and Renaud, F. (2003) *Thermodynamic analysis and numerical resolution of a turbulent-fully ionized plasma flow model*, Shock Waves, V 13 ,N 4, p 283-297
- [66] Saurel, R. and Petitpas, F. and Berry, R.A. (2009). *Simple and efficient relaxation methods for interfaces separating compressible fluids, cavitating flows and shocks in multiphase mixtures*. Journal of Computational Physics, V 228 N 5 p 1678-1712
- [67] R. Saurel et al (2011). *Amélioration de la plateforme CHYMERE : Détonation et post-combustion d'explosifs et de particules métalliques*.
- [68] Schiller,L and Naumann, Z (1933). *A drag coefficient correlation*. Vdi Zeitung 77. p 318-320
- [69] Shu, C.W. (1998). *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*. Advanced numerical approximation of non-linear hyperbolic equations. p325-432
- [70] Sportisse, B (2007). *Pollution atmosphérique : des processus à la modélisation*. Springer France Editions
- [71] Thevand, N. (1999). *Contribution à l'étude numérique des écoulements instationnaires et visqueux de mélanges gaz-particules dilués*. Thèse
- [72] Titarev, VA and Toro, E.F. (2002). *ADER : Arbitrary high order Godunov approach*. Journal of Scientific Computing, V 17 N0 1 p 609-618
- [73] Toro, E.F. Spruce, M. and Speares, W. (1994). *Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver*. Shock waves, V 4 N0 1 p 25-34
- [74] Toro, E.F (1997) *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics : a practical introduction*. Springer-Verlag
- [75] Toro, E.F. Millington, RC and Nejad, LAM. (2001). *Towards very high order Godunov schemes*. Godunov Methods. Theory and Applications, Kluwer/Plenum Academic Publishers, p 905-938
- [76] Touma, JS (1977). *Dependence of the wind profile power law on stability for various locations..* Air Pollution Control Association, Journal, NC, V 27 N0 9 p 863-866

- [77] Trelat, S. (2006) *Impact de fortes explosions sur les bâtiments représentatifs d'une installation industrielle*. Thèse
- [78] Tsuji, Y., Morikawa, Y., Tanaka, T., Karimine, K. and Nishida, S. (1988). *Measurement of an axisymmetric jet laden with coarse particles*. International Journal of Multiphase Flow, Vol 14. p 565–574.
- [79] Turner, D.B. (1964). *A Diffusion Model for an Urban Area*. Journal of Applied Meteorology, V 2 N0 1 p 83-91
- [80] Verhaegen, J. (2011). *Modélisation multiphasique d'écoulements et de phénomènes de dispersion issus d'explosion*. Thèse
- [81] Wilcox, D.C.(1988). *Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models*. AIAA journal, V26, N0 11 p 1299-1310
- [82] Witlox, HWM and Holt, A.(2000). *Unified Dispersion Model*. Technical Reference Manual, Version 6
- [83] Yang, G. Causon, DM. and Ingram, DM. (2000). *Calculation of compressible flows about complex moving geometries using a three-dimensional Cartesian cut cell method*. International journal for numerical methods in fluids, V 33 N0 8 p 1121–1151
- [84] Yee, HC. (1981). *Numerical approximation of boundary conditions with applications to inviscid equations of gas dynamics*. NASA, technical memorandum 81285
- [85] Zel'Dovich, Y.B. (1970). *Gravitational instability : An approximate theory for large density perturbations.*, Astronomy and astrophysics, V5 p 84-89.

Annexe A

Production d'Entropie due aux Termes de Diffusion Massique

Nous allons évaluer le terme de production d'entropie du à la présence de termes de diffusion massique dans le système d'équations. Ce terme peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\dot{s} = -\frac{P}{T} \sum_{k=1}^N \frac{\mathbf{F}_k \mathbf{d}_k}{\rho_k} = -\frac{P}{T} \sum_{k=1, l=1}^N \frac{C_{k,l}}{\rho_k} \mathbf{d}_l \mathbf{d}_k$$

Cependant, cette dernière relation ne nous permet pas de conclure sur le signe de $\dot{s}$. Plaçons nous dans le cadre d'un mélange gazeux contenant 3 espèces distinctes. Alors le terme de production d'entropie s'écrit :

$$\dot{s} = -\frac{CP}{T} \left\{ \frac{\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_3}{\rho_1} + \frac{\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_3}{\rho_2} + \frac{\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_3 + \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_3}{\rho_3} \right\}$$

Nous allons premièrement exprimer $\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_3$:

$$\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_3 = \mathbf{d}_1 (\mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_3) = \left(\frac{\nabla P_1}{P} - Y_1 \frac{\nabla P}{P} \right) \left(\frac{\nabla P_2 + \nabla P_3}{P} - (Y_2 + Y_3) \frac{\nabla P}{P} \right) \quad (\text{A.1})$$

Considérons maintenant le fait que les espèces 2 et 3 forment un mélange indépendant. Avec les définitions suivantes :

$$P_2 + P_3 = P_{m_{23}} \quad \text{et} \quad Y_2 + Y_3 = Y_{m_{23}}$$

On peut maintenant réécrire l'expression (A.1) :

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1 (\mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_3) &= \left(\frac{\nabla P_1}{P} - Y_1 \frac{\nabla P}{P} \right) \left(\frac{\nabla P_{m_{23}}}{P} - Y_{m_{23}} \frac{\nabla P}{P} \right) \\ &= \frac{1}{P^2} (\nabla P_1 - Y_1 \nabla P) (\nabla P_{m_{23}} - Y_{m_{23}} \nabla P) \\ &= \frac{1}{P^2} \{ \nabla P_1 \nabla P_{m_{23}} - Y_{m_{23}} \nabla P_1 \nabla P - Y_1 \nabla P_{m_{23}} \nabla P + Y_{m_{23}} Y_1 (\nabla P)^2 \} \end{aligned}$$

A. Production d'Entropie due aux Termes de Diffusion Massique

Utilisons maintenant la loi de Dalton pour la pression :

$$P = P_{m_{23}} + P_1$$

On peut alors écrire :

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1(\mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_3) &= \frac{1}{P^2} \{ \nabla P_1 \nabla P_{m_{23}} (1 - Y_1 - Y_{m_{23}}) - Y_{m_{23}} (\nabla P_1)^2 - Y_1 (\nabla P_{m_{23}})^2 + Y_{m_{23}} Y_1 (\nabla P)^2 \} \\ &= \frac{1}{P^2} \{ -Y_{m_{23}} (\nabla P_1)^2 - Y_1 (\nabla P_{m_{23}})^2 + Y_{m_{23}} Y_1 (\nabla P_{m_{23}} + \nabla P_1)^2 \} \\ &= \frac{1}{P^2} \{ Y_{m_{23}} (\nabla P_1)^2 (Y_1 - 1) + Y_1 (\nabla P_{m_{23}})^2 (Y_{m_{23}} - 1) + 2Y_{m_{23}} Y_1 \nabla P_1 \nabla P_{m_{23}} \} \\ &= \frac{1}{P^2} \{ -Y_{m_{23}}^2 (\nabla P_1)^2 - Y_1^2 (\nabla P_{m_{23}})^2 + 2Y_{m_{23}} Y_1 \nabla P_1 \nabla P_{m_{23}} \} \\ &= -\frac{1}{P^2} (Y_{m_{23}} \nabla P_1 - Y_1 \nabla P_{m_{23}})^2 \end{aligned}$$

On peut procéder de manière similaire pour le calcul de $\mathbf{d}_2 \mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 \mathbf{d}_3$ et de $\mathbf{d}_3 \mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_3 \mathbf{d}_2$. Ainsi on obtient :

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1(\mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_3) &= -\frac{1}{P^2} (Y_{m_{23}} \nabla P_1 - Y_1 \nabla P_{m_{23}})^2 \\ \mathbf{d}_2(\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_3) &= -\frac{1}{P^2} (Y_{m_{13}} \nabla P_2 - Y_2 \nabla P_{m_{13}})^2 \\ \mathbf{d}_3(\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2) &= -\frac{1}{P^2} (Y_{m_{12}} \nabla P_3 - Y_3 \nabla P_{m_{12}})^2 \end{aligned}$$

Finalement, dans le cas d'un mélange gazeux composé de trois espèces distinctes, le terme de production d'entropie peut être exprimé comme la somme de carrés :

$$\dot{s} = \frac{C}{PT} \left(\frac{(Y_{m_{23}} \nabla P_1 - Y_1 \nabla P_{m_{23}})^2}{\rho_1} + \frac{(Y_{m_{13}} \nabla P_2 - Y_2 \nabla P_{m_{13}})^2}{\rho_2} + \frac{(Y_{m_{12}} \nabla P_3 - Y_3 \nabla P_{m_{12}})^2}{\rho_3} \right) \geq 0$$

La généralisation sur un nombre arbitraire d'espèces peut être déduite du cas précédent. En effet, dans le cas de N espèces :

$$\dot{s} = -\frac{CP}{T} \sum_{k=1, l=1}^N \frac{\mathbf{d}_k}{\rho_k} \mathbf{d}_l$$

Exprimons $\sum_{k=1, l=1}^N \frac{\mathbf{d}_k}{\rho_k} \mathbf{d}_l$:

$$\sum_{k=1, l=1}^N \frac{\mathbf{d}_k}{\rho_k} \mathbf{d}_l = \frac{\mathbf{d}_1}{\rho_1} \sum_{l=1, l \neq 1}^N \mathbf{d}_l + \frac{\mathbf{d}_2}{\rho_2} \sum_{l=1, l \neq 2}^N \mathbf{d}_l + \dots + \frac{\mathbf{d}_N}{\rho_N} \sum_{l=1, l \neq N}^N \mathbf{d}_l$$

Calculons les composantes de cette somme :

$$\begin{aligned}\frac{\mathbf{d}_1}{\rho_1} \sum_{l=1, l \neq 1}^N \mathbf{d}_l &= \frac{\mathbf{d}_1}{\rho_1} (\mathbf{d}_2 + \mathbf{d}_3 + \dots + \mathbf{d}_N) \\ &= \frac{1}{\rho_1} \left(\frac{\nabla P_1}{P} - Y_1 \frac{\nabla P}{P} \right) \left(\frac{\nabla P_2 + \nabla P_3 + \dots + \nabla P_N}{P} - (Y_2 + Y_3 + \dots + Y_N) \frac{\nabla P}{P} \right)\end{aligned}$$

En considérant le cas des espèces 2 à N comme une seule espèce de pression partielle $P_{m_2, \dots, N}$ et de fraction massique $Y_{m_2, \dots, N}$, il vient :

$$\frac{\mathbf{d}_1}{\rho_1} \sum_{l=1, l \neq 1}^N \mathbf{d}_l = \frac{1}{P^2 \rho_1} (\nabla P_1 - Y_1 \nabla P) (\nabla P_{m_2, \dots, N} - Y_{m_2, \dots, N} \nabla P)$$

On se trouve donc exactement dans la situation précédente où le mélange total contenait 3 espèces. Ainsi :

$$\begin{aligned}\frac{\mathbf{d}_1}{\rho_1} \sum_{l=1, l \neq 1}^N \mathbf{d}_l &= -\frac{1}{\rho_1 P^2} (Y_{m_2, \dots, N} \nabla P_1 - Y_1 \nabla P_{m_2, \dots, N})^2 \\ &= -\frac{1}{\rho_1 P^2} \left(\nabla P_1 \sum_{l=1, l \neq 1}^N Y_l - Y_1 \sum_{l=1, l \neq 1}^N \nabla P_l \right)^2\end{aligned}$$

Nous sommes maintenant en mesure d'exprimer $\sum_{k=1, l=1}^N \frac{\mathbf{d}_k}{\rho_k} \mathbf{d}_l$:

$$\begin{aligned}\sum_{k=1, l=1}^N \frac{\mathbf{d}_k}{\rho_k} \mathbf{d}_l &= -\frac{1}{\rho_1 P^2} \left(\nabla P_1 \sum_{l=1, l \neq 1}^N Y_l - Y_1 \sum_{l=1, l \neq 1}^N \nabla P_l \right)^2 - \frac{1}{\rho_2 P^2} \left(\nabla P_2 \sum_{l=1, l \neq 2}^N Y_l - Y_2 \sum_{l=1, l \neq 2}^N \nabla P_l \right)^2 \\ &\quad - \dots - \frac{1}{\rho_N P^2} \left(\nabla P_N \sum_{l=1, l \neq N}^N Y_l - Y_N \sum_{l=1, l \neq N}^N \nabla P_l \right)^2 \\ &= -\frac{1}{P^2} \sum_{k=1}^N \frac{1}{\rho_k} \left(\nabla P_k \sum_{l=1, l \neq k}^N Y_l - Y_k \sum_{l=1, l \neq k}^N \nabla P_l \right)^2\end{aligned}$$

Finalement, le terme de production d'entropie dans le cas d'un écoulement contenant un nombre arbitraire d'espèces s'écrit :

$$\dot{s} = \frac{C}{TP} \sum_{k=1}^N \frac{1}{\rho_k} \left(\nabla P_k \sum_{l=1, l \neq k}^N Y_l - Y_k \sum_{l=1, l \neq k}^N \nabla P_l \right)^2 \geq 0$$

La création d'entropie est et demeure toujours positive ou nulle. Le second principe de la thermodynamique est satisfait, ce qui implique que le modèle est physiquement admissible.

A. Production d'Entropie due aux Termes de Diffusion Massique

Annexe B

Stabilité d'une Couche de Fluide dans le Cas Sphérique.

Nous cherchons dans cette annexe à obtenir le modèle intégral-différentiel permettant l'étude de la stabilité d'une couche de fluide dans une configuration sphérique. Etablissons préalablement l'équation d'évolution pour une sphère creuse de rayon interne $R_1(t)$ et de rayon externe $R_2(t)$ soumise à un gradient de pression.

B.1 Ecoulement de base : Cas d'une sphère creuse

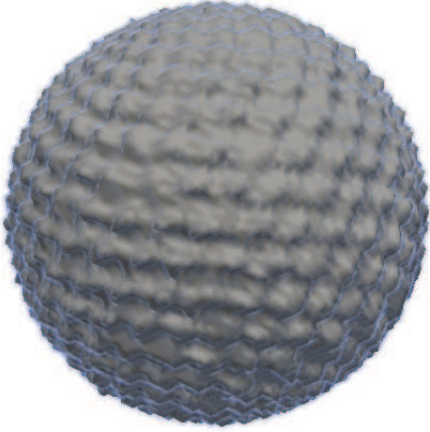


Figure B.1 – Schématisation de la sphère corruguée de rayon interne $R_1(t)$ et de rayon externe $R_2(t)$.

Soit une couche de fluide incompressible, soumise à un gradient de pression. La conservation de la masse de la couche implique la condition suivante :

$$L^3 = R_2^3(t) - R_1^3(t) = \text{const.} \quad (\text{B.1})$$

Le gaz à l'intérieur de la sphère ($r < R_1(t)$) se comporte comme un gaz polytropique et obéit à la loi des gaz parfaits. Au delà de la couche de fluide ($r > R_2(t)$), la pression correspond à la pression atmosphérique.

$$P|_{R_1} = P_0 \left(\frac{R_{01}^3}{R_1^3} \right)^\gamma \quad (\text{B.2})$$

$$P|_{R_2} = P_a \quad (\text{B.3})$$

P_0 correspond à la pression du gaz au sein de la charge. L'écoulement au sein de la couche $R_1(t) < r < R_2(t)$ est supposé irrotationnel. Un potentiel Φ satisfaisant l'équation

B. Stabilité d'une Couche de Fluide dans le Cas Sphérique.

de Laplace peut donc être défini :

$$\Delta\Phi = \frac{\partial^2\Phi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial\Phi}{\partial r} = 0$$

Cette équation a pour solution :

$$\Phi(r, t) = -\frac{R_1^2 \dot{R}_1}{r} = -\frac{R_2^2 \dot{R}_2}{r}$$

Car la conservation de la masse (relation (B.1)) implique :

$$R_1^2(t) \frac{dR_1}{dt} = R_2^2(t) \frac{dR_2}{dt}$$

L'intégrale de Bernoulli s'écrit :

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \frac{|\nabla\Phi|^2}{2} + \frac{P}{\rho} = f(t)$$

En exprimant cette intégrale au niveau des frontières de la couche, on obtient :

$$\left. \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \frac{|\nabla\Phi|^2}{2} + \frac{P}{\rho} \right|_{R_1} = \left. \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \frac{|\nabla\Phi|^2}{2} + \frac{P}{\rho} \right|_{R_2} = f(t)$$

Utilisant l'expression des pressions en $R_1(t)$ et $R_2(t)$, on obtient :

$$\left. \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \frac{|\nabla\Phi|^2}{2} + \frac{P_0}{\rho} \left(\frac{R_{10}^3}{R_1^3} \right)^\gamma \right|_{R_1} = \left. \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \frac{|\nabla\Phi|^2}{2} + \frac{P_a}{\rho} \right|_{R_2}$$

Or :

$$\frac{\partial\Phi}{\partial t} = -\frac{2R_1 \dot{R}_1^2}{r} - \frac{R_1^2 \ddot{R}_1}{r} \quad \text{et} \quad \nabla\Phi = \frac{R_1^2 \dot{R}_1}{r^2}$$

On peut alors réécrire les intégrales de Bernoulli aux frontières de la couche :

$$-2\dot{R}_1^2 - R_1 \ddot{R}_1 + \frac{\dot{R}_1^2}{2} + \frac{P_0}{\rho} \left(\frac{R_{10}^3}{R_1^3} \right)^\gamma = -\frac{2R_1 \dot{R}_1^2}{R_2} - \frac{R_1^2 \ddot{R}_1}{R_2} + \frac{1}{2} \frac{R_1^4 \dot{R}_1^2}{R_2^4} + \frac{P_a}{\rho}$$

c'est à dire :

$$R_1 \ddot{R}_1 \left(\frac{R_1}{R_2} - 1 \right) + \dot{R}_1^2 \left(-\frac{3}{2} + 2\frac{R_1}{R_2} - \frac{1}{2} \frac{R_1^4}{R_2^4} \right) + \frac{P_0 \left(\frac{R_{10}^3}{R_1^3} \right)^\gamma - P_a}{\rho} = 0. \quad (\text{B.4})$$

L'équation (B.4) correspond à l'équation d'évolution d'une sphère creuse oscillante et nous permet de calculer l'écoulement de base et ainsi d'obtenir $R_1(t)$ et $R_2(t)$.

Introduisons maintenant des perturbations dans l'écoulement de base :

$$\varphi = \Phi(r, t) + \varphi'(r, \theta, \psi, t), \quad \tilde{P} = P(r, t) + P'(r, \theta, \psi, t), \quad \tilde{R}_i = R_i(r, t) + R'_i(r, \theta, \psi, t)$$

Il faut réécrire les équations en terme de ces variables perturbées et les linéariser autour de l'écoulement de base. Ceci est l'objet de la section suivante.

B.2 Linéarisation

Nous allons linéariser les équations autour de la solution de référence calculée grâce à l'équation (B.4). Réécrivons l'intégrale de Bernoulli au sein de la couche de fluide, en supprimant les termes d'ordre élevé ainsi que les termes associés à la solution de référence :

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \frac{P'}{\rho} = 0, \quad R_1 < r < R_2$$

Sur la frontière interne, on a :

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + R_1' \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) + \frac{P'}{\rho} \Big|_{r=R_1} = 0$$

Exprimons la pression perturbée au niveau de la surface interne $P'|_{R_1}$.

$$\begin{aligned} \tilde{P} &= P_0 \left(\frac{4\pi R_{10}^3}{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \tilde{R}_1^3 \sin(\theta) d\theta d\psi} \right)^\gamma \\ P + P' &= P_0 \left(\frac{4\pi R_{10}^3}{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} (R_1^3 + 3R_1^2 R_1') \sin(\theta) d\theta d\psi} \right)^\gamma = P_0 \left(\frac{4\pi R_{10}^3}{4\pi R_1^3 + 3R_1^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_1' \sin(\theta) d\theta d\psi} \right)^\gamma \\ P + P' &= P_0 \left(\frac{R_{10}^3}{R_1^3} \right)^\gamma \left(\frac{1}{1 + \frac{3}{4\pi R_1} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_1' \sin(\theta) d\theta d\psi} \right)^\gamma \\ P + P' &\approx P_0 \left(\frac{R_{10}^3}{R_1^3} \right)^\gamma \left(1 - \frac{3\gamma}{4\pi R_1} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_1' \sin(\theta) d\theta d\psi \right) \end{aligned}$$

Ce qui nous permet de déduire P' qui s'écrit :

$$P' = P_0 \left(\frac{R_{10}^3}{R_1^3} \right)^\gamma \left(-\frac{3\gamma}{4\pi R_1} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} R_1' \sin(\theta) d\theta d\psi \right) = 0$$

Ainsi, au niveau des frontières, on a :

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + R_1' \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) \Big|_{r=R_1} = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial r} \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + R_2' \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) \Big|_{r=R_2} = 0 \quad (\text{B.6})$$

Exprimons maintenant les conditions limites cinématiques. Soit la fonction $f(r, \theta, \psi, t)$ telle que

$$f(r, \theta, \psi, t) = r - \tilde{R}_i(\theta, \psi, t).$$

La vitesse normale du fluide est égale à la vitesse des frontières au niveau des interfaces. Ceci peut se traduire par :

B. Stabilité d'une Couche de Fluide dans le Cas Sphérique.

$$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = \frac{-f_t}{|\nabla f|} \cdot \mathbf{n} = \frac{-f_t}{|\nabla f|} \implies \mathbf{v} \cdot \frac{\nabla f}{|\nabla f|} = \frac{-f_t}{|\nabla f|} \implies f_t + \mathbf{v} \cdot \nabla f = 0$$

Or, $\mathbf{v} = \nabla \tilde{\varphi}$, d'où :

$$f_t + \nabla \tilde{\varphi} \cdot \nabla f = 0$$

Avec :

$$f_t = -\dot{\tilde{R}}_i, \quad \nabla f|_{\tilde{R}_i} = \left(1, -\frac{\tilde{R}_{i\theta}}{\tilde{R}_i}, -\frac{\tilde{R}_{i\psi}}{\tilde{R}_i \sin(\theta)} \right)^t, \quad \nabla \tilde{\varphi}|_{\tilde{R}_i} = \left(\frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial r}, \frac{1}{\tilde{R}_i} \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \theta}, \frac{1}{\tilde{R}_i \sin(\theta)} \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \psi} \right)^t.$$

Ainsi :

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right|_{\tilde{R}_i} = \dot{\tilde{R}}_i + \frac{\tilde{R}_{i\theta}}{\tilde{R}_i^2} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} + \frac{\tilde{R}_{i\psi}}{\tilde{R}_i^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial \varphi}{\partial \psi} \Big|_{\tilde{R}_i} \quad \{i = 1, 2\}$$

En linéarisant cette dernière relation, on obtient :

$$\frac{\partial \varphi'}{\partial r} + R_i' \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} = \dot{R}_i' \quad i = \{1, 2\} \quad (\text{B.7})$$

Connaissant la définition de $\Phi(r, t)$, on a :

$$\begin{aligned} \Phi &= -\frac{R_1^2 \dot{R}_1}{r} = -\frac{R_2^2 \dot{R}_2}{r}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial r} = \frac{R_1^2 \dot{R}_1}{r^2} = \frac{R_2^2 \dot{R}_2}{r^2} \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} &= -\frac{2R_1^2 \dot{R}_1}{r^3} = -\frac{2R_2^2 \dot{R}_2}{r^3} \quad \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 = -\frac{4R_1^4 \dot{R}_1^2}{r^5} = -\frac{4R_2^4 \dot{R}_2^2}{r^5} \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t \partial r} &= \frac{2R_1 \dot{R}_1^2}{r^2} + \frac{R_1^2 \ddot{R}_1}{r^2} = \frac{2R_2 \dot{R}_2^2}{r^2} + \frac{R_2^2 \ddot{R}_2}{r^2} \end{aligned}$$

D'où,

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) \right|_{r=R_1} &= \ddot{R}_1 \\ \left. \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)^2 \right) \right|_{r=R_2} &= \ddot{R}_2 \end{aligned}$$

Nous sommes maintenant en mesure de réécrire les équations (B.5), (B.6) et (B.7) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left. \frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \dot{R}_1 \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \ddot{R}_1 R_1' \right|_{r=R_1} = 0 \\ \left. \frac{\partial \varphi'}{\partial t} + \dot{R}_2 \frac{\partial \varphi'}{\partial r} + \ddot{R}_2 R_2' \right|_{r=R_2} = 0 \\ \left. \frac{\partial R_1'}{\partial t} = \frac{\partial \varphi'}{\partial r} - 2R_1' \frac{\dot{R}_1}{R_1} \right|_{r=R_1} \\ \left. \frac{\partial R_2'}{\partial t} = \frac{\partial \varphi'}{\partial r} - 2R_2' \frac{\dot{R}_2}{R_2} \right|_{r=R_2} \end{array} \right. \quad (\text{B.8})$$

B.3. Solution de l'équation de Laplace

Au sein de la couche fluide, $\varphi'(r, \theta, \psi, t)$ satisfait l'équation de Laplace, qui s'écrit en coordonnées sphériques :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \varphi'}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \varphi'}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \varphi'}{\partial \psi^2} \right) = 0 \quad (\text{B.9})$$

B.3 Solution de l'équation de Laplace

On souhaite résoudre l'équation de Laplace en coordonnées sphériques (équation (B.9)). Pour cela, on utilise la méthode de séparation des variables. On cherche une solution sous la forme :

$$V(r, \theta, \psi) = f(r)\Theta(\theta)\Psi(\psi)$$

En injectant cette expression dans (B.9), on obtient :

$$\frac{1}{f} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df}{dr} \right) = -\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{1}{\Psi \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Psi}{d\psi^2}$$

Chacun des membres de gauche et de droite doit être constant, on peut alors scinder l'équation précédente en deux équations indépendantes :

$$\begin{cases} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df}{dr} \right) = C f(r) \\ \frac{\Psi}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{\Theta}{\sin^2 \theta} \frac{d^2 \Psi}{d\psi^2} = -\Theta(\theta)\Psi(\psi)C \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

Soit C une constante telle que :

$$C = \alpha(\alpha + 1)$$

Alors la solution de la première équation du système (B.10) s'écrit sous la forme :

$$\boxed{f(r) = Ar^\alpha + \frac{B}{r^{\alpha+1}}}$$

Réécrivons la seconde équation du système (B.10) après l'avoir divisée par $\Theta(\theta)\Psi(\psi)$ et multipliée par $\sin^2 \theta$:

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \alpha(\alpha + 1) \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Psi} \frac{d^2 \Psi}{d\psi^2} = m^2 \quad m \in \mathbb{Z}$$

Nous pouvons scinder cette dernière équation en deux expressions :

$$\begin{cases} \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \alpha(\alpha + 1) \sin^2 \theta - m^2 = 0 \\ \frac{d^2 \Psi}{d\psi^2} + m^2 \Psi = 0 \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

B. Stabilité d'une Couche de Fluide dans le Cas Sphérique.

La solution générale de la seconde équation du système (B.11) est la suivante :

$$\boxed{\Psi(\psi) = A_2 \cos(m\psi) + B_2 \sin(m\psi)}$$

Pour résoudre la première équation du système (B.11), on procède au changement de variable suivant :

$$x = \cos(\theta), \quad \frac{d}{d\theta}(\cdot) = \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{d}{dx}(\cdot) = -\sin\theta \frac{d}{dx}(\cdot)$$

L'équation peut alors s'écrire :

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right) + \left(\alpha(\alpha+1) - \frac{m^2}{(1-x^2)} \right) \Theta = 0$$

Les solutions physiquement admissibles sont telles que $\alpha = n \in \mathbb{N}$, soit :

$$\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{d\Theta}{dx} \right) + \left(n(n+1) - \frac{m^2}{(1-x^2)} \right) \Theta = 0$$

Cette équation a pour solution les fonctions de Legendre associées qui sont définies de la façon suivante :

$$\boxed{P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_n(x) = \left(\frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^n n!} \right) \frac{d^{(n+m)}}{dx^{(n+m)}} (x^2-1)^n} \quad \text{avec } |m| \leq n$$

Finalement, la solution générale de l'équation de Laplace en coordonnées sphériques s'écrit :

$$V(r, \theta, \psi) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(A r^n + \frac{B}{r^{n+1}} \right) \sum_{m=0}^n (A_2 \cos(m\psi) + B_2 \sin(m\psi)) P_n^m(\cos\theta) \quad (\text{B.12})$$

B.4 Equations d'amplitude

On cherche $\varphi'(t, r, \theta, \psi)$ vérifiant :

$$\varphi'(t, r, \theta, \psi) = \left(A(t)r^k + \frac{B(t)}{r^{k+1}} \right) \sin(m\psi) \tilde{P}_k^m(\cos\theta) \quad 0 < m \leq k$$

Et R'_i , $\{i = 1, 2\}$ sous la forme suivante :

$$R'_i(t, \theta, \psi) = \xi_i(t) \sin(m\psi) \tilde{P}_k^m(\cos\theta)$$

où $\tilde{P}_k^m$ représentent les fonctions de Legendre associées normalisées, c'est à dire :

$$\tilde{P}_k^m = \frac{P_k^m}{\|P_k^m\|}$$

B.4. Equations d'amplitude

Compte tenu de ces considérations, réécrivons le système (B.8) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\dot{A}(t)R_1^k + \frac{\dot{B}(t)}{R_1^{k+1}} \right) + \dot{R}_1 \left(kA(t)R_1^{k-1} - (k+1)\frac{B(t)}{R_1^{k+2}} \right) + \ddot{R}_1\xi_1(t) = 0, \quad \text{sur } R_1 \\ \left(\dot{A}(t)R_2^k + \frac{\dot{B}(t)}{R_2^{k+1}} \right) + \dot{R}_2 \left(kA(t)R_2^{k-1} - (k+1)\frac{B(t)}{R_2^{k+2}} \right) + \ddot{R}_2\xi_2(t) = 0, \quad \text{sur } R_2 \\ \dot{\xi}_1 = \left(kA(t)R_1^{k-1} - (k+1)\frac{B(t)}{R_1^{k+2}} \right) - 2\frac{\dot{R}_1}{R_1}\xi_1(t), \quad \text{sur } R_1 \\ \dot{\xi}_2 = \left(kA(t)R_2^{k-1} - (k+1)\frac{B(t)}{R_2^{k+2}} \right) - 2\frac{\dot{R}_2}{R_2}\xi_2(t), \quad \text{sur } R_2 \end{array} \right.$$

Système que l'on peut mettre sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \left(AR_1^k + \frac{B}{R_1^{k+1}} \right) + \ddot{R}_1\xi_1 = 0, \quad \text{sur } R_1 \\ \frac{d}{dt} \left(AR_2^k + \frac{B}{R_2^{k+1}} \right) + \ddot{R}_2\xi_2 = 0, \quad \text{sur } R_2 \\ kA(t)R_1^{k+1} - (k+1)\frac{B(t)}{R_1^k} = \frac{d(R_1^2\xi_1)}{dt}, \quad \text{sur } R_1 \\ kA(t)R_2^{k+1} - (k+1)\frac{B(t)}{R_2^k} = \frac{d(R_2^2\xi_2)}{dt}, \quad \text{sur } R_2 \end{array} \right. \quad (\text{B.13})$$

En combinant les deux dernières équations du système (B.8), nous pouvons exprimer $A(t)$ et $B(t)$:

$$A(t) = \frac{\frac{1}{R_2^k} \frac{d(R_1^2\xi_1)}{dt} - \frac{1}{R_1^k} \frac{d(R_2^2\xi_2)}{dt}}{k \left(\frac{R_1^{k+1}}{R_2^k} - \frac{R_2^{k+1}}{R_1^k} \right)}, \quad B(t) = \frac{R_2^{k+1} \frac{d(R_1^2\xi_1)}{dt} - R_1^{k+1} \frac{d(R_2^2\xi_2)}{dt}}{(k+1) \left(\frac{R_1^{k+1}}{R_2^k} - \frac{R_2^{k+1}}{R_1^k} \right)}$$

Utilisant ces définitions, on peut reformuler les deux premières équations du système B.13 :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \left(\frac{\left((k+1)\frac{R_1^k}{R_2^k} + k\frac{R_2^{k+1}}{R_1^{k+1}} \right) \frac{d(R_1^2\xi_1)}{dt} - (2k+1)\frac{d(R_2^2\xi_2)}{dt}}{k(k+1) \left(\frac{R_1^{k+1}}{R_2^k} - \frac{R_2^{k+1}}{R_1^k} \right)} \right) + \ddot{R}_1\xi_1 = 0, \quad \text{sur } R_1 \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{(2k+1)\frac{d(R_1^2\xi_1)}{dt} - \left((k+1)\frac{R_2^k}{R_1^k} + k\frac{R_1^{k+1}}{R_2^{k+1}} \right) \frac{d(R_2^2\xi_2)}{dt}}{k(k+1) \left(\frac{R_1^{k+1}}{R_2^k} - \frac{R_2^{k+1}}{R_1^k} \right)} \right) + \ddot{R}_2\xi_2 = 0, \quad \text{sur } R_2 \end{array} \right.$$

On effectue le changement de variables X_1 et X_2 :

$$X_1 = R_1^2\xi_1, \quad X_2 = R_2^2\xi_2$$

B. Stabilité d'une Couche de Fluide dans le Cas Sphérique.

Introduisons également les fonctions g_k , f_k et h_k :

$$\begin{aligned} g_k(R_1, L) &= \frac{R_1^{k+1}}{R_2^k} - \frac{R_2^{k+1}}{R_1^k} = \frac{R_1^{k+1}}{(L^3 + R_1^3)^{\frac{k}{3}}} - \frac{(L^3 + R_1^3)^{\frac{k+1}{3}}}{R_1^k} \\ f_k(R_1, L) &= (k+1) \frac{R_1^k}{R_2^k} + k \frac{R_2^{k+1}}{R_1^{k+1}} = (k+1) \frac{R_1^k}{(L^3 + R_1^3)^{\frac{k}{3}}} + k \frac{(L^3 + R_1^3)^{\frac{k+1}{3}}}{R_1^{k+1}} \\ h_k(R_1, L) &= (k+1) \frac{R_2^k}{R_1^k} + k \frac{R_1^{k+1}}{R_2^{k+1}} = (k+1) \frac{(L^3 + R_1^3)^{\frac{k}{3}}}{R_1^k} + k \frac{R_1^{k+1}}{(L^3 + R_1^3)^{\frac{k+1}{3}}} \end{aligned}$$

Ainsi que leur dérivées :

$$\begin{aligned} \frac{dg_k}{dt} &= \dot{R}_1 \frac{dg_k}{dR_1} = \dot{R}_1 \left(f_k - \frac{R_1^2}{R_2^2} h_k \right) \\ \frac{df_k}{dt} &= \frac{df_k}{dR_1} = g_k \frac{k(k+1)L^3}{R_2^3 R_1^2} \dot{R}_1 \\ \frac{dh_k}{dt} &= \frac{dh_k}{dR_1} = g_k \frac{k(k+1)L^3}{R_2^4 R_1} \dot{R}_1 \end{aligned}$$

Cela nous permet de réécrire le système (B.13) :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{f_k \frac{dX_1}{dt} - (2k+1) \frac{dX_2}{dt}}{g_k} \right) + k(k+1) \frac{\ddot{R}_1 X_1}{R_1^2} &= 0 \quad \text{sur } R_1 \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{(2k+1) \frac{dX_1}{dt} - h_k \frac{dX_2}{dt}}{g_k} \right) + k(k+1) \frac{\ddot{R}_2 X_2}{R_2^2} &= 0, \quad \text{sur } R_2 \end{aligned} \right.$$

Si l'on utilise le fait que :

$$\frac{\ddot{R}_2}{R_2^2} = \frac{\ddot{R}_1 R_1^2}{R_2^2} + \frac{2\dot{R}_1^2 R_1}{R_2^4} \left(1 - \frac{R_1^3}{R_2^3} \right)$$

Alors, la forme finale des équations d'amplitude est obtenue :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d^2 X_1}{dt^2} + \left(\frac{h_k \frac{df_k}{dt}}{f_k h_k - (2k+1)^2} - \frac{1}{g_k} \frac{dg_k}{dt} \right) \frac{dX_1}{dt} + \frac{(2k+1) \frac{dh_k}{dt}}{f_k h_k - (2k+1)^2} \frac{dX_2}{dt} + \frac{g_k k(k+1)}{f_k h_k - (2k+1)^2} \left(h_k \frac{\ddot{R}_1 X_1}{R_1^2} - (2k+1) \frac{\ddot{R}_2 X_2}{R_2^2} \right) &= 0 \\ \frac{d^2 X_2}{dt^2} + \left(\frac{f_k \frac{dh_k}{dt}}{f_k h_k - (2k+1)^2} - \frac{1}{g_k} \frac{dg_k}{dt} \right) \frac{dX_2}{dt} + \frac{(2k+1) \frac{df_k}{dt}}{f_k h_k - (2k+1)^2} \frac{dX_1}{dt} + \frac{g_k k(k+1)}{f_k h_k - (2k+1)^2} \left((2k+1) \frac{\ddot{R}_1 X_1}{R_1^2} - f_k \frac{\ddot{R}_2 X_2}{R_2^2} \right) &= 0 \end{aligned} \right. \quad (\text{B.14})$$

B.5 Conditions initiales

Comme pour le cas cylindrique, il est nécessaire de conserver l'aire de la sphère cor ruguée afin de pouvoir comparer les solutions obtenues. En effet, lorsque le nombre d'onde

B.5. Conditions initiales

devient très grand, la surface corruguée tend alors vers l'infini, ce qui n'a pas de sens. Nous allons calculer cette surface afin d'en déduire une condition initiale pour l'amplitude de la perturbation δ_1 .

Dans le cas sphérique, l'équation de la surface (pour la surface interne par exemple) s'écrit :

$$r(t, \theta, \psi) = R_1(t) + \xi_1(t) \sin(m\psi) \tilde{P}_k^m[\cos \theta] \quad \text{si} \quad \tilde{P}_k^m = \frac{P_k^m}{\|P_k^m\|} \quad (\text{B.15})$$

À chaque instant, l'aire de la sphère corruguée s'écrit :

$$\Pi_1(t) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left\{ r^2 \sin^2 \theta \left(r^2 + \left(\frac{\partial r}{\partial \theta} \right)^2 \right) + r^2 \left(\frac{\partial r}{\partial \psi} \right)^2 \right\}^{1/2} d\theta d\psi$$

Chaque terme peut alors être développé grâce à la relation (B.15). On effectue un développement limité de la racine carrée et les termes d'ordre ξ_1^3 sont négligés. Il reste donc à calculer,

$$\begin{aligned} \Pi_1(t) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left\{ R_1^2 \sin \theta + 2R_1 \xi_1 \sin(m\psi) \sin \theta \tilde{P}_k^m + \frac{\xi_1^2}{2} \sin^2(m\psi) \sin^3 \theta \left[(\tilde{P}_k^m)' \right]^2 \right. \\ \left. + \frac{3\xi_1^2}{2} \sin^2(m\psi) \sin \theta (\tilde{P}_k^m)^2 + \frac{m^2 \xi_1^2}{2 \sin \theta} \cos^2(m\psi) (\tilde{P}_k^m)^2 \right\} d\theta d\psi \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Calculons les termes séparément,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_1^2 \sin \theta d\theta d\psi = \boxed{4\pi R_1^2}$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi 2R_1 \xi_1 \sin(m\psi) \sin \theta \tilde{P}_k^m d\theta d\psi = \boxed{0}$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{3\xi_1^2}{2} \sin^2(m\psi) \sin \theta (\tilde{P}_k^m)^2 d\theta d\psi = \frac{3\pi \xi_1^2}{2} \int_0^\pi \sin \theta (\tilde{P}_k^m)^2 d\theta$$

Notons $X = \cos \theta$. Alors :

$$\frac{3\pi \xi_1^2}{2} \int_0^\pi \sin \theta (\tilde{P}_k^m)^2 d\theta = \frac{3\pi \xi_1^2}{2 \|P_k^m\|^2} \int_{-1}^1 (P_k^m[X])^2 dX = \frac{3\pi \xi_1^2}{2} \frac{\|P_k^m\|^2}{\|P_k^m\|^2} = \boxed{\frac{3\pi \xi_1^2}{2}}$$

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{m^2 \xi_1^2}{2 \sin \theta} \cos^2(m\psi) (\tilde{P}_k^m)^2 d\theta d\psi &= \frac{m^2 \xi_1^2 \pi}{2} \int_0^\pi \frac{(\tilde{P}_k^m)^2}{\sin \theta} d\theta = \frac{m^2 \xi_1^2 \pi}{2} \int_0^\pi \frac{(\tilde{P}_k^m)^2}{\sin^2 \theta} \sin \theta d\theta \\ &= \frac{m^2 \xi_1^2 \pi}{2} \int_{-1}^1 \frac{(\tilde{P}_k^m[X])^2}{1 - X^2} dX = \frac{m^2 \xi_1^2 \pi}{\|P_k^m\|^2} \int_0^1 \frac{(P_k^m[X])^2}{1 - X^2} dX \\ &= \frac{m \xi_1^2 \pi (k+m)! (k-m)! 2k+1}{2 (k-m)! (k+m)!} \\ &= \boxed{\frac{m \xi_1^2 \pi (2k+1)}{4}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\|P_k^m\|^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{\xi_1^2}{2} \sin^2(m\psi) \sin^3 \theta [(P_k^m)']^2 d\theta d\psi &= \frac{\xi_1^2 \pi}{2\|P_k^m\|^2} \int_0^\pi \sin^3 \theta [(P_k^m)']^2 d\theta \\ &= \frac{\xi_1^2 \pi}{2\|P_k^m\|^2} \int_0^\pi \sin \theta \left(\frac{dP_k^m}{d\theta} \right)^2 d\theta \end{aligned}$$

Or :

$$\frac{dP_k^m}{d\theta} = \frac{1}{2} \{ (k-m+1)(k+m)P_k^{m-1} - P_k^{m+1} \}$$

Ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\xi_1^2 \pi}{2\|P_k^m\|^2} \int_0^\pi \sin \theta \left(\frac{dP_k^m}{d\theta} \right)^2 d\theta &= \frac{\xi_1^2 \pi}{2\|P_k^m\|^2} \int_0^\pi \frac{1}{4} \{ (k-m+1)(k+m)P_k^{m-1} - P_k^{m+1} \}^2 \sin \theta d\theta \\ &= \frac{\xi_1^2 \pi}{8\|P_k^m\|^2} \int_{-1}^1 \{ (k-m+1)(k+m)P_k^{m-1} - P_k^{m+1} \}^2 dX. \end{aligned}$$

Finalement, l'intégrale (B.16) s'écrit :

$$\Pi(t) = 4\pi R_1^2 + \xi_1^2 \pi \left\{ \frac{3}{2} + \frac{m(2k+1)}{4} + \frac{1}{8\|P_k^m\|^2} \int_{-1}^1 \{ (k-m+1)(k+m)P_k^{m-1} - P_k^{m+1} \}^2 dX \right\}$$

Ainsi, la perturbation de la surface de la sphère est donnée par :

$$\begin{aligned} \Pi'(t) &= \Pi(t) - 4\pi R_1^2 \\ &= \xi_1^2 \pi \left\{ \frac{3}{2} + \frac{m(2k+1)}{4} + \frac{1}{8\|P_k^m\|^2} \int_{-1}^1 \{ (k-m+1)(k+m)P_k^{m-1} - P_k^{m+1} \}^2 dX \right\} \\ &= \xi_1^2 F(k, m) \end{aligned}$$

On ne parvient pas à trouver la primitive de la dernière intégrale dans le cas général (pour k et m quelconques). Nous avons donc choisi de calculer $F(k, m)$ pour différentes valeurs des nombres d'ondes k et m .

- En maintenant k constant et en faisant varier m , on peut constater que la fonction $F(k, m)$ est **indépendante** de m . Ainsi :

$$F(k, 1) = F(k, 2) = \dots F(k, i) = F(k)$$

- D'autre part, en calculant numériquement les valeurs de $F(k)$ pour différentes valeurs de k , on peut montrer que :

$$F(k) = \pi \left(\frac{3}{2} + \sum_{i=1}^k i \right) = \frac{\pi}{2} (3 + k(k+1)) \quad (\text{B.17})$$

B.5. Conditions initiales

$\Pi'(t)$ étant indépendant du nombre d'onde m , nous allons justifier l'expression (B.17) en imposant la valeur de m . Pour $m = 1$, on a :

$$\Pi'(t) = \xi_1^2 \pi \left\{ \frac{3}{2} + \frac{(2k+1)}{4} + \frac{1}{8\|P_k^1\|^2} \int_{-1}^1 \{(k)(k+1)P_k^0 - P_k^2\}^2 dX \right\}$$

Calculons l'intégrale :

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \{(k)(k+1)P_k^0 - P_k^2\}^2 dX &= \int_{-1}^1 \{(k)(k+1)P_k^0\}^2 dX + \int_{-1}^1 \{P_k^2\}^2 dX - \int_{-1}^1 2(k)(k+1)P_k^0 P_k^2 dX \\ &= \frac{2k^2(k+1)^2}{2k+1} + \frac{2}{2k+1} \frac{(k+2)!}{(k-2)!} + \frac{4k(k+1)}{2k+1} \frac{k!}{(k-2)!} \\ &= \frac{2}{2k+1} \{k^2(k+1)^2 + (k+2)(k+1)k(k-1) + 2k^2(k+1)(k-1)\} \\ &= \frac{2k(k+1)}{2k+1} \{k(k+1) + (k+2)(k-1) + 2k(k-1)\} \\ &= \frac{4k(k+1)(2k^2-1)}{2k+1} \end{aligned}$$

D'autre part,

$$\|P_k^1\|^2 = \frac{2}{2k+1} \frac{(k+1)!}{(k-1)!} = \frac{2(k+1)k}{2k+1}$$

Finalement :

$$\Pi'(t) = \xi_1^2 \pi \left\{ \frac{3}{2} + \frac{(2k+1)}{4} + \frac{2k^2-1}{4} \right\} = \xi_1^2 \pi \frac{3+k(k+1)}{2}.$$

En imposant la valeur du nombre d'onde m , nous avons bien retrouvé l'expression (B.17). On peut maintenant en déduire l'expression de la condition initiale équivalente, nous permettant de conserver la perturbation de la surface de la sphère quelle que soit la valeur de k .

$$\Pi'(t) = \xi_1^2 F(k) = \xi_1^2 \pi \frac{(3+k(k+1))}{2} = \pi \delta^2.$$

Finalement en utilisant le fait $\xi_1(0) = \delta_1$, nous obtenons la condition suivante :

$$\boxed{\delta^2 = \delta_1^2 \frac{(3+k(k+1))}{2}}$$

Cette relation nous permettra d'utiliser les conditions initiales appropriées pour l'amplitude de la perturbation associée à l'interface interne dans la cas sphérique.

Modélisation et Simulation de la Dispersion de Fluide en Milieu Fortement Hétérogène

Résumé : Ces travaux portent sur la modélisation et la simulation numérique de la dispersion de matériaux nocifs (pulvérisations liquides ou gazeuses) en milieu urbain ou naturel (attentat ou explosion accidentelle survenant en zone peuplée, fuites de produits toxiques gazeux ou liquides, éclatement de réservoir..). Afin de prédire ces risques un outils de simulation tridimensionnel a été développé. Celui-ci est basé sur un modèle de milieu hétérogène afin de traiter des phénomènes dont la durée et les distances associées peuvent être très grandes. La topographie des milieux étudiées est prise en compte grâce à des données numériques d'élévation ainsi que les conditions météo permettant l'utilisation de profils de température et de vent complexes. Les transferts de chaleur et de masse sont considérés, notamment au niveau des obstacles. Un schéma numérique d'ordre élevé en temps et en espace est utilisé pour calculer les concentrations massiques de polluants. Par ailleurs, un modèle d'écoulement gaz-particule a été développé et implémenté dans le code de calcul. L'instabilité d'une couche de fluide soumise à un important gradient de pression est également étudiée, ceci afin de mieux comprendre et de caractériser les conditions initiales à utiliser pour ce type d'écoulement, impliquant des couches de particules.

Mots clés : modèle discret, milieux hétérogènes, écoulements compressibles, dispersion, problème de Riemann.

Modeling and Numerical Simulation of Fluid Dispersion in Strongly Heterogeneous Media

Abstract : This work deals with the modeling and the numerical simulation of the dispersion of toxic cloud of droplets or gas in uneven geometry such as urban environment, industrial plants and hilly environment. Examples of phenomena under study are the dispersion of chemical products from damaged vessels, gas diffusion in an urban environment under explosion conditions, shock wave propagation in urban environment etc. A 3D simulation code has been developed in this aim. To simplify the consideration of complex geometries, a heterogeneous discrete formulation has been developed. When dealing with large scale domains, such as hilly natural environment, the topography is reconstructed with the help of numerical elevation data. Meteorological conditions are also considered, concerning temperature and wind velocity profiles. Heat and mass transfers on subscale objects, such as buildings are studied. A high order numerical scheme in space and time is used to compute mass concentration of pollutant. A two-phase model for dilute gas-particles flow has been developed and implemented in the 3D simulation code. The instability of a fluid layer appearing under high pressure gradient is also studied. This analysis allows us a better understanding of initial conditions for similar problems involving particles layer.

Key words : Discrete model, heterogeneous media, compressible flows, dispersion, Riemann problem.
