

Institut National Polytechnique de Toulouse

**THESE**

*présentée par*

**Fabien DUVAL**

*pour l'obtention du*

**GRADE DE DOCTEUR**

Spécialité : MECANIQUE ENERGETIQUE

Laboratoire d'accueil :

Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire  
Département de Recherches en Sécurité  
Service d'Etudes et de Modélisation d'Accidents de Réacteurs  
Laboratoire d'Etudes de la Dégradation de Coeur

Sujet de la thèse :

**MODELISATION DU RENOYAGE D'UN LIT DE  
PARTICULES : CONTRIBUTION A L'ESTIMATION  
DES PROPRIETES DE TRANSPORT MACROSCOPIQUES**

Soutenue le 29 Novembre 2002 devant le jury composé de :

<b>Georges BERTHOUD</b>	CEA (D.R.), INPG (Professeur), Grenoble	Rapporteur
<b>Jean-Paul CALTAGIRONE</b>	ENSCP, Université Bordeaux I (Professeur)	Rapporteur
<b>Florian FICHOT</b>	IRSN, Cadarache (Ingénieur)	Examineur
<b>Didier JAMET</b>	CEA, Grenoble (Ingénieur)	Invité
<b>Marc PRAT</b>	IMFT-INPT, Toulouse (D.R.)	Président
<b>Michel QUINTARD</b>	IMFT-INPT, Toulouse (D.R.)	Examineur
<b>Lounès TADRIST</b>	IUSTI, Marseille (D.R.)	Rapporteur



A Cathy et mes parents

pour leur exemple,  
leur amour  
et leur soutien . . .



# Remerciements

Ces trois années de thèse ont été effectuées au Département de Recherches en Sécurité de l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire. A ce titre, je tiens tout d'abord à remercier Monsieur Jean-Claude Micaelli, chef du Service d'Etudes et de Modélisation d'Accidents de Réacteurs, pour m'avoir accueilli au sein de son service ainsi que Messieurs Jean-Claude Latché et François Barré, chefs successifs du Laboratoire d'Etudes de la Dégradation de Coeur dans lequel cette étude a été menée. Je remercie plus particulièrement Monsieur Jean-Claude Latché pour les discussions enrichissantes que nous avons pu avoir ensemble et pour m'avoir fait profiter de son expérience dans le domaine des méthodes numériques.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Monsieur Michel Quintard, directeur de recherche à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, pour avoir assuré la direction scientifique de cette thèse. Ses conseils avisés ainsi que son ouverture d'esprit ont largement contribué à l'aboutissement de ce travail. J'ai pu par ailleurs apprécier au cours de notre collaboration ses qualités humaines et ses encouragements constants ont été d'un grand soutien.

Je remercie chaleureusement Monsieur Florian Fichot, ingénieur chercheur à l'IRSN, pour avoir assuré l'encadrement de ce travail. Son expérience a toujours été la source de conseils éclairés qui m'ont permis d'avancer dans mes recherches. Je le remercie par ailleurs pour la confiance qu'il m'a accordée, sa disponibilité ainsi que l'amitié qu'il m'a témoignée tout au long de ce travail.

Mes remerciements vont également à Monsieur Didier Jamet, ingénieur chercheur au CEA, pour la collaboration fructueuse que nous avons eue ensemble au cours de ce travail. J'ai pu profiter de ses connaissances approfondies dans le domaine des méthodes à interface diffuse et nos discussions à ce sujet ont été à la base de développements prometteurs. En outre, cette collaboration s'est déroulée dans une ambiance amicale que j'ai particulièrement appréciée.

Je remercie Monsieur Marc Prat, directeur de recherche à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, pour avoir assuré la présidence du jury de cette thèse. Je remercie vivement Monsieur Georges Berthoud, directeur de recherche au CEA et professeur associé à l'Institut National Polytechnique de Grenoble, Monsieur Jean-Paul Caltagirone, professeur à l'Université Bordeaux I, ainsi que Monsieur Lounès Tadriss, directeur de recherche à l'Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels, pour avoir accepté d'être rapporteurs et pour avoir porté une attention rigoureuse et critique à ce mémoire.

Je tiens à remercier l'ensemble des personnes que j'ai pu côtoyer au cours de ces trois années et qui à un moment ou à un autre m'ont apporté leur aide et leur soutien. Je remercie plus particulièrement Bruno Piar pour sa disponibilité et ses conseils avisés ainsi que son aide pour les développements menés à partir de la plate-forme PELICANS. Mes remerciements vont également aux autres membres de l'équipe PELICANS : Fabrice Babik, Lionel Chailan et Didier Vola. Enfin, je remercie l'ensemble du personnel du LEDC et du LMPC pour sa convivialité. Je tiens plus particulièrement à remercier Patrick Chatelard ainsi que Magali Zabiego pour leur gentillesse et leur bonne humeur dans tous les moments.

Je remercie enfin Cathy et mes parents pour leur amour, leurs encouragements et pour tout ce qu'ils m'ont apporté.



# Table des matières

<b>Nomenclature</b>	<b>v</b>
<b>1 Introduction générale</b>	<b>1</b>
1.1 Problématique en sûreté nucléaire . . . . .	2
1.2 De l'échelle locale à l'échelle macroscopique . . . . .	4
1.2.1 Les différentes échelles du problème . . . . .	4
1.2.2 Changement d'échelle et description macroscopique . . . . .	4
1.3 Modélisation macroscopique des transferts de chaleur . . . . .	6
1.3.1 Modèles à une température . . . . .	6
1.3.2 Modèles à non équilibre thermique local . . . . .	10
1.4 Simulation numérique directe à l'échelle locale . . . . .	14
1.4.1 Intérêts de la simulation numérique directe . . . . .	14
1.4.2 Simulation numérique directe des écoulements diphasiques . . . . .	15
1.5 Motivations et objectifs de l'étude . . . . .	18
<b>2 Modèle à non équilibre thermique local</b>	<b>21</b>
2.1 Problème à l'échelle locale . . . . .	22
2.1.1 Position du problème et hypothèses . . . . .	22
2.1.2 Equations de transport à l'échelle locale . . . . .	24
2.2 Equations de continuité des phases liquide et vapeur . . . . .	26
2.2.1 Prise de moyenne volumique . . . . .	26
2.2.2 Forme macroscopique des équations de continuité . . . . .	27
2.3 Equations de conservation des énergies . . . . .	28
2.3.1 Prise de moyenne volumique . . . . .	28
2.3.2 Fermeture des équations macroscopiques . . . . .	32
2.3.3 Problèmes de fermeture . . . . .	41
2.3.4 Forme fermée des équations macroscopiques . . . . .	45
2.3.5 Forme fermée du taux d'évaporation . . . . .	50
2.3.6 Liens vers les modèles à deux et une équation . . . . .	54
2.4 Conclusions . . . . .	57
<b>3 Propriétés effectives : cellules unitaires simples</b>	<b>59</b>
3.1 Caractéristiques des problèmes de fermeture . . . . .	60
3.2 Cellule unitaire stratifiée . . . . .	62
3.2.1 Vitesses de Darcy dans les strates . . . . .	64
3.2.2 Propriétés effectives . . . . .	68
3.3 Cellule unitaire de Chang . . . . .	75
3.3.1 Coefficients d'échange - Cas cylindrique . . . . .	76
3.3.2 Coefficients d'échange - Cas sphérique . . . . .	77

3.4	Influence de la répartition des phases sur les températures . . . . .	78
3.4.1	Configuration SLG : liquide mouillant . . . . .	79
3.4.2	Configuration SGL : vapeur mouillante . . . . .	82
3.5	Expériences numériques . . . . .	83
3.5.1	Simulation du problème à l'échelle locale . . . . .	84
3.5.2	Modèle macroscopique . . . . .	86
3.5.3	Expériences numériques de chauffage et de relaxation vers l'équilibre . . . . .	88
3.6	Simplification du modèle à trois températures . . . . .	89
3.7	Conclusions . . . . .	93
<b>4</b>	<b>Simulation numérique directe</b>	<b>95</b>
4.1	Méthodes à interfaces diffuses . . . . .	96
4.1.1	Méthode mettant en jeu un fluide pur : théorie du second gradient . . . . .	96
4.1.2	Méthodes mettant en jeu un fluide binaire : modèles de Cahn-Hilliard . . . . .	98
4.1.3	Discussion sur ces méthodes . . . . .	99
4.1.4	Choix d'une méthode . . . . .	100
4.2	Mélange de deux fluides du second gradient . . . . .	102
4.2.1	Equations de transport du mélange . . . . .	103
4.2.2	Conditions d'équilibre . . . . .	104
4.2.3	Formes conservative et potentielle des équations du mouvement . . . . .	105
4.2.4	Tension interfaciale . . . . .	106
4.3	Cas des mélanges incompressibles . . . . .	107
4.3.1	Modèle quasi-incompressible . . . . .	108
4.3.2	Modèle Boussinesq . . . . .	111
4.3.3	Interfaces planes en équilibre . . . . .	112
4.4	Résolution numérique du modèle Boussinesq . . . . .	114
4.4.1	Discrétisation temporelle . . . . .	114
4.4.2	Discrétisation spatiale : méthode éléments finis . . . . .	119
4.5	Applications . . . . .	123
4.5.1	Bulle en équilibre . . . . .	124
4.5.2	Instabilités de Rayleigh-Taylor . . . . .	128
4.5.3	Lignes de contact . . . . .	130
4.5.4	Coalescence de deux bulles . . . . .	133
4.6	Conclusions . . . . .	135
<b>5</b>	<b>Propriétés effectives : cellules unitaires 2D</b>	<b>137</b>
5.1	Résolution numérique des problèmes de fermeture . . . . .	138
5.1.1	Forme instationnaire . . . . .	138
5.1.2	Discrétisation temporelle . . . . .	140
5.1.3	Discrétisation spatiale : méthode éléments finis . . . . .	141
5.2	Validation . . . . .	142
5.2.1	Cellule unitaire stratifiée . . . . .	142
5.2.2	Cellule 2D périodique associée à la cellule de Chang . . . . .	143
5.3	Cellules unitaires 2D : cas purement diffusif . . . . .	145
5.3.1	Répartition des phases pour un arrangement de cylindres décalés . . . . .	146
5.3.2	Coefficients d'échange . . . . .	146
5.4	Influence du Péclet . . . . .	150
5.4.1	De la simulation numérique directe aux propriétés effectives . . . . .	151
5.4.2	Cellules unitaires . . . . .	152

5.4.3	Coefficients d'échange . . . . .	154
5.5	Conclusions . . . . .	161
<b>6</b>	<b>Conclusion générale et perspectives</b>	<b>163</b>
	<b>Annexes</b>	<b>167</b>
<b>A</b>	<b>La méthode de prise de moyenne volumique</b>	<b>169</b>
A.1	Notations et définitions . . . . .	169
A.2	Propriétés . . . . .	171
<b>B</b>	<b>Problème de conduction hétérogène</b>	<b>173</b>
<b>C</b>	<b>Problèmes de fermeture</b>	<b>175</b>
<b>D</b>	<b>Rappels de thermodynamique classique des mélanges</b>	<b>179</b>
D.1	Potentiels thermodynamiques . . . . .	179
D.1.1	Energie interne . . . . .	179
D.1.2	Energie libre . . . . .	180
D.1.3	Enthalpie libre . . . . .	181
D.2	Conditions d'équilibre des phases . . . . .	181
<b>E</b>	<b>Mélange de deux fluides du second gradient</b>	<b>183</b>
E.1	Description Lagrangienne . . . . .	183
E.2	Conservation des masses . . . . .	184
E.3	Expression du Lagrangien . . . . .	185
E.4	Equations du mouvement . . . . .	185
E.4.1	Principe de Hamilton : mouvements conservatifs . . . . .	186
E.4.2	Effets dissipatifs . . . . .	189
E.5	Equations de transport du mélange . . . . .	190
E.5.1	Equation de conservation de la masse . . . . .	190
E.5.2	Equation de Cahn-Hilliard . . . . .	190
E.5.3	Equations de conservation de l'impulsion . . . . .	191
E.6	Modèles de Cahn-Hilliard pour les mélanges . . . . .	193
E.6.1	Relation de Gibbs . . . . .	194
E.6.2	Système d'équations . . . . .	194
E.6.3	Conditions d'équilibre . . . . .	195



# Nomenclature

## Lettres latines

$A_{\beta e}$	interface en entrée et en sortie du milieu pour la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ ), $m^2$
$A_{\beta\sigma}$	interface entre les phases $\beta$ et $\sigma$ ( $\beta, \sigma = s, \ell, g$ ) contenue dans le volume élémentaire représentatif, $m^2$
$\mathbf{b}_{\beta\sigma}$	vecteur de fermeture qui relie $\tilde{T}_\beta$ à $\nabla\langle T_\sigma \rangle^\sigma$ ( $\beta, \sigma = s, \ell, g$ ), $m$
$c$	fraction massique
$C_p$	capacité calorifique, $J.kg^{-1}.K^{-1}$
Ca	nombre capillaire
$\mathbf{d}_{\beta i}^\sigma$	coefficient de transport macroscopique pour $(\langle T_\beta \rangle^\beta - T^{sat})$ pour la phase $\sigma$ ( $\beta, \sigma = s, \ell, g$ ), $W.m^{-2}.K^{-1}$
$e$	énergie interne spécifique
$f$	énergie libre spécifique
$g$	enthalpie libre spécifique (ou énergie libre de Gibbs)
$\mathbf{g}$	accélération de la pesanteur, $m.s^{-2}$
$h$	enthalpie spécifique, $J.kg^{-1}$
$h_\beta^{sat}$	enthalpie spécifique de la phase $\beta$ ( $\beta = \ell, g$ ) à la température de saturation, $J.kg^{-1}$
$h_s^\circ$	enthalpie spécifique de référence de la phase $s$ , $J.kg^{-1}$
$h_{\beta i}^{\sigma\gamma}$	coefficient effectif de transfert thermique caractérisant l'échange $(\langle T_\beta \rangle^\beta - T^{sat})$ pour la phase $\sigma$ sur l'interface $A_{\sigma\gamma}$ ( $\beta, \sigma, \gamma = s, \ell, g$ ), $W.m^{-3}.K^{-1}$
$k$	conductivité thermique, $W.m^{-1}.K^{-1}$
$k_{r\beta}$	perméabilité relative pour la phase $\beta$ ( $\beta = \ell, g$ )
$K$	perméabilité absolue, $m^2$
$K$	élément fini
$\mathbf{K}_{\beta\beta}$	tenseur principal de conductivité thermique effective pour la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ ), $W.m^{-1}.K^{-1}$
$\mathbf{K}_{\beta\sigma}$	tenseur couplé de conductivité thermique effective pour la phase $\beta$ ( $\beta, \sigma = s, \ell, g$ ), $W.m^{-1}.K^{-1}$
$l_i$	vecteur de périodicité utilisé pour décrire une cellule unitaire, $m$
$\ell_\beta$	longueur caractéristique à l'échelle microscopique associée à la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ ), $m$
$L$	longueur caractéristique à l'échelle macroscopique, $m$
$\dot{m}$	taux d'évaporation, $kg.m^{-3}.s^{-1}$
$\mathbf{n}$	vecteur unitaire normal
$\mathbf{n}_{\beta\sigma}$	vecteur unitaire normal à l'interface $A_{\beta\sigma}$ , dirigé de la phase $\beta$ vers la phase $\sigma$
$p$	pression, Pa
$p_c$	$= \langle p_g \rangle^g - \langle p_\ell \rangle^\ell$ , pression capillaire, Pa
$\mathcal{P}$	pression mécanique, Pa
Pe	nombre de Péclet
Pr	nombre de Prandtl

<b>q</b>	flux de conduction thermique, $\text{W.m}^{-2}$
$r_0$	rayon du volume élémentaire représentatif, m
<b>r</b>	vecteur position, m
Re	nombre de Reynolds
$s$	entropie spécifique
$s_{\sigma i}^{\beta}$	variable de fermeture qui relie $\tilde{T}_{\beta}$ à $(\langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma} - T^{sat})$ ( $\beta, \sigma = s, \ell, g$ )
$S_{\ell}$	$= \varepsilon_{\ell}/\varepsilon$ , saturation
$t$	temps, s
<b>t</b>	vecteur unitaire tangent
$T$	température, K
$T^{sat}$	température de saturation, K
<b>T</b>	tenseur capillaire
$\mathbf{u}_{\beta\sigma}$	coefficient de transport macroscopique pour $\langle T_{\sigma} \rangle^{\sigma}$ pour la phase $\beta$ ( $\beta, \sigma = s, \ell, g$ ), $\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$
<b>v</b>	vitesse, $\text{m.s}^{-1}$
$u$	composante horizontale de <b>v</b> , $\text{m.s}^{-1}$
$v$	composante verticale de <b>v</b> , $\text{m.s}^{-1}$
$V$	volume élémentaire représentatif, $\text{m}^3$
$V_{\beta}$	volume de la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ ) contenu dans $V$ , $\text{m}^3$
<b>w</b>	vitesse de déplacement de l'interface liquide-vapeur, $\text{m.s}^{-1}$
$x$	abscisse, m
<b>x</b>	vecteur position, m
<b>x</b>	vecteur unitaire dirigé selon $x$
$y$	ordonnée, m
<b>y</b>	vecteur position, m
<b>y</b>	vecteur unitaire dirigé selon $y$
<b>z</b>	vecteur unitaire dirigé selon $z$

**Lettres grecques**

$\alpha$	$= k/\rho C_p$ , diffusivité thermique, $\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
$\Delta h$	$= h_g^{sat} - h_\ell^{sat}$ , chaleur latente de vaporisation, $\text{J.kg}^{-1}$
$\lambda$	coefficient de capillarité interne
$\gamma_\beta$	indicatrice de la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ )
$\rho$	densité, $\text{kg.m}^{-3}$
$\mu_i$	potentiel chimique de l'espèce $i$
$\mu$	potentiel chimique du mélange
$\tilde{\mu}$	potentiel chimique généralisé
$\eta$	viscosité dynamique, $\text{Pa.s}$
$\sigma$	tension interfaciale, $\text{N.m}^{-1}$
$\kappa$	mobilité
$\tau_K$	paramètre de stabilisation pour la formulation SUPG
$\boldsymbol{\tau}$	tenseur des contraintes visqueuses
$\varepsilon_\beta$	$= V_\beta/V$ , fraction volumique de la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ )
$\varepsilon$	$= 1 - \varepsilon_s$ , porosité
$\epsilon$	épaisseur d'une interface vue comme une zone de transition volumique, $\text{m}$
$\varpi_s$	puissance volumique générée dans la phase $s$ , $\text{W.m}^{-3}$
$\psi_\beta$	$= \gamma_\beta \psi$ , grandeur physique $\psi$ dans la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ )
$\langle \psi_\beta \rangle$	moyenne volumique d'une grandeur physique $\psi$ dans la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ )
$\langle \psi_\beta \rangle^\beta$	moyenne intrinsèque volumique d'une grandeur physique $\psi$ dans la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ )
$\tilde{\psi}_\beta$	$= \psi_\beta - \gamma_\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta$ , fluctuation spatiale d'une grandeur $\psi$ dans la phase $\beta$ ( $\beta = s, \ell, g$ )
$\Omega$	domaine
$\mathcal{I}_h$	triangulation du domaine $\Omega$

**Indices**

$s$	phase solide
$\ell$	phase liquide
$g$	phase vapeur
$f$	phase fluide

**Exposants**

$\star$	grandeur adimensionnée
$o$	relatif à une thermodynamique classique ( <i>i.e.</i> du premier gradient)
$ex$	grandeur en excès
$sat$	relatif à la saturation



# Liste des figures

1.1	Schématisation d'un coeur de réacteur non dégradé et fortement dégradé . . . . .	3
1.2	Illustration du fond de cuve d'un coeur dégradé : fragmentation du jet de corium liquide et lit de débris . . . . .	3
1.3	Echelles caractéristiques microscopique $\ell$ et macroscopique $L$ du problème . . . . .	5
2.1	Milieu poreux homogène à trois phases : solide $s$ , liquide $\ell$ et vapeur $g$ . . . . .	23
2.2	Modèle spatialement périodique d'un milieu poreux à trois phases . . . . .	39
2.3	Condition d'équilibre thermodynamique local et estimation du taux d'évaporation . . . . .	52
3.1	Cellule unitaire stratifiée symétrique 1D : configurations SLG et SGL . . . . .	63
3.2	Allures des profils de vitesse $u_\ell$ et $u_g$ : configurations SLG et SGL ( $\eta_{\ell g} > 1$ ) . . . . .	67
3.3	$k_{r\ell}$ , $k_{rg}$ : configuration SLG . . . . .	67
3.4	$k_{r\ell}$ , $k_{rg}$ : configuration SGL . . . . .	67
3.5	Coefficient longitudinal $(\mathbf{K}_{gg})_{xx}$ . . . . .	70
3.6	Coefficient longitudinal $(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{xx}$ . . . . .	70
3.7	Coefficients pseudo-convectifs $\left(\mathbf{d}_{\beta i}^\ell\right)_x$ dans l'équation de transport de $\langle T_\ell \rangle^\ell$ en fonction de la saturation $S_\ell$ . . . . .	72
3.8	Coefficients pseudo-convectifs $\left(\mathbf{d}_{\beta i}^g\right)_x$ dans l'équation de transport de $\langle T_g \rangle^g$ en fonction de la saturation $S_\ell$ . . . . .	72
3.9	$\langle T_\ell \rangle^\ell$ : coefficient $h = h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}$ pour l'échange $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$ . . . . .	74
3.10	$\langle T_\ell \rangle^\ell$ : coefficient $h = h_{s i}^{\ell g} + h_{s i}^{\ell s}$ pour l'échange $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$ . . . . .	74
3.11	$\langle T_g \rangle^g$ : coefficient $h = h_{g i}^{g \ell} + h_{g i}^{g s}$ pour l'échange $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$ . . . . .	74
3.12	$\langle T_g \rangle^g$ : coefficient $h = h_{s i}^{g \ell} + h_{s i}^{g s}$ pour l'échange $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$ . . . . .	74
3.13	Cellule unitaire de Chang : configurations SLG et SGL . . . . .	75
3.14	Coefficient d'échange $h_{g i}^{g \ell}$ : cas SLG, $r_1 = 0.01\text{m}$ . . . . .	78
3.15	Coefficient d'échange $h_{g i}^{g \ell}$ : cas SGL, $r_1 = 0.01\text{m}$ . . . . .	78
3.16	Problème I - SLG : inconnues de fermeture pour $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$ . . . . .	79
3.17	Problème I - SGL : inconnues de fermeture pour $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$ . . . . .	79
3.18	Problème II - SLG : inconnues de fermeture pour $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$ . . . . .	80
3.19	Problème II - SGL : inconnues de fermeture pour $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$ . . . . .	80
3.20	Problème III - SLG : inconnues de fermeture pour $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$ . . . . .	80
3.21	Problème III - SGL : inconnues de fermeture pour $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$ . . . . .	80
3.22	Cellule de Chang : solution directe du problème local . . . . .	87
3.23	Cellule stratifiée : expérience de chauffage . . . . .	89
3.24	Cellule de Chang : expérience de chauffage . . . . .	89
3.25	Cellule stratifiée : expérience de relaxation . . . . .	90
3.26	Cellule de Chang : expérience de relaxation . . . . .	90
3.27	Evolution de la saturation en fonction du temps pour l'expérience de chauffage . . . . .	90
3.28	Evolution de la saturation en fonction du temps pour l'expérience de relaxation . . . . .	90

4.1	Courants parasites associés aux deux formes potentielles - Grille $44 \times 44$ . . . . .	127
4.2	Courants parasites associés à la forme potentielle $\rho g$ - Etape de projection résolue à partir du problème de Poisson ou du problème de Darcy (algorithme d'Uzawa) - Grille $60 \times 60$ . . . . .	127
4.3	Evolutions de l'énergie cinétique discrète $\mathcal{E}_c$ en fonction du temps . . . . .	128
4.4	Evolution de l'amplitude $A$ en fonction du temps $t^* = t\sqrt{gAt/\omega}$ . . . . .	129
4.5	Instabilité de Rayleigh-Taylor. (a), (b), (c), (d) - isovaleurs du paramètre d'ordre pour $t^* = 0, 3, 4.2, 5.45$ , (e) - lignes de courant pour $t^* = 5.45$ . . . . .	130
4.6	Cavité à parois entraînées : état stationnaire . . . . .	131
4.7	Écoulement stationnaire au voisinage de la ligne de contact pour la cavité entraînée	131
4.8	Montée d'une bulle sous l'effet de la gravité dans un liquide au repos et impact sur la paroi supérieure - angle de contact de $90^\circ$ . . . . .	132
4.9	État d'équilibre après impact sur la paroi pour un angle de contact de $90^\circ$ et $45^\circ$	133
4.10	Coalescence de deux bulles initialement très proches et au repos en l'absence de gravité . . . . .	134
5.1	Triangulation $\mathcal{I}_h$ de la cellule stratifiée . . . . .	143
5.2	Evolutions du coefficient $h_{\ell i}^{\ell g}$ pour des approximations $\mathbb{IP}_1$ et $\mathbb{IP}_2$ . . . . .	143
5.3	Cellule de Chang . . . . .	144
5.4	Motif périodique associé à la cellule de Chang . . . . .	144
5.5	Triangulation $\mathcal{I}_h$ de la cellule 2D périodique associée à la cellule de Chang, $\varepsilon_\ell = 0.24$	144
5.6	Inconnue de fermeture $S$ à l'état stationnaire pour le problème I - Configuration SLG, $\varepsilon_\ell = 0.24$ . . . . .	144
5.7	Evolutions du coefficient d'échange $h_{\ell i}^{\ell g}$ pour différentes fractions volumiques . . .	145
5.8	Coefficient d'échange $h_{\ell i}^{\ell g}$ . . . . .	145
5.9	Coefficient d'échange $h_{\ell i}^{\ell s}$ . . . . .	145
5.10	Cellule unitaire représentative d'un arrangement de cylindres décalés avec deux phases mouillantes - Configuration "SGL" . . . . .	146
5.11	Triangulations $\mathcal{I}_h$ pour $\varepsilon_g = 0.1$ et $\varepsilon_g = 0.59$ - Configuration SGL . . . . .	147
5.12	Inconnue de fermeture $S$ à l'état stationnaire pour le problème I - Configurations SGL et SLG pour une saturation quasi-identique . . . . .	147
5.13	Coefficient d'échange $h_{\ell i}^{\ell g}$ . . . . .	148
5.14	Coefficient d'échange $h_{\ell i}^{\ell s}$ . . . . .	148
5.15	Coefficient d'échange $h_{g i}^{g \ell}$ . . . . .	148
5.16	Coefficient d'échange $h_{g i}^{g s}$ . . . . .	148
5.17	Coefficient d'échange $h_{s i}^{\ell g}$ . . . . .	149
5.18	Coefficient d'échange $h_{s i}^{\ell s}$ . . . . .	149
5.19	Coefficient d'échange $h_{s i}^{g \ell}$ . . . . .	149
5.20	Coefficient d'échange $h_{s i}^{g s}$ . . . . .	149
5.21	Coefficient $h = h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}$ caractérisant l'échange $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$ dans l'équation (5.29) pour $\langle T_\ell \rangle^\ell$ . . . . .	151
5.22	Coefficient $h = h_{s i}^{\ell g} + h_{s i}^{\ell s}$ caractérisant l'échange $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$ dans l'équation (5.29) pour $\langle T_\ell \rangle^\ell$ . . . . .	151
5.23	Simulation numérique directe sur une cellule unitaire associée à un arrangement de cylindres alignés - cellule "In-Line SGL". Triangulation $\mathcal{I}_h^{(1)}$ de la cellule pour la SND. (a) : configuration initiale. (b)-(i) : instantanés de l'évolution des interfaces sous l'action d'un gradient de pression moyen horizontal. (j) : état stationnaire. Nouvelle triangulation $\mathcal{I}_h^{(2)}$ incluant les contours des interfaces pour la résolution des problèmes de fermeture . . . . .	153

5.24	Cellule "In-Line SGL" : champs $S$ à l'état stationnaire. $\varepsilon_\ell = 0.33$ , $\varepsilon_g = 0.37$ , $Pe_\ell = 2480$ , $Pe_g = 8.5$ . . . . .	154
5.25	Cellule unitaire pour un arrangement de cylindres alignés - Configuration SLG .	154
5.26	Cellule unitaire pour un arrangement de cylindres alignés - Configuration SGL .	155
5.27	Cellule unitaire pour un arrangement de cylindres décalés - Configuration "SGL" .	156
5.28	Cellule "Staggered SGL" : champs $S$ à l'état stationnaire. $\varepsilon_\ell = 0.28$ , $\varepsilon_g = 0.42$ , $Pe_\ell = 286$ , $Pe_g = 8.4$ . . . . .	157
5.29	Coefficients adimensionnés $h_{\ell i}^{\ell g}$ et $h_{\ell i}^{\ell s}$ . In-Line SLG : $201 \leq Pe_\ell \leq 663$ , In-Line SGL : $258 \leq Pe_\ell \leq 4704$ . . . . .	157
5.30	Coefficients adimensionnés $h_{g i}^{g \ell}$ et $h_{g i}^{g s}$ . In-Line SLG : $7 \leq Pe_g \leq 13$ , In-Line SGL : $0.7 \leq Pe_g \leq 24$ . . . . .	158
5.31	Coefficients adimensionnés $h_{s i}^{\ell g}$ et $h_{s i}^{\ell s}$ . In-Line SLG : $201 \leq Pe_\ell \leq 663$ , In-Line SGL : $258 \leq Pe_\ell \leq 4704$ . . . . .	158
5.32	Coefficients adimensionnés $h_{s i}^{g \ell}$ et $h_{s i}^{g s}$ . In-Line SLG : $7 \leq Pe_g \leq 13$ , In-Line SGL : $0.7 \leq Pe_g \leq 24$ . . . . .	159
5.33	Coefficient adimensionné $h = h_{s i}^{g \ell} + h_{s i}^{g s}$ caractérisant l'échange ( $\langle T_s \rangle^s - T^{sat}$ ) dans l'équation pour $\langle T_g \rangle^g$ . In-Line SLG : $7 \leq Pe_g \leq 13$ , In-Line SGL : $0.7 \leq Pe_g \leq 24$	159
5.34	Coefficient $h = h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}$ caractérisant l'échange ( $\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}$ ) dans l'équation pour $\langle T_\ell \rangle^\ell$ en fonction de $Pe_\ell$ . . . . .	160
5.35	Coefficient $h = h_{g i}^{g \ell} + h_{g i}^{g s}$ caractérisant l'échange ( $\langle T_g \rangle^g - T^{sat}$ ) dans l'équation pour $\langle T_g \rangle^g$ en fonction de $Pe_g$ . . . . .	160
A.1	Volume élémentaire représentatif d'un système triphasique $s$ - $\ell$ - $g$ . . . . .	170



# Liste des tableaux

3.1	Propriétés pour la cellule stratifiée . . . . .	68
3.2	Paramètres pour les expériences numériques, $T^{sat} = 373 \text{ K}$ , $\Delta h = 2.2 \cdot 10^6 \text{ J.kg}^{-1}$ .	88
4.1	Fonction $\zeta$ pour la formulation SUPG . . . . .	122
4.2	Erreur relative $e_{\Delta\mathcal{P}}$ pour la relation de Laplace . . . . .	128
5.1	Propriétés thermiques associées aux cellules unitaires simples. . . . .	142
5.2	Paramètres pour la simulation numérique directe . . . . .	152



# Chapitre 1

## Introduction générale

Les écoulements avec changement de phase liquide-vapeur dans les milieux poreux interviennent dans de nombreux domaines de l'industrie. Dans le domaine de l'industrie thermique, ces écoulements trouvent une application importante dans l'étude et l'amélioration de la conception des échangeurs de chaleur. En effet, l'introduction d'une couche poreuse au niveau de la paroi chauffante favorise non seulement l'initiation et l'entretien du régime d'ébullition nucléée mais contribue également au rendement de l'échangeur en augmentant sa surface d'échange. Le domaine de l'industrie spatiale est également intéressé par des échangeurs thermiques compacts présentant une grande surface d'échange pour, par exemple, diminuer le gradient de température dans les satellites. Dans le domaine de l'industrie géothermique, l'étude et la prédiction des écoulements liquide-vapeur en milieux poreux jouent un rôle important dans l'élaboration et l'optimisation des procédés d'extraction de vapeur des réservoirs fracturés surchauffés. De nombreux autres domaines sont concernés comme par exemple le séchage des produits agro-alimentaires ou des déchets organiques.

Dans le domaine de l'industrie nucléaire, les écoulements liquide-vapeur en milieux poreux occupent une place importante dans les études de sûreté. Les deux principaux problèmes concernés sont le stockage souterrain de déchets radioactifs et, pour des situations accidentelles potentielles, le refroidissement d'un lit de débris dans un coeur de réacteur dégradé. Ce travail de thèse s'inscrit dans cette dernière problématique et se propose de contribuer à la description macroscopique des transferts de masse et de chaleur dans les milieux poreux surchauffés parcourus par un écoulement liquide-vapeur avec changement de phase.

Dans ce chapitre introductif, nous précisons dans un premier temps la problématique posée dans le contexte de la sûreté nucléaire. Après avoir identifié les différentes échelles de description du problème, de l'échelle du pore jusqu'à l'échelle du réacteur, nous introduisons la notion de milieu continu effectif qui consiste à représenter le milieu poreux par un milieu continu à l'échelle du réacteur caractérisé par des propriétés de transport effectives. Nous présentons ensuite une revue des différents modèles proposés dans la littérature pour la description macroscopique des transferts de chaleur. Cette présentation nous permet d'évoquer certaines limites et difficultés actuelles qui justifient la démarche suivie dans ce travail. Dans un deuxième temps, nous illustrons l'intérêt de recourir à la simulation numérique directe de l'écoulement liquide-vapeur à l'échelle du pore pour l'estimation des propriétés effectives et nous présentons quelques méthodes de simulation numérique directe. Enfin, la dernière partie de ce chapitre est consacrée aux motivations et aux objectifs de ce travail de thèse.

## 1.1 Problématique en sûreté nucléaire

Pour un coeur de réacteur à eau pressurisée en situation accidentelle, un des scénarios possibles appelé scénario LOCA (Loss Of Coolant Accident) est la perte du réfrigérant dans le circuit primaire du réacteur. Cette perte peut par exemple provenir d'un défaut d'une pompe ou d'une brèche dans le circuit primaire. Alors qu'en fonctionnement nominal, l'énergie dégagée par les réactions de fission des noyaux d'uranium est extraite par l'intermédiaire du fluide caloporteur, une situation accidentelle de type LOCA entraîne un échauffement rapide du coeur. La séquence d'événements suivant ce scénario accidentel dépend de nombreux facteurs telles que l'importance de la taille de la brèche ou bien les mesures de sécurité mises en oeuvre. Cependant, suite à l'accident de Three Mile Island [29] ainsi qu'à partir d'études expérimentales [32, 74], les étapes successives d'un scénario type sont maintenant bien identifiées.

A la suite d'une perte de réfrigérant, l'échauffement du coeur conduit dans un premier temps à une production de vapeur. Le coeur se découvre ainsi progressivement non seulement en raison de la perte d'alimentation mais aussi en raison de l'évaporation. Cet assèchement partiel de la cuve entraîne une montée en température des assemblages et conduit à l'oxydation par la vapeur des gaines contenant le combustible. La réaction d'oxydation des gaines formées par un alliage à base de zirconium (Zr) entraîne la formation d'une couche d'oxyde de zircon (ZrO<sub>2</sub>) qui modifie les propriétés mécaniques de la gaine et la rend moins résistante. Cette réaction d'oxydation contribue à la montée en température du coeur en raison de son caractère fortement exothermique (l'énergie dégagée est comparable à la puissance résiduelle). D'autre part, la présence d'un incondensable (H<sub>2</sub>) dans le circuit conduit à une diminution des échanges de chaleur.

Au cours de cette situation accidentelle, l'échauffement important du coeur entraîne le gonflement et l'éclatement des gaines ainsi que la fusion progressive du coeur. A la suite de la fusion du coeur, il se forme un mélange de matériaux fondus appelé *corium*, constitué principalement d'oxyde d'uranium (UO<sub>2</sub>), de zircon (ZrO<sub>2</sub>) et de zirconium (Zr), qui se relocalise dans les régions plus froides, précédé par une croûte solide métallique. Après une dégradation importante des crayons, les pastilles combustibles s'effondrent et s'accumulent sur la croûte solide du bain de corium. Les fragments de pastilles accumulés forment alors ce que l'on appelle un lit de débris, la taille caractéristique de ces débris est de quelques millimètres. A la suite de cette séquence, un autre type de lit de débris peut se présenter en fond de cuve. En effet, la puissance résiduelle dégagée par les produits de fission au sein des fragments de pastilles et du bain de corium liquide est une source de chaleur continue qui induit une extension du bain de corium jusqu'à une rupture partielle de la croûte solide. Les matériaux fondus peuvent alors se relocaliser vers le fond de cuve où de l'eau est encore présente et la fragmentation du jet de corium liquide au contact de l'eau résiduelle forme également un lit de débris. La taille caractéristique de ces débris peut alors être de quelques millimètres à quelques centaines de microns en cas de fragmentation fine.

Pour ces deux types de lits de débris, on peut aboutir à un assèchement partiel ou complet du coeur dégradé. La puissance résiduelle dégagée au sein des fragments de combustible peut alors être évacuée en renvoyant de l'eau. En cas d'impossibilité, les débris fondent et il se forme un bain de corium liquide à haute température difficilement refroidissable dans le fond de cuve. Le fond de cuve est alors soumis à de fortes contraintes thermiques pouvant conduire à une ablation partielle ou totale et donc sa destruction.

Dans le cadre des études de sûreté, une analyse détaillée du comportement du lit de débris s'avère être particulièrement importante. En effet, comme cela a été souligné par Mayr *et al.* [102], le refroidissement du lit de débris constitue une étape importante de la séquence accidentelle car cette étape participe à une possible limitation du processus de dégradation. Une analyse

détaillée du comportement du lit de débris et de son renoyage, en fonction des caractéristiques géométriques du milieu et du mode d'injection d'eau, est donc primordiale pour évaluer et proposer des mesures de sécurité à mettre en oeuvre au cours d'une situation accidentelle.

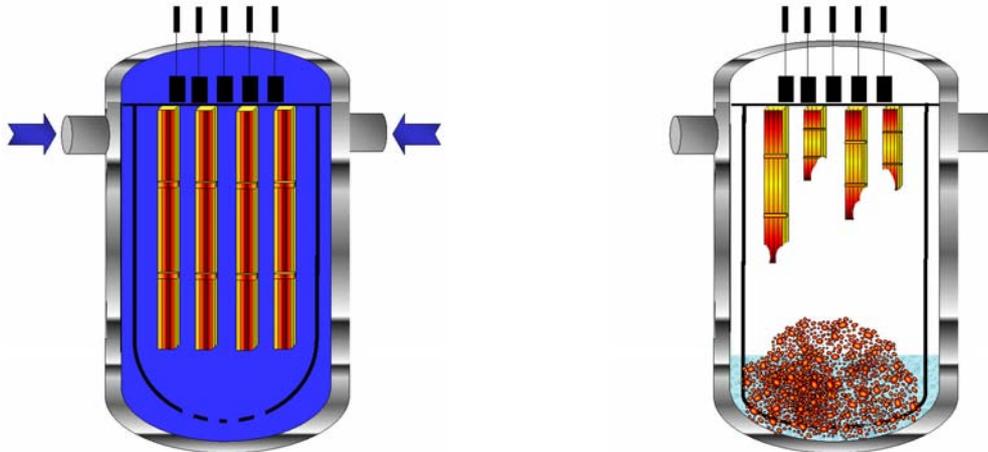


Figure 1.1: Schématisation d'un coeur de réacteur non dégradé et fortement dégradé

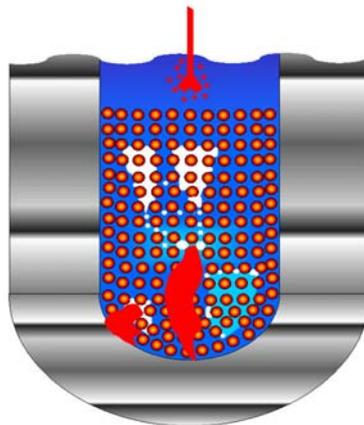


Figure 1.2: Illustration du fond de cuve d'un coeur dégradé : fragmentation du jet de corium liquide et lit de débris

Nous avons déjà signalé que la problématique posée dans le contexte de la sûreté nucléaire rentrait dans le cadre plus général des problèmes d'ébullition en milieux poreux surchauffés. Les problèmes de transport en milieux poreux sont généralement décrits à une échelle de longueur dite macroscopique bien plus grande que l'échelle caractéristique du pore. Comme nous l'avons déjà précisé, ce travail de thèse porte sur la modélisation macroscopique des transferts de masse et de chaleur dans les milieux poreux surchauffés parcourus par un écoulement liquide-vapeur avec changement de phase. La démarche menée dans ce travail permettra en particulier de prendre en compte, d'une manière claire, l'influence de la structure de l'écoulement (topologie des interfaces liquide-vapeur, régime d'écoulement, ...) sur les propriétés de transport macroscopiques. Le modèle macroscopique développé a pour objectif de contribuer au développement du code de calcul ICARE-CATHARE, qui simule les différentes phases de la dégradation accidentelle d'un réacteur. Des simulations à l'échelle du réacteur permettront ainsi d'estimer les limites de refroidissement.

dissement et d'étudier les conditions de renoyage des débris dans un coeur de réacteur en état d'endommagement avancé. Les résultats obtenus dans ce travail ne sont cependant pas restreints aux problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris mais pourront s'appliquer, comme nous le verrons plus loin, à des géométries non dégradées et à d'autres problèmes d'ébullition en milieux poreux mettant en jeu une source de chaleur et des niveaux de températures importants comme par exemple les problèmes de séchage micro-onde.

## 1.2 De l'échelle locale à l'échelle macroscopique

### 1.2.1 Les différentes échelles du problème

Les écoulements et les transferts de masse et de chaleur avec changement de phase liquide-vapeur dans les milieux poreux mettent en jeu plusieurs échelles d'observation. Dans ce travail, on distingue les deux principales échelles suivantes :

- L'échelle *microscopique*, ou échelle du pore, dont la longueur caractéristique  $\ell$  est généralement assimilée au diamètre moyen des pores ou des particules.
- L'échelle *macroscopique*, représentée par la longueur  $L$ , associée à la longueur caractéristique des phénomènes observés, correspondant ici à l'échelle du réacteur.

Dans d'autres domaines, la multiplicité des échelles peut être plus importante, c'est le cas par exemple pour les problèmes relatifs au séchage [73] et pour les études portant sur des milieux poreux fracturés telles que les extractions pétrolières [92] ou géothermiques [155]. D'une manière plus générale, ces milieux sont qualifiés de milieux poreux hétérogènes [121] dans le sens où les propriétés moyennes, telle que la porosité, présentent des hétérogénéités locales et dépendent du point considéré à l'échelle macroscopique. Dans le cadre des problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris, ces hétérogénéités peuvent par exemple provenir d'une forte variation de la taille des débris ou bien de la présence de canaux de vapeur dans la partie supérieure du lit. En effet, pour un milieu non consolidé chauffé dans son volume et pour de petites particules (*i.e.* diamètre inférieur au millimètre), Naik et Dhir [109] ont observé expérimentalement la formation de canaux de vapeur dûs à une surpression en phase vapeur qui modifie l'arrangement du milieu. Ainsi, ces hétérogénéités d'origine thermique et hydrodynamique sont caractérisées par une forte augmentation de la porosité. Evidemment l'homogénéité ou l'hétérogénéité du milieu dépend de la taille du volume élémentaire représentatif sur lequel sont définies les propriétés moyennes. Nous supposons ici qu'il existe un volume élémentaire représentatif tel que le lit de débris puisse être considéré à la grande échelle comme un milieu poreux homogène et, par conséquent, seules l'échelle du pore et la grande échelle  $L$  seront distinguées.

A l'échelle du pore, la structure de l'écoulement ainsi que la topologie des interfaces liquide-vapeur et leurs interactions avec la matrice solide (lignes de contact, détachement des bulles de vapeur des surfaces solides, ...) rendent le problème extrêmement complexe. L'ensemble des phénomènes mis en jeu à l'échelle microscopique sont à la base des phénomènes impliqués à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire à l'échelle du lit de débris. Cependant, devant la complexité du problème à l'échelle microscopique et les limitations actuelles des calculateurs, il n'est pas envisageable de résoudre directement le problème posé à l'échelle du pore.

### 1.2.2 Changement d'échelle et description macroscopique

Dans ce contexte, l'objectif du changement d'échelle est d'obtenir une description macroscopique du milieu, c'est-à-dire une description basée sur une résolution du problème à l'échelle macroscopique. La description macroscopique à partir d'un changement d'échelle est plus généralement

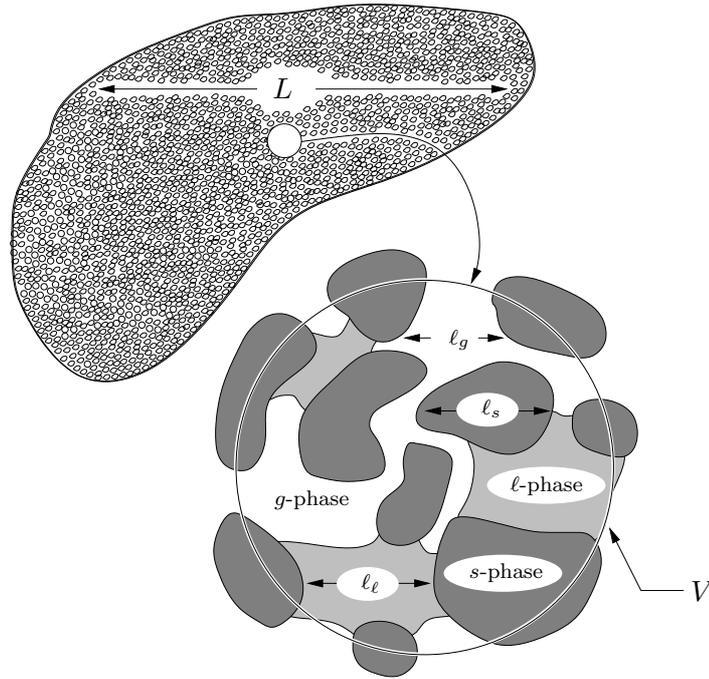


Figure 1.3: Echelles caractéristiques microscopique  $\ell$  et macroscopique  $L$  du problème

désignée par l'*approche continue* qui consiste à représenter le milieu poreux, milieu fortement hétérogène à l'échelle du pore, par un milieu continu équivalent à l'échelle macroscopique. Le milieu continu effectif est alors caractérisé par des propriétés de transport effectives, ou coefficients macroscopiques, qui traduisent la physique à l'échelle du pore. Signalons que dans le contexte nucléaire, l'approche continue n'est pas restreinte à la description des phénomènes de transport dans les lits de débris mais peut aussi être utilisée dans le cadre d'un coeur de réacteur en fonctionnement nominal, c'est-à-dire pour des géométries non dégradées, dont les différents éléments (assemblages de crayons, ...) peuvent être assimilés à un milieu poreux anisotrope.

Plusieurs méthodes ont été proposées pour réaliser le changement d'échelle. Parmi ces méthodes, on distingue les méthodes déterministes et les méthodes probabilistes ou stochastiques. Le lecteur pourra se reporter à Marle [100] pour une revue bibliographique de ces différentes approches. Dans le cadre de cette étude, nous nous sommes plus particulièrement intéressés aux méthodes déterministes telles que la méthode de prise de moyenne volumique et d'homogénéisation. Ces méthodes consistent à intégrer, sur un *volume élémentaire représentatif*, les équations de transport classiques à l'échelle du pore  $\ell$  pour obtenir les équations de transport macroscopiques à la grande échelle  $L$ .

La méthode de prise de moyenne volumique est basée sur la définition d'un opérateur de moyenne volumique qui, appliqué aux équations de transport à la petite échelle, permet d'obtenir les équations de transport à l'échelle macroscopique. Cet opérateur de moyenne est défini sur un volume de prise de moyenne appelé volume élémentaire représentatif. Comme pour toutes les méthodes d'homogénéisation, la méthode de prise de moyenne volumique repose sur une hypothèse de séparation des échelles d'observation. La longueur caractéristique  $r_0$  du volume de prise de moyenne doit être suffisamment grande devant la longueur caractéristique  $\ell$  de l'échelle du pore pour pouvoir obtenir des grandeurs moyennes significatives exemptes de fluctuations à la petite échelle, et suffisamment petite devant la longueur caractéristique macroscopique  $L$  pour pouvoir assurer une bonne résolution spatiale du milieu et une évolution continue des grandeurs moyennées à la grande échelle. En d'autres termes, la méthode de prise de moyenne volumique est basée ici sur

la contrainte de séparation des échelles :

$$\ell \ll r_0 \ll L \quad (1.1)$$

La contrainte (1.1) n'est cependant pas aussi sévère et peut être relaxée dans beaucoup de situations pratiques. En particulier, cette contrainte peut être relaxée pour les problèmes de description macroscopique des milieux poreux à porosité variable, c'est-à-dire les milieux à hétérogénéités évolutives, comme par exemple la description macroscopique des *mushy zones* [24, 65].

La méthode d'homogénéisation est également basée sur l'existence de deux échelles caractéristiques convenablement séparées, l'échelle caractéristique  $\ell$  du pore et l'échelle caractéristique macroscopique  $L$ . Pour un milieu spatialement périodique, la longueur  $\ell$  représente la période et peut être assimilée à la longueur caractéristique du volume élémentaire représentatif. La condition de séparation des échelles est caractérisée par l'introduction d'un petit paramètre  $\varepsilon$  tel que  $\varepsilon = \ell/L \ll 1$ . Les deux échelles  $\ell$  et  $L$  introduisent deux variables spatiales  $x$  et  $y$  sans dimension, la variable  $x = x/L$  désignant la variable macroscopique, ou variable lente, et la variable  $y = x/\ell$  désignant la variable microscopique, ou variable rapide. Les variables  $x$  et  $y$ , avec  $x = \varepsilon y$ , sont considérées indépendantes, traduisant ainsi la condition de séparation des échelles. La méthode d'homogénéisation consiste alors dans un premier temps à adimensionner les équations de transport à la petite échelle en utilisant la longueur caractéristique  $\ell$  comme longueur de référence. Dans un deuxième temps, les grandeurs physiques locales telles que les densités, les vitesses et les températures, sont exprimées sous la forme d'un développement asymptotique dont chaque terme est associé à un ordre du petit paramètre  $\varepsilon$  et est fonction des variables spatiales  $x$  et  $y$  et du temps  $t$ . En introduisant ces développements dans les équations de transport à la petite échelle, le processus d'homogénéisation conduit alors à une suite de problèmes aux limites obtenus en identifiant les puissances successives du petit paramètre  $\varepsilon$ . La résolution de ces problèmes conduit aux équations de transport macroscopiques et à la définition des propriétés effectives.

Certaines similitudes peuvent être observées entre la méthode d'homogénéisation et la méthode de prise de moyenne volumique bien que les grandeurs macroscopiques n'aient pas la même signification. Par exemple, les deux méthodes s'appuient sur une séparation des échelles et les propriétés effectives peuvent être estimées sur une cellule unitaire périodique représentative du milieu. On pourra se reporter à Bourgeat *et al.* [23] pour une comparaison des deux méthodes dans le cas d'un problème simplifié.

### 1.3 Modélisation macroscopique des transferts de chaleur

Il existe un nombre important de modèles macroscopiques relatifs aux transferts de chaleur avec changement de phase liquide-vapeur en milieux poreux. Ces modèles trouvent leur origine dans de nombreux domaines et présentent des caractéristiques différentes selon le type de problème étudié. L'objet de cette partie est de présenter une revue des différents modèles proposés dans la littérature et de discuter des limites et des difficultés associées. Cette présentation n'est pas restreinte aux problèmes d'ébullition en milieu poreux, elle s'appuie également sur des études menées pour des problèmes généraux de diffusion qui font apparaître des difficultés similaires au regard du changement d'échelle et pour lesquels il existe une littérature abondante.

#### 1.3.1 Modèles à une température

La description macroscopique des transferts de masse et de chaleur dans les milieux poreux constitués de trois phases gaz, liquide et solide, avec changement de phase liquide-vapeur, est souvent abordée à l'aide d'un modèle à une équation. Bien que des modèles à une équation

aient récemment été développés sans faire appel à l'hypothèse d'équilibre local [2, 106, 118], les modèles à une équation s'appuient généralement sur cette hypothèse.

L'hypothèse d'équilibre thermique local signifie que les températures macroscopiques des trois phases gaz, liquide et solide, sont suffisamment proches les unes des autres pour pouvoir être remplacées par une température macroscopique unique  $\langle T \rangle$ . Cette hypothèse conduit à un modèle à une équation et le système multiphasique est représenté par un milieu continu effectif caractérisé par une seule température macroscopique  $\langle T \rangle$ . Lorsque le transport de chaleur par convection peut être négligé dans les phases liquide et gazeuse, le modèle macroscopique à une température s'écrit sous la forme :

$$\langle \rho \rangle \langle C_p \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}^* \cdot \nabla \langle T \rangle) - \dot{m} \Delta h + \langle \varpi_s \rangle \quad (1.2)$$

où  $\mathbf{K}^*$  représente le tenseur de conductivité thermique effective,  $\dot{m}$  désigne le taux d'évaporation,  $\Delta h$  est la chaleur latente de changement de phase, et  $\varpi_s$  est une source volumique de chaleur homogène générée dans la phase solide. Dans (1.2), la notation  $\langle \rho \rangle \langle C_p \rangle$  fait référence à une capacité calorifique volumique de *mélange* définie par :

$$\langle \rho \rangle \langle C_p \rangle = \varepsilon_g (\rho C_p)_g + \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell + \varepsilon_s (\rho C_p)_s \quad (1.3)$$

où  $\varepsilon_g$ ,  $\varepsilon_\ell$  et  $\varepsilon_s$  sont les fractions volumiques des phases gazeuse, liquide et solide. Ces fractions volumiques sont reliées à la porosité  $\varepsilon$  et à la saturation  $S_\ell$  par les relations :

$$\varepsilon_s = 1 - \varepsilon, \quad \varepsilon_\ell = \varepsilon S_\ell, \quad \varepsilon_g = \varepsilon (1 - S_\ell) \quad (1.4)$$

La principale difficulté associée au modèle macroscopique (1.2) est la détermination du coefficient de transport macroscopique  $\mathbf{K}^*$  qui, comme nous l'avons signalé, traduit la physique à l'échelle du pore. De nombreuses études ont été menées sur le modèle à une température, en particulier la prise en compte des effets d'évaporation-condensation sur la conductivité thermique apparente, *i.e.* mesurée, du milieu a donné lieu à de nombreux travaux [14, 22, 49, 105, 149]. Ces effets, d'origine microscopique, sont dûs au transport en phase gazeuse de la chaleur latente de changement de phase. La chaleur latente est prélevée par évaporation du côté chaud des pores, puis transportée dans la phase gazeuse par convection, diffusion et capillarité pour être récupérée par condensation du côté froid. A l'échelle macroscopique, les mécanismes d'évaporations-condensations successives à l'échelle microscopique ne contribuent pas au transfert de masse mais se traduisent par un accroissement important de la conductivité thermique apparente. Une justification théorique du modèle macroscopique (1.2) a été donnée par Moyne *et al.* [105], dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique, et par Bouddour *et al.* [22], dans le cadre de la méthode d'homogénéisation. Les développements menés dans ces deux références, d'un modèle macroscopique de transfert couplé de chaleur et de masse à partir d'une technique de changement d'échelle, apportent une réponse claire sur la signification de la conductivité thermique apparente et la prise en compte des effets d'évaporation-condensation à l'échelle macroscopique. En particulier, les développements menés dans [105] conduisent à distinguer la conductivité thermique effective du milieu n'échangeant que par conduction de la conductivité thermique effective  $\mathbf{K}^*$ , dite *vraie*, sensible aux effets d'évaporation-condensation. Ces auteurs soulignent également que la conductivité thermique effective  $\mathbf{K}^*$  ne doit pas non plus être confondue avec la conductivité apparente du milieu qui peut être exhibée dans (1.2) en éliminant le taux d'évaporation à partir de l'équation de transport macroscopique de la fraction massique de vapeur.

Dans le cadre des études de sûreté nucléaire, l'hypothèse d'équilibre thermique local a fréquemment été adoptée pour étudier les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris

surchauffés. En particulier, de nombreux travaux ont été menés à partir de modèles stationnaires faisant l'hypothèse d'une zone diphasique quasi-isotherme pour prédire le flux critique d'assèchement et estimer les limites de refroidissement du lit de débris. Dans le cadre de ces hypothèses, le modèle macroscopique (1.2) dégénère en :

$$\dot{m} \Delta h = \langle \varpi_s \rangle \quad (1.5)$$

Bien que l'importance des effets bidimensionnels et tridimensionnels soit désormais reconnue [10, 16, 47, 54] pour ces problèmes, la plupart des modèles proposés sont unidimensionnels. Ainsi, en éliminant le taux d'évaporation à partir de l'équation de transport macroscopique de conservation de la masse de la phase gazeuse, l'intégration des équations de conservation de la masse totale (*i.e.* liquide et vapeur) et de l'énergie du modèle unidimensionnel stationnaire conduit, dans le cas d'un support imperméable, aux relations :

$$\rho_g \langle u_g \rangle + \rho_\ell \langle u_\ell \rangle = 0 \quad (1.6)$$

$$\rho_g \langle u_g \rangle \Delta h = \int_0^y \langle \varpi_s \rangle dy \equiv q \quad (1.7)$$

où  $q$  est le flux de chaleur par unité de surface à une élévation  $y$  de la colonne poreuse. En général, la source volumique  $\langle \varpi_s \rangle$  est supposée être homogène et, dans ce cas, le flux de chaleur  $q$  est donné par  $q = \langle \varpi_s \rangle y$ . En supposant valide la loi de Darcy généralisée, les vitesses superficielles  $\langle u_g \rangle$  et  $\langle u_\ell \rangle$  dans (1.6)-(1.7) sont données par :

$$\langle u_g \rangle = -\frac{K k_{rg}}{\eta_g} \left( \frac{d\langle p_g \rangle^g}{dy} + \rho_g g \right) \quad (1.8)$$

$$\langle u_\ell \rangle = -\frac{K k_{r\ell}}{\eta_\ell} \left( \frac{d\langle p_\ell \rangle^\ell}{dy} + \rho_\ell g \right) \quad (1.9)$$

où les pressions macroscopiques de la vapeur  $\langle p_g \rangle^g$  et du liquide  $\langle p_\ell \rangle^\ell$  sont habituellement reliées par la pression capillaire  $p_c$  à partir de la relation  $p_c = \langle p_g \rangle^g - \langle p_\ell \rangle^\ell$ . Dans (1.8)-(1.9),  $k_{r\ell}$  et  $k_{rg}$  désignent respectivement les perméabilités relatives des phases liquide et vapeur dans le milieu poreux, et  $K$  est la perméabilité intrinsèque, ou absolue, du milieu. Plusieurs corrélations, obtenues généralement dans le cas isotherme et sans changement de phase, ont été proposées pour les perméabilités relatives en fonction de la structure de la matrice poreuse et de la saturation  $S_\ell$  du milieu. Plusieurs corrélations, établies à partir d'expériences d'imbibition ou de drainage, ont également été proposées pour la pression capillaire. La plupart de ces corrélations représentent les perméabilités relatives en fonction de la saturation sous une forme polynomiale et la pression capillaire sous la forme d'une fonction plus ou moins complexe de la saturation. On pourra se reporter à Kaviany [88] pour une revue des corrélations les plus répandues.

En combinant les équations (1.6) à (1.9), la résolution du modèle unidimensionnel stationnaire dans la zone diphasique isotherme revient à résoudre une équation différentielle du premier ordre pour la saturation  $S_\ell$ . Pour des fonctions  $k_{r\ell}(S_\ell)$ ,  $k_{rg}(S_\ell)$  et  $p_c(S_\ell)$  données, la résolution de cette équation conduit aux valeurs de la saturation en fonction du flux de chaleur  $q$ , c'est-à-dire au profil de saturation dans la colonne poreuse pour une puissance  $\langle \varpi_s \rangle$  donnée. A partir de cette approche, il est également possible d'estimer le flux critique d'assèchement qui correspond ici à une valeur particulière du flux de chaleur  $q$ . Le flux critique d'assèchement est généralement associé à une rapide montée en température, au dessus de la température de saturation, en une certaine région du milieu poreux. Evidemment, le modèle isotherme stationnaire est incapable de reproduire une telle situation, cependant le flux critique peut être estimé à partir du critère sous-jacent de l'apparition d'une zone complètement sèche dans le milieu. Ainsi, lorsque  $y$  représente

la hauteur de la colonne poreuse, le flux critique correspond au flux de chaleur  $q$  dès que le profil de saturation dans la colonne indique une zone complètement asséchée. Dans le cas où le milieu est assez perméable, comme c'est généralement le cas pour les lits de débris, l'estimation du flux critique est encore plus simple. En effet, pour des milieux poreux constitués de particules suffisamment grosses, les effets de capillarité jouent un rôle moins important et la pression capillaire  $p_c$  peut être négligée. Dans ce cas, l'équation différentielle pour la saturation se simplifie en une équation algébrique qui peut s'écrire sous la forme d'une équation pour le flux  $q$  en fonction de la saturation. L'allure de la fonction  $q(S_\ell)$  est une parabole et, pour un milieu initialement saturé en liquide, la branche située du côté des fortes saturations correspond au profil de saturation dans la colonne pour une puissance  $\langle \varpi_s \rangle$  donnée. Dans ce cas, le flux critique d'assèchement correspond à la valeur particulière de  $q$  lorsque la fonction  $q(S_\ell)$  atteint son maximum en sortie de la colonne, c'est-à-dire lorsque  $q(S_\ell(y_{max})) = \max q(S_\ell)$  où  $y_{max}$  correspond à la hauteur du lit.

Dans le cadre des problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris, ce type de modèle a donné lieu à de nombreux développements. Ces développements ont été motivés par la forte perméabilité de ces milieux et ont porté essentiellement sur les équations du mouvement (1.8)-(1.9) en incluant des termes inertiels de type Forchheimer [98] et un terme de frottement interfacial entre les phases liquide et vapeur [133, 144]. Nous ne ferons pas ici une revue et une discussion des développements heuristiques et théoriques sur la forme macroscopique des équations du mouvement. Nous rappelons en effet que ce travail est axé principalement sur les transferts de masse et de chaleur. Nous noterons seulement que si la forme (1.8)-(1.9) de la loi de Darcy généralisée a trouvé une justification théorique à partir des méthodes de prise de moyenne volumique [94, 151] et d'homogénéisation [11] dans le régime visqueux, en revanche l'extension au régime inertiel reste, à notre connaissance, un problème ouvert d'un point de vue théorique. Il faut également noter que si l'on souhaite pouvoir traiter tous les cas d'écoulements possibles (*i.e.* co- et contre-courants), il est nécessaire d'inclure dans (1.8)-(1.9) un terme de frottement interfacial. Si ce terme a une origine claire dans le régime visqueux dans le cadre d'une approche théorique, la forme macroscopique proposée dans [133] à partir d'une approche heuristique soulève encore de nombreuses questions. En effet, comme cela a été souligné par Kaviani [88] et Mayr *et al.* [102], il est extrêmement difficile dans le cadre d'une approche heuristique de savoir si les effets de frottement interfacial ne sont déjà pas inclus dans les autres termes des équations de transport macroscopiques et, de ce fait, bien que sa présence soit indispensable pour traiter les écoulements à contre-courants en l'absence de gravité, sa forme dans le régime inertiel a de notre point de vue une portée très limitée.

Bien que l'hypothèse d'équilibre thermique local soit acceptable pour de nombreux problèmes d'écoulements liquide-vapeur avec changement de phase en milieu poreux, en particulier pour la plupart des problèmes relatifs au séchage [149], c'est la relative simplicité du modèle à une équation (1.2) au regard des coefficients de transport effectifs qui certainement motive son utilisation. Cependant, cette hypothèse requiert de nombreuses conditions [123, 126, 145, 152] et peut s'avérer trop contraignante. Par exemple, l'hypothèse d'équilibre thermique local est sérieusement remise en cause lorsque les particules, ou de manière équivalente les pores, ne sont pas suffisamment petits, lorsque les propriétés thermiques des phases diffèrent d'une manière significative ou lorsque le transport convectif devient important. De plus, lorsqu'il existe une génération de chaleur significative dans une des phases du milieu, le système peut s'éloigner très rapidement de l'équilibre thermique local [88]. Enfin, il faut également noter que l'hypothèse d'équilibre thermique local devient incertaine pour des processus rapides d'évaporation et de condensation. De plus, dans les conditions extrêmes rencontrées dans les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris des coeurs de réacteurs en situation accidentelle, la description du milieu à

partir d'un modèle à une température est inadéquate pour décrire par exemple correctement les forts déséquilibres thermiques entre les phases lors de l'initiation et de la propagation des zones d'assèchement ainsi que les transitoires associés à la pénétration d'un front de renoyage dans un milieu poreux sec et surchauffé. Ce dernier exemple est analogue au problème de la fragmentation du jet de corium liquide au contact de l'eau où de larges écarts de températures moyennes existent entre les phases et pour lequel une approche à équilibre local est incapable de décrire les transferts de chaleur [3, 19].

### 1.3.2 Modèles à non équilibre thermique local

Pour les problèmes où il n'est pas possible de faire l'hypothèse d'équilibre thermique local, le processus de transport à l'échelle macroscopique ne peut plus être correctement décrit à partir du modèle à une température (1.2). Pour ce type de problème, des modèles à non-équilibre local, appelés également modèles à plusieurs températures, ont été proposés. D'une manière générale, la principale caractéristique de ces modèles est d'associer plusieurs températures macroscopiques à un même point du milieu continu effectif afin de prendre en compte un déséquilibre thermique pouvant apparaître localement.

Pour les problèmes de transport en milieu poreux constitué de deux phases, une phase fluide notée  $f$  s'écoulant au travers d'une matrice solide notée  $s$ , des modèles à non-équilibre local ont été proposés sous la forme de modèles à deux équations caractérisés par des équations de transport macroscopiques pour chaque phase du système. Dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique, les modèles à deux équations ont été obtenus par Carbonell et Whitaker [33], Zanotti et Carbonell [156, 157], Levec et Carbonell [95] et Quintard et Whitaker [123]. Pour des problèmes purement diffusifs et sous certaines approximations, ces modèles peuvent s'écrire sous la forme :

$$\varepsilon_f (\rho C_p)_f \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{fs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) - h \left( \langle T_f \rangle^f - \langle T_s \rangle^s \right) \quad (1.10)$$

$$\varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{sf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) + h \left( \langle T_f \rangle^f - \langle T_s \rangle^s \right) \quad (1.11)$$

où  $\langle T_f \rangle^f$  et  $\langle T_s \rangle^s$  désignent les températures moyennes définies en tout point du milieu continu effectif. En d'autres termes, les deux phases sont représentées à l'échelle macroscopique par deux continuums sur lesquels sont définies en tout point les valeurs moyennes des températures locales  $T_f$  et  $T_s$  prises sur un volume élémentaire représentatif. A l'échelle macroscopique, le milieu est caractérisé par les propriétés effectives  $\mathbf{K}_{ff}$ ,  $\mathbf{K}_{fs}$ ,  $\mathbf{K}_{sf}$ ,  $\mathbf{K}_{ss}$  et  $h$ . Les tenseurs  $\mathbf{K}_{ff}$  et  $\mathbf{K}_{ss}$  représentent les tenseurs de conductivité thermique effective dits dominants associés respectivement aux phases fluide et solide,  $\mathbf{K}_{fs}$  et  $\mathbf{K}_{sf}$  sont les tenseurs couplés et  $h$  est un coefficient de transfert thermique effectif caractérisant les échanges de chaleur entre les deux phases. Des modèles à non-équilibre local ont également été proposés sous la forme de modèles à deux équations dans le cadre de la méthode d'homogénéisation, on pourra en particulier se reporter à Pernin [114] et Auriault et Lewandowska [12]. Il faut cependant noter que les développements menés dans ces références se basent sur une introduction *ad hoc* du coefficient d'échange  $h$  à l'échelle microscopique. Ce coefficient est en effet introduit au travers d'une condition aux limites mixte de type conduction-convection à l'interface séparant les deux phases et, à ce titre, ce coefficient peut difficilement être qualifié de propriété effective.

Comme pour le modèle à une équation, la principale difficulté associée au modèle à deux équations réside dans l'estimation des propriétés effectives.

Lorsque le milieu est décrit macroscopiquement à partir du modèle à une équation (1.2), seule la conductivité thermique effective  $\mathbf{K}^*$  doit être estimée et, comme cela a été indiqué par Quintard

*et al.* [119], une estimation de ce coefficient à partir d'une approche expérimentale pose déjà quelques difficultés.

Lorsque le milieu est décrit macroscopiquement à partir du modèle à deux équations (1.10)-(1.11), il faut déterminer les conductivités thermiques effectives  $\mathbf{K}_{ff}$ ,  $\mathbf{K}_{fs}$ ,  $\mathbf{K}_{sf}$  et  $\mathbf{K}_{ss}$  ainsi que le coefficient d'échange effectif  $h$  entre les deux phases et, une estimation expérimentale de ces coefficients s'avère encore plus difficile. On pourra se reporter à Levec et Carbonell [96] et Grangeot *et al.* [66] pour une illustration des principales difficultés expérimentales associées à l'estimation des propriétés effectives du modèle à deux équations. En particulier, bien que des solutions aient été proposées pour mesurer le coefficient d'échange dans le cas où les termes diffusifs pouvaient être négligés [131], il est généralement difficile d'estimer indépendamment les différents coefficients effectifs du modèle à deux équations en raison du couplage des équations de transport (1.10)-(1.11) et, dans certains cas, les résultats peuvent être imprécis ou même erronés. Il est également difficile d'estimer l'impact de certains paramètres, comme par exemple la nature et le nombre des points de contact entre les particules solides ou, dans certains cas, les variations des propriétés physiques dans l'échantillon dues aux gradients de températures, sur les coefficients de transport effectifs.

D'un autre côté, les techniques de changement d'échelle établissent un lien clair entre la physique à l'échelle du pore et la description macroscopique et, pour des modèles spatialement périodiques du milieu poreux, les propriétés effectives peuvent être estimées sur des *cellules unitaires représentatives* du milieu étudié. Dans le cas de la méthode de prise de moyenne volumique, ce lien est assuré par des problèmes aux limites locaux plus connus sous le nom de *problèmes de fermeture* et leur résolution permet d'estimer les propriétés effectives du modèle. Ces problèmes ont été résolus analytiquement sur des cellules unitaires relativement simples par Zanotti et Carbonell [157], dans le cas où le milieu poreux était représenté par un réseau de tubes capillaires, puis numériquement sur des cellules plus complexes bidimensionnelles et tridimensionnelles par Quintard et Whitaker [123] et Quintard *et al.* [119]. Les résultats issus de ces deux dernières références montrent en particulier que l'utilisation de corrélations basées sur des approximations de type couche limite n'est généralement pas adaptée pour l'estimation des propriétés effectives du modèle à deux équations.

La forme (1.10)-(1.11) des modèles à deux équations correspond à une classe de modèles macroscopiques appelés modèles quasi-stationnaires. La validité de ces modèles a fait l'objet de nombreux travaux pour les problèmes de diffusion thermique ainsi que pour les problèmes relatifs à la description des écoulements de fluides faiblement compressibles en milieu poreux hétérogène [127]. En effet, ce dernier type de problème met en jeu des équations de transport à petite échelle ayant une structure mathématique identique aux équations relatives au problème de transfert thermique purement diffusif.

Les modèles macroscopiques quasi-stationnaires ont pour hypothèse commune une condition de quasi-stationnarité des grandeurs locales à l'échelle du pore vis-à-vis des grandeurs moyennes. En d'autres termes, pour le problème de transfert thermique dans un système à deux phases, les fluctuations spatiales des températures à l'échelle du pore sont supposées évoluer de manière quasi-stationnaire par rapport aux températures moyennes. A l'échelle macroscopique, la conséquence directe de cette hypothèse est la représentation du flux de chaleur entre les deux phases par un terme d'échange directement proportionnel au déséquilibre thermique macroscopique et caractérisé par un coefficient d'échange effectif indépendant du temps, c'est-à-dire une représentation pseudo-permanente des échanges.

D'une manière générale, l'hypothèse de quasi-stationnarité conduit à des propriétés effectives indépendantes du temps et, par conséquent, des effets de mémoire sont perdus lors du changement d'échelle, bien qu'ils ne soient pas négligeables dans tous les cas.

Afin d'estimer la validité de ce type d'approximation, les conséquences de l'hypothèse de quasi-stationnarité sur la description macroscopique des processus transitoires ont été étudiées à partir de comparaisons avec des expériences numériques [93, 104, 123, 126, 128]. Ces études montrent que les modèles quasi-stationnaires sont satisfaisants pour une large gamme d'applications pratiques. Cependant, pour des problèmes fortement instationnaires ou des problèmes nécessitant une description plus fine des phénomènes transitoires, les modèles quasi-stationnaires peuvent s'avérer insuffisants et, dans ce cas, plusieurs solutions ont été proposées.

Dans le cadre des modèles à deux équations, des modèles dits instationnaires ont été proposés par Moyne [104] et Landreau [92]. Ces modèles ont été obtenus en abandonnant l'hypothèse de quasi-stationnarité et sont caractérisés par des propriétés effectives dynamiques, c'est-à-dire des propriétés qui dépendent du temps. Dans la catégorie des modèles transitoires à deux équations, une approche alternative a été proposée par Bertin *et al.* [20] qui consiste à prendre en compte les aspects historiques en incluant des termes d'ordre supérieur dans les relations liant les fluctuations microscopiques de température avec les grandeurs moyennes<sup>1</sup>. En comparaison des modèles quasi-stationnaires, cette approche conduit à des équations de transport macroscopiques exhibant des termes de transport supplémentaires caractérisés par des dérivées en temps des grandeurs moyennes. Pour les problèmes nécessitant une modélisation macroscopique plus avancée du comportement transitoire, une autre catégorie de modèle a été proposée [48, 8, 9, 13]. Ces modèles peuvent être qualifiés de modèles mixtes à deux équations. Ils consistent en effet en une équation de transport macroscopique pour la phase la plus conductrice et une équation de transport microscopique pour la phase la moins conductrice. Ces deux équations sont couplées au travers d'une condition aux limites mixte mettant en jeu une température moyenne d'un côté et une température microscopique de l'autre côté. Ce type d'approche est évidemment extrêmement complexe d'un point de vue pratique puisque elle nécessite un maillage très fin de l'une des deux phases du milieu poreux.

Si la description macroscopique des problèmes de transport en milieux poreux constitués de deux phases a reçu une attention particulière, en revanche le problème plus complexe des écoulements diphasiques en milieux poreux (*i.e.* systèmes à trois phases) avec non-équilibre thermique local a été peu abordé d'un point de vue théorique.

A notre connaissance, seul Petit [115, 117] a abordé le problème à partir d'une technique de changement d'échelle en développant un modèle à trois équations quasi-stationnaire à partir de la méthode de prise de moyenne volumique. Si ce modèle ne prend pas en compte le changement de phase liquide-vapeur, il permet cependant d'illustrer, dans le cas quasi-stationnaire, la complexité des échanges dans les systèmes à trois phases en comparaison des systèmes à deux phases.

D'un autre côté, des modèles à non-équilibre thermique local ont été proposés à partir d'une approche heuristique sous la forme de modèles à trois équations quasi-stationnaires. Avant d'aborder les modèles à trois équations, il faut noter que des modèles à deux équations quasi-stationnaires ont également été proposés pour les problèmes de changement de phase liquide-vapeur en milieu poreux.

Un modèle à deux équations a été proposé par Sözen et Vafai [141] pour l'analyse de l'écoulement avec condensation d'un gaz à travers un lit fixe. Ce modèle se base sur une hypothèse d'équilibre thermique local entre le liquide et le gaz mais prend en compte un déséquilibre avec la matrice solide. A partir d'une approche heuristique et sur la base des développements menés pour le code WABE [101], un modèle à deux équations a également été utilisé par Décossin [47] pour étudier les problèmes de refroidissement des lits de débris chauffés dans leur volume. La phase liquide est supposée être quasi-isotherme à la température de saturation, *i.e.*  $\langle T_\ell \rangle^\ell = T^{sat}$ , mais

---

<sup>1</sup>ce point sera approfondi dans le chapitre 2

le modèle utilisé ne fait pas l'hypothèse d'équilibre thermique local entre la vapeur et la matrice solide :

$$\varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) = \nabla \cdot (\mathbf{K}_g^* \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g) - \dot{m} C_{pg} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) - h_{gs} (\langle T_g \rangle^g - \langle T_s \rangle^s) \quad (1.12)$$

$$\varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_s^* \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s) + \langle \varpi_s \rangle - h_{si} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) + h_{gs} (\langle T_g \rangle^g - \langle T_s \rangle^s) \quad (1.13)$$

Le taux d'évaporation  $\dot{m}$  du modèle est estimé à partir de la relation supplémentaire :

$$\dot{m} \Delta h = h_{si} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (1.14)$$

Si le modèle (1.12)-(1.13) se présente sous la forme d'un modèle à deux équations quasi-stationnaire, en revanche il se distingue nettement des modèles à deux équations traditionnels dans le sens où il ne fait pas l'hypothèse d'équilibre thermique local entre deux phases du système à trois phases. Ce modèle peut ainsi être qualifié de modèle à deux équations et trois températures ou, puisque l'hypothèse  $\langle T_\ell \rangle^\ell = T^{sat}$  joue le rôle d'une équation macroscopique, modèle à trois équations.

Dans le cas où la phase liquide n'est plus supposée isotherme à la température de saturation, des modèles à trois équations quasi-stationnaires ont été proposés par Berthoud et Valette [19] et Likhanskii *et al.* [97] sous la forme :

$$\varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) = \nabla \cdot (\mathbf{K}_g^* \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g) - (h_{gi} + \dot{m} C_{pg}) (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) - h_{gs} (\langle T_g \rangle^g - \langle T_s \rangle^s) \quad (1.15)$$

$$\varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right) = \nabla \cdot (\mathbf{K}_\ell^* \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell) - (h_{\ell i} - \dot{m} C_{p\ell}) (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) - h_{\ell s} (\langle T_\ell \rangle^\ell - \langle T_s \rangle^s) \quad (1.16)$$

$$\varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K}_s^* \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s) + \langle \varpi_s \rangle - h_{si} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) + h_{gs} (\langle T_g \rangle^g - \langle T_s \rangle^s) + h_{\ell s} (\langle T_\ell \rangle^\ell - \langle T_s \rangle^s) \quad (1.17)$$

Les transferts de chaleur sont couplés par une équation supplémentaire à l'interface liquide-vapeur qui permet d'obtenir une expression du taux d'évaporation :

$$\dot{m} \Delta h = h_{gi} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + h_{\ell i} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) + h_{si} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (1.18)$$

Des modèles à trois équations ont également été proposés par Angelini *et al.* [6] et Park *et al.* [113] sous une forme similaire mais avec une représentation des échanges et une expression du taux d'évaporation sensiblement différente. Dans ces références, le taux d'évaporation est donné par la relation :

$$\dot{m} \Delta h = h_{gi} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + h_{\ell i} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \quad (1.19)$$

Le modèle à trois températures (1.15)-(1.18), obtenu à partir d'une approche heuristique, se base sur les mêmes principes que ceux utilisés pour les modèles à deux équations (1.10)-(1.11). Les trois phases sont en effet représentées à l'échelle macroscopique par trois continus sur lesquels sont définies en tout point les trois températures moyennes  $\langle T_g \rangle^g$ ,  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  et  $\langle T_s \rangle^s$ . Le modèle à trois températures (1.15)-(1.18) présente cependant une forme particulière des échanges en raison du changement de phase liquide-vapeur. En effet, la forme des échanges traduit une représentation

de l'interface liquide-vapeur à l'échelle macroscopique par un quatrième continuum [68] sur lequel est définie la température de saturation  $T^{sat}$ .

Etant donné la multiplicité des continuums à l'échelle macroscopique, la démarche heuristique autorise une certaine liberté sur la forme des échanges du modèle. A titre d'exemple, le déséquilibre thermique  $\langle T_g \rangle^g - \langle T_s \rangle^s$  peut s'écrire également sous la forme de deux déséquilibres par rapport à la température de saturation  $\langle T_g \rangle^g - T^{sat}$  et  $\langle T_s \rangle^s - T^{sat}$ . Si l'équivalence en termes de déséquilibres est évidente, en revanche la manière dont le flux est réparti, c'est-à-dire la valeur des coefficients d'échange, est loin d'être évidente. Les deux formes (1.18) et (1.19) proposées pour le taux d'évaporation illustrent également les difficultés associées à une approche heuristique pour la modélisation des échanges dans un système à trois phases avec un changement de phase.

D'une manière plus générale, comme cela a été souligné par Quintard *et al.* [119] dans le cadre des modèles à deux équations, l'approche heuristique conduit à des modèles macroscopiques intuitifs, puisqu'ils sont dérivés directement à l'échelle macroscopique, et la difficulté majeure rencontrée avec ces modèles réside dans la détermination des coefficients de transport macroscopiques. En particulier, il n'existe pas un lien clair entre la physique à l'échelle du pore et la description macroscopique pour la détermination des propriétés effectives, tels que les coefficients d'échange entre phases, de ces modèles. Comme nous l'avons déjà signalé pour les systèmes à deux phases, une estimation expérimentale de ces coefficients est une voie possible mais pose de nombreuses difficultés. Le cas des systèmes trois phases est encore plus complexe du point de vue du couplage des équations de transport macroscopiques et du point de vue expérimental; on pourra se reporter à Grosser *et al.* [69] et Petit *et al.* [116] pour une illustration des principales difficultés expérimentales. A titre d'exemple, si la signification des températures mesurées par rapport aux températures moyennes pose déjà des difficultés pour les systèmes à deux phases [61], le cas des systèmes à trois phases pose une difficulté supplémentaire majeure car il est souvent impossible, en terme de mesure de température, de distinguer les deux phases fluides. De plus, il est très difficile, et quelquefois impossible, de mesurer les vitesses de filtration des deux phases fluides ainsi que la saturation dans de nombreux cas d'intérêt pratique. En raison de ces difficultés, la plupart des coefficients de transport des modèles heuristiques sont obtenus à partir d'extrapolations de résultats connus dans le cas des milieux poreux à deux phases ou des écoulements diphasiques dans les tubes. Les coefficients d'échange sont quelquefois estimés à partir de corrélations basées sur des approximations de type couche limite, cependant comme nous l'avons déjà signalé, ce type de corrélations ne conduit pas nécessairement à une bonne estimation du coefficient d'échange.

## 1.4 Simulation numérique directe à l'échelle locale

### 1.4.1 Intérêts de la simulation numérique directe

Dans la revue précédente des modèles macroscopiques, nous avons distingué plusieurs catégories de modèles représentant différentes approximations du problème étudié. Ainsi, nous avons présenté dans un premier temps le modèle à une température basé sur l'hypothèse d'équilibre thermique local. Dans un deuxième temps, dans le cas où il n'était pas possible de faire cette hypothèse, nous avons ensuite présenté des modèles à non-équilibre local. Selon le type d'approximation, ces modèles se présentent sous la forme de modèles quasi-stationnaires ou instationnaires, mettant en jeu deux ou trois températures moyennes, ou bien se présentent sous la forme de modèles mixtes.

D'une manière générale, quelle que soit la qualité de l'approximation du problème, nous avons

souligné que la principale difficulté des modèles macroscopiques résidait dans l'estimation des propriétés de transport effectives. En effet, si le changement d'échelle permet d'aborder le problème d'une manière beaucoup plus simple dans le sens où l'échelle de résolution spatiale des modèles macroscopiques est généralement bien plus grande que l'échelle du pore, en revanche toute la difficulté est reportée dans les propriétés effectives de ces modèles qui sont censées traduire ce qui n'est pas résolu à l'échelle du pore. Ainsi, une bonne compréhension des phénomènes de transport à l'échelle locale s'avère être importante pour estimer les propriétés effectives caractérisant le milieu à grande échelle. Cette difficulté n'est pas spécifique aux problèmes de transport en milieu poreux, elle est commune aux problèmes faisant intervenir plusieurs échelles de description en temps et en espace comme par exemple les problèmes de turbulence ou les problèmes d'écoulements multiphasiques.

Une approche expérimentale pour l'estimation des propriétés effectives est une voie possible mais, comme nous l'avons déjà signalé, pose de nombreuses difficultés. En particulier, dans le cadre des écoulements diphasiques en milieu poreux, les vitesses superficielles et la saturation sont des grandeurs très difficiles à mesurer et il est souvent impossible d'avoir accès aux informations relatives à la structure locale de l'écoulement. Pour ces raisons, les mesures expérimentales sont souvent restreintes à un nombre limité de grandeurs intégrées à l'échelle de l'échantillon et ces données sont généralement insuffisantes pour estimer correctement les propriétés effectives du milieu.

Dans ce contexte, la simulation numérique directe à l'échelle locale apparaît comme un outil intéressant et prometteur pour une meilleure compréhension des mécanismes locaux et pour estimer les propriétés effectives du milieu à l'échelle macroscopique. La simulation numérique directe peut venir en complément à une approche expérimentale puisque elle permet d'avoir accès à des grandeurs difficilement mesurables telles que la saturation, les vitesses locales et la topologie des interfaces à l'échelle du pore.

De plus, dans le cadre d'une méthode permettant de réaliser le changement d'échelle, la simulation numérique directe à l'échelle locale s'avère être un outil particulièrement bien adapté pour l'estimation des propriétés de transport macroscopiques. En particulier, dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique, nous avons déjà signalé que des problèmes aux limites locaux, dits problèmes de fermeture, établissaient un lien clair entre la physique à l'échelle du pore et les propriétés effectives du milieu. Pour un modèle spatialement périodique du milieu poreux, ces problèmes peuvent être résolus sur des cellules unitaires représentatives dès que la répartition des phases et les vitesses locales sont données. Ainsi, la simulation numérique directe des écoulements diphasiques sur des cellules unitaires et la résolution des problèmes de fermeture permettent d'estimer les propriétés effectives du milieu. Ce type de démarche est fréquemment mené dans le cadre de la modélisation de la turbulence et commence à être mené avec succès pour les problèmes de transport en milieu poreux : on pourra trouver un exemple dans Chella *et al.* [39]. Enfin, signalons que la simulation numérique directe est non seulement un outil prédictif au regard de l'estimation des propriétés effectives, mais peut également être utilisée *a posteriori* pour juger de la pertinence de la modélisation macroscopique en comparant les solutions prédites par le modèle aux grandeurs moyennées issues de la simulation.

#### 1.4.2 Simulation numérique directe des écoulements diphasiques

La simulation numérique directe s'est beaucoup développée au cours de ces quinze dernières années et il existe actuellement de nombreuses méthodes permettant d'effectuer une simulation numérique directe des écoulements diphasiques. Parmi ces méthodes, on peut distinguer deux grandes familles, les méthodes de type gaz sur réseaux, ou plus généralement les méthodes basées

sur la dynamique moléculaire, et les méthodes basées sur la mécanique des milieux continus. Dans ce travail, nous avons fait le choix de nous intéresser aux méthodes basées sur la mécanique des milieux continus. On peut classer ces méthodes en deux grandes classes :

- Les méthodes basées sur une modélisation *classique* des interfaces, au sens de la théorie de Gibbs des interfaces. On parlera dans ce cas de méthodes basées sur la mécanique des milieux continus classique ou méthodes issues de la théorie du premier gradient.
- Les méthodes basées sur une modélisation *diffuse* (*i.e.* épaisse) des interfaces. On parlera dans ce cas de méthodes à interface diffuse ou méthodes issues de la théorie du second gradient.

La terminologie premier et second gradient utilisée pour ces deux types de méthodes trouve son origine dans la modélisation des efforts intérieurs dans le cadre du principe des puissances virtuelles [58]. En effet, il est reconnu [59] que les équations de transport de la mécanique des milieux continus classique (*i.e.* équations d'Euler) correspondent à une modélisation de la puissance des efforts intérieurs par une forme linéaire du champ de déplacement et de son gradient. Pour une modélisation plus fine des efforts intérieurs, qui ici correspond à une modélisation des couches capillaires, la puissance des efforts intérieurs est une forme linéaire non seulement du champ de déplacement et de son gradient mais aussi du second gradient du champ de déplacement [34, 81, 136].

Dans les méthodes basées sur une modélisation classique des interfaces, l'interface séparant les deux phases est modélisée comme une surface de discontinuité porteuse d'une énergie en excès, la tension de surface. D'une manière générale, les équations résolues par ce type de méthodes sont les équations de transport classiques de masse, de quantité de mouvement et d'énergie dans chaque phase du système diphasique ainsi que les conditions aux limites classiques aux interfaces. Les méthodes de simulation numérique directe basées sur cette approche se distinguent essentiellement par le type de maillage qu'elles utilisent. On peut ainsi distinguer les méthodes utilisant une grille Lagrangienne telles que les méthodes d'éléments de frontières [75], les méthodes utilisant une grille Eulérienne telles que les méthodes VOF [91, 146] et Level Set [38, 111], et les méthodes utilisant une grille mixte Eulérienne-Lagrangienne telles que les méthodes de type Front-Tracking [87, 143].

Il n'est pas dans l'objectif de ce travail de faire une revue exhaustive de toutes ces méthodes. Le lecteur intéressé pourra se reporter à ces dernières références ainsi qu'à Jamet [81] pour une présentation et une discussion de ces différentes méthodes. Nous nous sommes ici plus particulièrement intéressés aux méthodes de type Level Set.

La méthode Level Set consiste à décrire le domaine diphasique à partir des lignes de niveaux d'une pseudo-concentration  $c$ , appelée fonction Level Set, représentant la distance orientée à l'interface. Cette pseudo-concentration permet de distinguer les deux phases du domaine et de traiter l'écoulement des deux phases comme l'écoulement d'un seul fluide à propriétés variables. L'interface est alors simplement convectée par l'intermédiaire du scalaire passif  $c$ . Si la méthode Level Set est conceptuellement très simple, en revanche toutes les difficultés sont reportées dans la résolution numérique des équations de transport du fluide hétérogène. Pour des raisons numériques, les variations brutales des propriétés du fluide hétérogène à la traversée de l'interface sont représentées numériquement par un petit intervalle de diffusion numérique. Ainsi, bien que la méthode se base initialement sur une vision discontinue des interfaces, celles-ci ont une épaisseur finie pour la résolution numérique. La notion de tension interfaciale continue, appelée également CSF pour Continuum Surface Force [28] conduit également à une interface d'épaisseur non nulle. En effet, la prise en compte de la tension interfaciale se traduit dans les équations du mouvement

du fluide hétérogène par une force concentrée sur l'interface, en d'autres termes par une distribution de Dirac. Evidemment, il est impossible de discrétiser directement cette distribution et elle doit être régularisée sur un petit intervalle centré autour de l'interface. Le principe de l'approche CSF consiste ainsi à représenter la force de tension de surface par une force de volume, au même titre que le champ de pesanteur, mais dont l'action est concentrée sur un petit intervalle de transition centré autour de l'interface. La difficulté majeure associée à ces régularisations est la diffusion numérique de l'intervalle de transition, c'est-à-dire l'épaississement numérique artificiel de l'interface. Pour palier à cette difficulté, des méthodes de renormalisation, visant à rétablir la fonction Level Set comme une fonction de distance, ont été proposées : on pourra se reporter à Keck [89] et Sussman *et al.* [139] pour une présentation des méthodes de renormalisation. Bien que la méthode Level Set ait été utilisée avec succès pour de nombreux problèmes [111] et qu'elle ait récemment été étendue aux problèmes avec changement de phase [138], elle présente cependant quelques difficultés, pour la plupart numériques. Par exemple, la résolution de l'équation de transport de l'interface nécessite l'utilisation de schémas numériques suffisamment précis et stables puisque c'est précisément cette équation qui détermine la position et la topologie de l'interface [140]. Il faut noter également que la procédure de renormalisation est importante, en particulier pour l'étalement de la tension de surface, mais cette procédure peut venir contrarier la dynamique des interfaces et nécessite également des méthodes numériques très sophistiquées. Enfin, la pseudo-concentration et l'épaisseur interfaciale n'ont aucune signification physique et, de ce fait, la méthode peut dans certains cas être sensible aux régularisations [99].

Dans la deuxième grande classe des méthodes basées sur la mécanique des milieux continus, les méthodes basées sur une modélisation diffuse des interfaces représentent également les interfaces comme des zones de transition volumique. En revanche, la différence essentielle est qu'une telle représentation des interfaces est introduite thermodynamiquement et non pour des raisons purement numériques. On pourra se reporter à Anderson *et al.* [4] pour une revue de ces méthodes et de leurs applications. Ces méthodes se distinguent selon que l'écoulement diphasique met en jeu un fluide pur (*i.e.* écoulement liquide vapeur) ou un fluide binaire. Ainsi, dans le premier cas, c'est la densité qui joue naturellement le rôle d'indicatrice de phase alors que dans le deuxième cas, c'est la fraction massique de l'un des deux constituants.

D'une manière générale, les méthodes issues de la théorie du second gradient sont construites sur la base d'une modélisation thermodynamique plus riche prenant en compte explicitement la présence d'interfaces. A titre d'exemple, l'épaisseur de l'interface et la tension de surface sont des propriétés intrinsèques d'un fluide du second gradient contrairement aux méthodes issues de la théorie du premier gradient où l'interface est épaisse pour des raisons purement numériques et où la tension de surface intervient initialement uniquement à la condition aux limites entre les deux phases du système. Les équations de transport d'un fluide du second gradient sont similaires aux équations de transport monophasiques d'un fluide du second gradient mais s'appliquent à l'ensemble du domaine diphasique, aussi bien dans les phases homogènes que dans les couches capillaires. Une des particularités de ces équations réside dans la forme du tenseur de pression qui, contrairement au tenseur de pression d'un fluide du premier gradient, n'est pas sphérique. Pour le distinguer du tenseur de pression classique, on emploie souvent la terminologie de tenseur capillaire. L'origine de cette terminologie vient de la signification de la contribution non sphérique. On peut en effet montrer que ces contributions extra-diagonales au tenseur de pression correspondent à des contraintes tangentielles à l'interface dues aux forces de tension de surface.

D'un point de vue numérique, les méthodes à interface diffuse présentent les mêmes avantages que les méthodes Level Set dans le sens où ces méthodes permettent de suivre implicitement les interfaces sur une grille fixe. En revanche, comme nous l'avons signalé, ces méthodes sont

construites sur la base d'une modélisation thermodynamique claire et consistante avec la présence d'interfaces. Ce type d'approche offre ainsi un cadre séduisant pour le développement de schémas numériques consistants au regard de la conservation des propriétés thermodynamiques du fluide.

## 1.5 Motivations et objectifs de l'étude

L'objectif de ce travail est d'apporter une contribution à la description macroscopique des transferts de masse et de chaleur en milieu poreux surchauffé parcouru par un écoulement liquide-vapeur avec changement de phase. Dans cette étude, la matrice solide est supposée être consolidée et nous ne considérons pas d'espèces incondensables tel que l'hydrogène dans la phase gazeuse.

Dans la revue des modèles macroscopiques que nous avons faite, nous avons présenté plusieurs modèles représentant différents types d'approximation du problème considéré. En particulier, dans le cadre du non-équilibre thermique local, nous avons présenté différents modèles macroscopiques quasi-stationnaires et instationnaires. Etant donné la complexité du problème que nous étudions, il apparaît raisonnable dans un premier temps de s'orienter vers un modèle quasi-stationnaire. Parmi les méthodes permettant de réaliser le changement d'échelle, c'est-à-dire le passage de l'échelle du pore à l'échelle macroscopique, il nous a semblé que dans le cadre du non-équilibre local, la méthode de prise de moyenne volumique était particulièrement bien adaptée et ouvrait des perspectives intéressantes.

Ainsi, après un rappel des hypothèses et du système d'équations décrivant le problème de transport de masse et de chaleur à l'échelle du pore, nous établissons dans le chapitre 2 un modèle macroscopique quasi-stationnaire à non-équilibre thermique local à partir de la méthode de prise de moyenne volumique. Le modèle développé ne fait pas d'hypothèse d'équilibre thermique local et met en jeu une température moyenne par phase. Il se présente ainsi sous la forme d'un modèle quasi-stationnaire à trois équations. Une des caractéristiques originales de l'approche développée concerne l'établissement d'une forme fermée du taux d'évaporation à l'échelle macroscopique, c'est-à-dire une forme dépendant des trois températures macroscopiques et des propriétés effectives du milieu. Le modèle macroscopique est basé sur des contraintes d'échelles de longueur clairement identifiées et s'appuie sur une hypothèse de quasi-stationnarité et de quasi-staticité. Ces deux hypothèses sont discutées dans le chapitre 2 et une illustration de leur impact sur la description macroscopique est présentée au chapitre 3 pour un problème purement diffusif avec changement de phase.

Contrairement à l'approche heuristique habituellement utilisée, l'approche développée dans ce travail s'appuie sur une résolution du problème de changement d'échelle. Ainsi, cette approche peut être à la base d'une discussion sur la forme des équations de transport macroscopiques des modèles heuristiques. En outre, cette approche conduit à des problèmes aux limites locaux, appelés problèmes de fermeture, qui établissent un lien clair entre la physique à l'échelle du pore et la description macroscopique. En particulier, pour un modèle spatialement périodique du milieu poreux, ces problèmes permettent d'estimer les propriétés effectives du modèle macroscopique sur des cellules unitaires représentatives du milieu.

Dans le chapitre 3, on s'intéresse à deux cellules unitaires simples unidimensionnelles représentatives respectivement d'un milieu stratifié et d'un milieu ayant une structure géométrique analogue à un arrangement de tubes capillaires. La simplicité des cellules considérées permet de résoudre analytiquement les problèmes de fermeture et permet ainsi d'obtenir des expressions analytiques pour les propriétés effectives du modèle. Les coefficients de transport du modèle sont estimés pour deux configurations types : une configuration classique pour les milieux poreux non saturés où la phase liquide est mouillante, et une configuration plus spécifique aux

problèmes d'ébullition où la phase vapeur est "mouillante" (*i.e.* existence d'un film stable de vapeur autour des particules surchauffées). Deux expériences numériques sont ensuite effectuées sur ces cellules pour un problème de conduction thermique avec changement de phase. La solution macroscopique du modèle quasi-stationnaire est confrontée à la solution obtenue par une résolution directe du problème à l'échelle du pore pour un problème de chauffage et un problème de relaxation vers l'équilibre. Bien que ces expériences soient limitées à des problèmes purement diffusifs, elles permettent de discuter de la validité des approximations utilisées pour établir le modèle macroscopique. Enfin, la dernière partie du chapitre 3 est consacrée à une discussion sur certains termes de transport dits non classiques et à une comparaison du modèle proposé avec les modèles quasi-stationnaires à trois équations obtenus à partir d'une approche heuristique.

Les cellules simples considérées dans le chapitre 3 ne peuvent évidemment pas traduire toutes les caractéristiques d'un système réel, par exemple les effets topologiques (*i.e.* structure de la matrice poreuse, interfaces liquide-vapeur) et hydrodynamiques complexes. Cependant, elles sont instructives et elles permettent d'illustrer le comportement des propriétés effectives ainsi que le comportement du modèle macroscopique. Si l'on souhaite étudier de façon plus réaliste l'influence de la répartition des phases ou du régime d'écoulement, des cellules unitaires plus complexes doivent être considérées. Dans ce cas, la résolution des problèmes de fermeture nécessite une connaissance fine de l'écoulement diphasique à l'échelle locale. Dans ce contexte, nous avons vu que la simulation numérique directe apparaissait comme un outil particulièrement bien adapté pour avoir accès aux informations à l'échelle locale, en particulier la topologie des interfaces, les taux de présence (*i.e.* les fractions volumiques) et les champs de vitesse locaux.

Le chapitre 4 est consacré à la présentation d'une méthode de simulation numérique directe des écoulements diphasiques. Nous avons vu que plusieurs méthodes permettaient d'effectuer une simulation numérique directe des écoulements diphasiques. En particulier, nous avons présenté les méthodes basées sur la mécanique des milieux continus classique, où l'interface est modélisée comme une surface de discontinuité, et les méthodes issues de la théorie du second gradient, appelées également méthodes à interface diffuse, où l'interface est modélisée comme une zone de transition volumique. Il nous a semblé que le potentiel des méthodes à interface diffuse et les perspectives qu'elles laissaient entrevoir pour la simulation numérique directe à l'échelle du pore étaient deux points importants qui nous encourageaient à aller dans le sens de ce type d'approche. Ces méthodes ont en effet l'avantage d'être construites sur la base d'une modélisation plus riche et plus réaliste d'un point de vue physique et sont particulièrement bien adaptées à la simulation numérique directe d'écoulements diphasiques à l'échelle locale d'un milieu poreux. En effet, les échelles de longueur pour lesquelles les méthodes à interface diffuse peuvent être utilisées sont voisines des longueurs caractéristiques du milieu à l'échelle du pore que nous souhaitons étudier.

Ainsi, nous présentons dans le chapitre 4 une méthode issue de la théorie du second gradient. En particulier, sur la base d'une étude critique des différentes méthodes à interfaces diffuses proposées dans la littérature, nous présentons une méthode à interface diffuse qui s'inscrit dans le cadre des mélanges de deux fluides du second gradient. Le modèle est dérivé dans un premier temps dans un contexte compressible et, dans un deuxième temps, une formulation incompressible du modèle est dérivée dans le cadre d'une définition thermodynamique de l'incompressibilité. A partir de ce modèle, les développements et les résultats présentés dans ce travail s'inscrivent dans le cadre d'une approximation de type Boussinesq. Nous présentons un schéma en temps et une méthode éléments finis stabilisée pour le modèle Boussinesq. Enfin, la dernière partie de ce chapitre est consacrée à quelques applications du modèle et du schéma numérique développés.

Le chapitre 4 ayant permis d'introduire une méthode de simulation numérique directe et de développer un schéma numérique pour la résoudre, on aborde dans le chapitre 5 la simulation

numérique directe d'écoulements diphasiques sur des cellules unitaires représentatives du milieu poreux. Avant d'aborder ces simulations, une méthode numérique de type éléments finis est développée pour la résolution numérique des problèmes de fermeture du modèle macroscopique. La méthode numérique développée est dans un premier temps validée pour les cellules unitaires simples considérées dans le chapitre 3 pour lesquelles on dispose de solutions analytiques. Dans un deuxième temps, les problèmes de fermeture sont résolus sur une cellule unitaire bidimensionnelle plus complexe dans le cas purement diffusif. Enfin, à partir de simulations numériques directes, nous présentons quelques résultats sur le comportement des propriétés effectives du modèle macroscopique. Nous étudions en particulier les effets de la saturation et de l'intensité de l'écoulement sur les coefficients d'échange entre phases. Si les résultats présentés dans ce travail ne conduisent pas encore à des corrélations pour les propriétés effectives, cela nécessiterait un nombre plus important de configurations, ils permettent en revanche d'observer certaines tendances sur la base d'une relation claire et explicite entre l'échelle du pore et la description macroscopique.

## Chapitre 2

# Modèle à non équilibre thermique local

Nous avons vu dans le chapitre d'introduction que les modèles macroscopiques décrivant les transferts de masse et chaleur dans les milieux poreux parcourus par un écoulement diphasique avec changement de phase faisaient souvent appel à l'hypothèse d'équilibre thermique local. Nous avons également indiqué que cette hypothèse pouvait s'avérer trop contraignante, en particulier dans les conditions extrêmes rencontrées dans les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris apparaissant dans un coeur de réacteur en situation accidentelle. De plus, pour ces problèmes, il est important de rappeler qu'un modèle à équilibre local est *a priori* incapable de décrire aussi bien l'évolution des zones asséchées que les transitoires associés à la pénétration d'un front de renoyage dans le milieu alors que la description de ces phénomènes s'avère indispensable pour proposer des modèles plus précis que les approches globales actuellement utilisées en analyse de sûreté.

Dans le cas où l'hypothèse d'équilibre thermique local est abandonnée, nous avons vu que si la description macroscopique des milieux poreux constitués de deux phases a reçu une attention particulière, en revanche la description des milieux constitués de trois phases solide, liquide et vapeur, a été peu abordée d'un point de vue théorique. De ce fait, la plupart des modèles proposés sont obtenus à partir d'une approche heuristique pour lesquels on rencontre souvent des difficultés lors de l'estimation des propriétés effectives caractérisant le milieu à l'échelle macroscopique.

Ce chapitre présente l'établissement d'un modèle macroscopique à non équilibre local pour la description macroscopique des transferts de masse et de chaleur dans un milieu poreux parcouru par un écoulement liquide-vapeur avec changement de phase. Il est important de signaler dès à présent que, devant la complexité du problème, le modèle proposé s'appuie sur plusieurs hypothèses simplificatrices. Ces hypothèses sont de deux natures différentes selon qu'elles sont faites à l'échelle du pore, pour simplifier le problème à l'échelle locale, ou à *l'échelle des fermetures*, pour simplifier le problème à l'échelle macroscopique. Dans le premier cas, les hypothèses faites peuvent être qualifiées d'hypothèses *physiques* dans le sens où elles viennent simplifier la physique à l'échelle du pore, alors que dans le deuxième cas elles font plutôt référence à des approximations dans le sens où, comme nous l'avons vu dans le chapitre introductif, elles conduisent à une description macroscopique représentant une certaine approximation du problème. Dans les deux cas, nous nous attacherons à mener une analyse critique de ces hypothèses et à apporter des éléments de discussion sur les difficultés qui se posent lorsqu'elles sont abandonnées.

Dans ce chapitre, nous commençons par une description du problème à l'échelle du pore. Ainsi, nous décrivons les différentes hypothèses physiques et les équations de transport de masse et d'énergie à l'échelle locale. Ensuite, nous présentons le changement d'échelle conduisant à une

description macroscopique du problème. Le modèle macroscopique à non équilibre thermique local est développé dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique et est basé sur une hypothèse de quasi-stationnarité et de quasi-staticité à l'échelle des fermetures. Le modèle proposé ne fait pas l'hypothèse d'équilibre thermique local entre les trois phases du milieu et se présente ainsi sous la forme d'un modèle quasi-stationnaire à trois températures. Une des caractéristiques originales de l'approche développée concerne l'établissement, à partir de la relation de saut locale pour l'énergie à l'interface liquide-vapeur, d'une forme fermée du taux d'évaporation à l'échelle macroscopique. Nous verrons que cette forme fermée est obtenue d'une manière consistante avec l'approximation du problème à l'échelle des fermetures.

Le modèle macroscopique obtenu à l'issue du changement d'échelle se présente sous une forme similaire aux modèles heuristiques à non équilibre local dans le sens où les échanges sont représentés à l'échelle macroscopique de manière quasi-stationnaire. Ainsi, l'approche développée ici apporte une contribution intéressante puisque elle permet de mener une discussion sur la forme des équations de transport des modèles heuristiques sur la base d'un cadre théorique clair et rigoureux. En revanche, contrairement à l'approche heuristique, l'approche développée ici établit un lien clair entre la physique à l'échelle locale et la description macroscopique. En particulier, elle conduit à six *problèmes de fermeture* qui permettent d'estimer les coefficients de transport macroscopiques du modèle pour des cellules unitaires représentatives du milieu. Etant donné les difficultés que nous avons souligné pour estimer ces coefficients dans le contexte d'une approche heuristique, ce point constitue sûrement la principale contribution de ce travail pour la description macroscopique des transferts de masse et de chaleur hors équilibre thermique local en milieu poreux parcouru par un écoulement diphasique avec changement de phase.

## 2.1 Problème à l'échelle locale

### 2.1.1 Position du problème et hypothèses

Le milieu poreux considéré, illustré sur la figure (2.1), est supposé être homogène et la matrice solide consolidée. La première hypothèse signifie que le milieu est considéré homogène à l'échelle macroscopique ou, en d'autres termes, que seules les deux échelles  $\ell$  et  $L$  ont été distinguées. Nous renvoyons le lecteur au chapitre d'introduction pour la distinction entre milieu poreux homogène et hétérogène ainsi qu'à Goyeau *et al.* [65] et Bousquet-Mélou [24] pour la prise en compte d'*hétérogénéités évolutives* telle que la variation de porosité, et à Quintard et Whitaker [121] pour la description macroscopique des milieux poreux hétérogènes dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique. La deuxième hypothèse signifie que le mouvement éventuel des particules solides n'est pas pris en compte. En revanche, les situations résultant d'un déplacement des particules et présentant alors des hétérogénéités (*e.g.* porosité) peuvent être prises en compte.

Nous supposons dans ce travail que les propriétés physiques, densité et viscosité, des phases liquide et vapeur ne varient pas significativement avec la température. Nous supposons également que le problème du transfert de chaleur peut être découplé du problème de l'écoulement diphasique. Par conséquent, les vitesses des deux phases pourront être déterminées indépendamment du problème du transfert de chaleur et seront supposées être des champs connus. Si ce type d'hypothèse est classique et est souvent justifié pour les écoulements monophasiques en milieu poreux, elle constitue en revanche une hypothèse relativement forte pour les écoulements diphasiques et mérite à ce titre d'être discutée.

Le problème de la description macroscopique des écoulements diphasiques en milieu poreux a fait l'objet de nombreux travaux et le lecteur pourra se reporter à Whitaker [151], Auriault

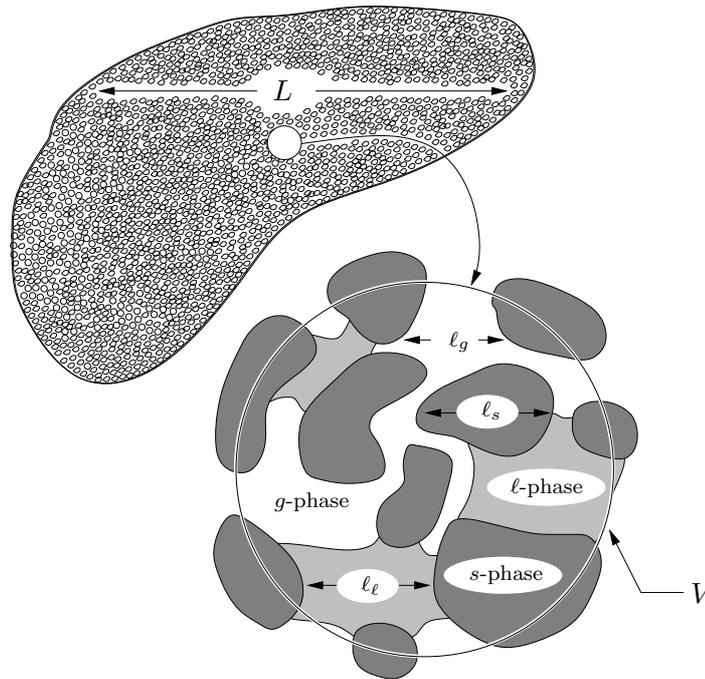


Figure 2.1: Milieu poreux homogène à trois phases : solide  $s$ , liquide  $l$  et vapeur  $g$

[11] et Lasseux *et al.* [94] pour une analyse détaillée de ce problème à partir de techniques de changement d'échelle. Dans ces références, une *théorie quasi-statique* est proposée pour laquelle les effets associés aux mouvements rapides des interfaces sont négligés. En d'autres termes, l'impact de la vitesse de l'interface n'est pas pris en compte dans le problème de changement d'échelle. Dans ce cas, pour une position de l'interface *a priori* connue, la forme des équations de transport macroscopiques est équivalente<sup>1</sup> à la loi de Darcy généralisée où les perméabilités multiphasiques et la pression capillaire peuvent être déterminées à partir d'une description locale où les interfaces évoluent de manière quasi-statique.

Dans ce travail, nos développements s'inscrivent dans le cadre d'une théorie quasi-statique. Ainsi, lorsque la densité et la viscosité ne varient pas significativement avec la température à l'échelle locale, il apparaît raisonnable de pouvoir découpler le problème du transfert de chaleur du problème de l'écoulement diphasique. Il faut cependant garder à l'esprit que si l'hypothèse de quasi-staticité est cohérente avec la modélisation macroscopique, que l'on peut qualifier de classique<sup>2</sup>, de l'écoulement diphasique, elle peut évidemment s'avérer être trop drastique dans plusieurs situations et, en particulier, dans les situations d'ébullition intense. Cela étant, son impact sur la qualité de la description macroscopique pour des situations dynamiques reste à éclaircir : on peut par exemple s'étonner de la bonne qualité de la description macroscopique fournie par la loi de Darcy généralisée pour une large gamme de problèmes où les interfaces n'évoluent pas de manière quasi-statique. Une explication possible serait une ergodicité spatio-temporelle où la moyenne spatiale sur un volume élémentaire donné contenant beaucoup d'interfaces conduirait implicitement à une moyenne temporelle de l'évolution des interfaces qui serait dans ce cas quasi-statique. Dans ce travail, nous ne prétendons pas répondre à cette question délicate sur le domaine de validité d'une théorie quasi-statique et nous noterons seulement que si l'hypothèse de quasi-staticité est relativement contraignante, il apparaît cependant qu'une théorie quasi-statique puisse, dans la pratique, s'appliquer dans d'autres situations où les interfaces n'évoluent

<sup>1</sup>en réalité, certains termes de couplage ont été mis en évidence théoriquement mais ils sont considérés comme négligeables dans la plupart des applications

<sup>2</sup>cette modélisation reste à ce jour largement admise car la plus simple d'un point de vue pratique

pas nécessairement de manière quasi-statique.

Pour conclure ce paragraphe, nous présentons ci-dessous les principales hypothèses adoptées dans ce travail dont certaines seront reprises et discutées au cours de ce chapitre :

- Les espèces incondensables dans la phase gazeuse ne sont pas prises en compte et, par conséquent, la phase gazeuse est constituée uniquement de vapeur.
- Les transferts radiatifs ne sont pas pris en compte.
- La phase liquide est en équilibre thermodynamique avec sa vapeur à l'interface liquide-vapeur.
- Les flux microscopiques de diffusion thermique  $\mathbf{q}_\beta$  sont décrits par la loi de Fourier :

$$\mathbf{q}_\beta = -k_\beta \nabla T_\beta, \quad \beta = g, \ell, s \quad (2.1)$$

- Les propriétés physiques (conductivités, chaleur spécifiques, ...) ne varient pas significativement à l'intérieur du volume élémentaire représentatif.

### 2.1.2 Equations de transport à l'échelle locale

Les transferts de masse à l'échelle microscopique sont décrits par le problème aux limites local suivant :

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}_g) = 0, \quad \text{dans la phase } g \quad (2.2)$$

$$\mathbf{v}_g = 0, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{n}_{\ell g} \cdot \rho_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) = \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \rho_\ell (\mathbf{v}_\ell - \mathbf{w}), \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (2.4)$$

$$\mathbf{v}_\ell = 0, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \rho_\ell}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\ell \mathbf{v}_\ell) = 0, \quad \text{dans la phase } \ell \quad (2.6)$$

où  $\mathbf{w}$  désigne la vitesse de déplacement de l'interface liquide-vapeur,  $\mathbf{n}_{\ell g}$  est la normale unitaire dirigée de la phase liquide  $\ell$  vers la phase vapeur  $g$ , et  $A_{\ell g}$  désigne l'interface liquide-vapeur. Notons ici que les conditions aux limites (2.3) et (2.5) traduisent le fait que la matrice solide est supposée être consolidée, imperméable et non déformable.

A l'échelle locale, les équations de transport décrivant les transferts de chaleur dans les phases vapeur, liquide et solide, avec source de chaleur dans la phase solide, sont données par :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_g h_g) + \nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v}_g) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_g, \quad \text{dans la phase } g \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_\ell h_\ell) + \nabla \cdot (\rho_\ell h_\ell \mathbf{v}_\ell) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_\ell, \quad \text{dans la phase } \ell \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_s h_s) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_s + \varpi_s, \quad \text{dans la phase } s \quad (2.9)$$

où  $\varpi_s$  représente la puissance résiduelle générée dans les débris. On a négligé ici la dissipation visqueuse ainsi que le travail des forces de pression et nous rappelons que les transferts radiatifs ne sont pas pris en compte dans ce travail. Nous notons ici que, pour le problème considéré, si il semble raisonnable de négliger la contribution des termes associés au travail mécanique, en revanche, étant donné les niveaux élevés de température, les transferts thermiques par rayonnement ne sont certainement pas négligeables, en particulier dans les régions asséchées. On pourra se reporter à Kaviany [88] et à Rubiolo et Gatt [132] pour une présentation et une analyse détaillée des problèmes de rayonnement thermique en milieu poreux.

Les équations de transport locales (2.7)-(2.9) sont accompagnées des conditions de saut aux interfaces. Nous commençons par décrire ci-dessous ces conditions aux interfaces vapeur-solide et liquide-solide qui traduisent, d'une manière classique, la continuité de la température et du flux de conduction thermique :

$$T_g = T_s, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.10)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot \mathbf{q}_g = \mathbf{n}_{gs} \cdot \mathbf{q}_s, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.11)$$

$$T_\ell = T_s, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.12)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot \mathbf{q}_\ell = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \mathbf{q}_s, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.13)$$

Les conditions aux limites à l'interface liquide-vapeur sont plus complexes puisque le changement de phase prend place à cette interface. Il semble raisonnable de supposer que le liquide est en équilibre thermodynamique local avec sa vapeur à l'interface liquide-vapeur. En d'autres termes, cela signifie que la température est continue à l'interface liquide-vapeur et est fixée à la température de saturation  $T^{sat}$ . Dans ces conditions, les conditions aux limites à l'interface liquide-vapeur sont données par :

$$T_g = T_\ell = T^{sat}, \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{n}_{\ell g} \cdot (\mathbf{q}_g + \rho_g h_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w})) = \mathbf{n}_{\ell g} \cdot (\mathbf{q}_\ell + \rho_\ell h_\ell (\mathbf{v}_\ell - \mathbf{w})), \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (2.15)$$

Il est important de noter ici que, comme cela a été souligné par Quintard et Whitaker [125] pour un problème analogue de transfert de masse, la condition (2.14) d'équilibre thermodynamique local ne doit pas être confondue avec l'hypothèse d'équilibre thermique local qui elle, concerne l'ensemble du volume élémentaire représentatif.

Les équations de transport de masse (2.2) et (2.6) et d'énergie (2.7)-(2.9) ainsi que les conditions aux limites associées (2.3)-(2.5) et (2.10)-(2.15) doivent bien sûr être complétées par des conditions initiales et des conditions aux limites en entrée et en sortie du milieu pour que le problème local soit bien posé. Par exemple, pour le problème thermique (2.7)-(2.15), les conditions aux limites en entrée et en sortie du milieu, désignées ici par l'indice  $e$ , sont données par :

$$T_g = T_g(\mathbf{r}, t) \text{ sur } A_{ge}, \quad T_\ell = T_\ell(\mathbf{r}, t) \text{ sur } A_{\ell e}, \quad T_s = T_s(\mathbf{r}, t) \text{ sur } A_{se} \quad (2.16)$$

Nous reviendrons sur ces conditions aux limites dans la suite de ce chapitre. Nous notons ici seulement que les conditions aux limites (2.16) sont généralement connues en termes de moyenne spatiale et, de ce fait, comme le note Whitaker [154], les conditions aux limites (2.16) constituent plutôt ce que l'on ignore que ce que l'on connaît des champs de température. Notons également que l'on peut faire la même remarque pour les conditions initiales du problème.

Pour finir ce paragraphe, il est important de remarquer que deux termes sources, l'un *homogène* et l'autre *hétérogène*, sont présents dans le problème local. La terminologie de *source homogène* fait référence à une source de chaleur volumique alors que celle de *source hétérogène* fait référence à une source de chaleur localisée sur une interface entre deux phases (oxydation, changement de phase, ...). Ainsi, la puissance résiduelle générée dans les débris représente un terme source homogène alors que le changement de phase liquide-vapeur exhibe un terme source hétérogène. En effet, à partir du bilan de masse (2.4) à l'interface, la condition de saut (2.15) peut s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{n}_{\ell g} \cdot \mathbf{q}_g = \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \mathbf{q}_\ell + \underbrace{\mathbf{n}_{\ell g} \cdot \rho_g (h_g - h_\ell) (\mathbf{v}_g - \mathbf{w})}_{\text{source hétérogène}}, \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (2.17)$$

Dans le cadre du non équilibre thermique local, si le terme source homogène apparaît généralement comme une simple valeur moyenne dans les équations de transport à l'échelle macroscopique, en revanche l'impact du terme source hétérogène sur la description macroscopique du milieu est beaucoup plus complexe. On pourra se reporter à Quintard *et al.* [120] et Quintard et Whitaker [130] pour une illustration de l'impact des sources homogènes et hétérogènes sur la modélisation macroscopique des transferts de chaleur dans le cas d'un système à deux phases, lorsque les sources sont des fonctions *a priori* connues.

Dans le cas général, les sources homogènes et hétérogènes ne sont pas des fonctions *a priori* connues et elles mettent en jeu un problème fortement couplé à l'échelle microscopique. En particulier, pour notre problème, la présence d'une source hétérogène de chaleur à l'interface liquide-vapeur conduit à un problème fortement couplé de masse, de quantité de mouvement et d'énergie à l'échelle microscopique. Malgré cela, et comme nous l'avons indiqué au début de ce chapitre, nous ne prétendons pas ici résoudre un tel problème et nous avons supposé que le problème du transfert de chaleur pouvait être découplé du problème de l'écoulement diphasique. Dans le cas où le liquide est en équilibre thermodynamique avec sa vapeur à l'interface liquide-vapeur, nous allons voir dans ce chapitre que la condition aux limites (2.17) exhibant un terme source hétérogène joue le rôle de relation auxiliaire dans le problème de changement d'échelle qui peut ensuite être utilisée pour estimer le taux d'évaporation à l'échelle macroscopique.

## 2.2 Equations de continuité des phases liquide et vapeur

Avant de procéder à la prise de moyenne volumique des équations d'énergie, nous présentons dans un premier temps la forme macroscopique des équations de continuité des phases liquide et vapeur. Les résultats présentés ici ne sont pas nouveaux mais les développements sont repris car les notations ainsi que quelques hypothèses seront reprises pour la prise de moyenne volumique des équations d'énergie.

Pour obtenir les équations macroscopiques de bilans de masse, nous effectuons une prise de moyenne volumique des équations de transport locales (2.2)-(2.6) sur un volume élémentaire représentatif du milieu poreux. Les notations ainsi que les théorèmes relatifs à la méthode de prise de moyenne volumique sont présentés en annexe A. Nous présentons ici la prise de moyenne de l'équation de continuité de la phase gazeuse, les résultats seront ensuite étendus à l'équation de conservation de la masse relative à la phase liquide.

### 2.2.1 Prise de moyenne volumique

La prise de moyenne volumique de l'équation locale de conservation de la masse de vapeur (2.2) conduit à l'équation de transport macroscopique :

$$\left\langle \frac{\partial \rho_g}{\partial t} \right\rangle + \langle \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}_g) \rangle = 0 \quad (2.18)$$

Le théorème du transport de Reynolds (A.8), avec l'hypothèse de vitesse nulle de la phase solide, permet d'écrire la moyenne du terme d'accumulation de (2.18) sous la forme :

$$\left\langle \frac{\partial \rho_g}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \langle \rho_g \rangle^g) - \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g \mathbf{w} dA \quad (2.19)$$

D'un autre côté, le théorème de moyenne spatiale (A.9) et la condition d'adhérence (2.3) conduisent à l'expression suivante pour la moyenne du terme convectif de (2.18) :

$$\langle \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}_g) \rangle = \nabla \cdot \langle \rho_g \mathbf{v}_g \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g \mathbf{v}_g dA \quad (2.20)$$

A ce stade, on introduit la décomposition spatiale (A.5) pour la densité et la vitesse :

$$\rho_g = \gamma_g \langle \rho_g \rangle^g + \tilde{\rho}_g \quad (2.21)$$

$$\mathbf{v}_g = \gamma_g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g + \tilde{\mathbf{v}}_g \quad (2.22)$$

A partir des décompositions (2.21)-(2.22) et de la relation (A.12), le premier terme du second membre de (2.20) s'écrit :

$$\nabla \cdot \langle \rho_g \mathbf{v}_g \rangle = \nabla \cdot (\varepsilon_g \langle \rho_g \rangle^g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g) + \nabla \cdot \langle \tilde{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle \quad (2.23)$$

A ce stade, on peut se demander dans quelle mesure le dernier terme du second membre de (2.23) est important et, plus précisément, dans (2.21), si les variations spatiales de densité dans le volume de prise de moyenne sont significatives. Pour répondre à cette question, partons de l'équation d'état simple  $\rho_\beta = \rho_\beta(p_\beta)$ , où  $\beta = g, \ell$ , et développons  $\rho_\beta$  en série de Taylor autour de  $\langle p_\beta \rangle^\beta$ . On peut écrire en négligeant les termes d'ordre supérieur :

$$\rho_\beta = \rho_\beta \left( \langle p_\beta \rangle^\beta \right) + \left. \frac{\partial \rho_\beta}{\partial p_\beta} \right|_{\langle p_\beta \rangle^\beta} \tilde{p}_\beta + \dots \quad (2.24)$$

En général, on estime  $\tilde{p}_\beta$  par :  $\tilde{p}_\beta = O(\ell_\beta L^{-1} \langle p_\beta \rangle^\beta)$  et par suite, (2.24) peut s'écrire :

$$\rho_\beta = \rho_\beta \left( \langle p_\beta \rangle^\beta \right) + O \left( \left. \frac{\partial \rho_\beta}{\partial p_\beta} \right|_{\langle p_\beta \rangle^\beta} \frac{\ell_\beta}{L} \langle p_\beta \rangle^\beta \right) + \dots \quad (2.25)$$

Enfin, en introduisant la compressibilité  $c_\beta = \rho_\beta^{-1} (\partial \rho_\beta / \partial p_\beta)$  avec l'estimateur classique pour les gaz [127]  $c_\beta^{-1} \approx p_\beta$ , (2.25) peut s'écrire :

$$\rho_\beta = \rho_\beta \left( \langle p_\beta \rangle^\beta \right) + O \left( \rho_\beta \big|_{\langle p_\beta \rangle^\beta} \frac{\ell_\beta}{L} \right) + \dots \quad (2.26)$$

Il apparaît ainsi raisonnable de pouvoir négliger le dernier terme du développement (2.26) et, par suite, la densité locale peut s'écrire approximativement comme  $\rho_\beta (\langle p_\beta \rangle^\beta)$ . En d'autres termes, on peut raisonnablement supposer que la densité  $\rho_\beta$  ne varie pas significativement dans le volume de prise de moyenne et l'on peut ainsi identifier la densité locale  $\rho_\beta$  à sa moyenne intrinsèque  $\langle \rho_\beta \rangle^\beta$ . Il est important de souligner que si cela signifie que la densité est constante à l'intérieur du volume de prise de moyenne, en revanche, cela ne signifie pas qu'elle le reste à l'échelle macroscopique. Cette remarque est clairement illustrée par le développement (2.26) puisqu'il montre que la densité suit les variations de  $\langle p_\beta \rangle^\beta$ .

A présent, si on revient aux relations (2.21) et (2.23), nous pouvons négliger les variations spatiales de densité et ainsi rendre plus simple l'expression de la moyenne du terme convectif en négligeant le dernier terme du second membre de (2.23). Nous verrons plus loin que lorsqu'on néglige les variations locales de densité, cela permet également d'aborder de manière plus simple le changement d'échelle pour les équations de conservation de l'énergie.

### 2.2.2 Forme macroscopique des équations de continuité

En regroupant les relations (2.19), (2.20) et (2.23) lorsque les variations spatiales de densité sont négligées dans le volume de prise de moyenne, l'équation macroscopique (2.18) de conservation de la masse de la phase vapeur s'écrit :

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g) = \dot{m} \quad (2.27)$$

où  $\dot{m}$  désigne le taux massique d'évaporation défini par la relation [149] :

$$\dot{m} = -\frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) dA \quad (2.28)$$

L'équation de continuité macroscopique relative à la phase liquide s'obtient sur la base des mêmes développements et on a :

$$\frac{\partial \varepsilon_\ell \rho_\ell}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\ell \rho_\ell \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell) = -\frac{1}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \rho_\ell (\mathbf{v}_\ell - \mathbf{w}) dA \quad (2.29)$$

Nous noterons ici que, dans le cas de la phase liquide, l'hypothèse d'une densité constante dans le volume de prise de moyenne est encore plus justifiée. La condition de saut (2.4) à l'interface liquide-vapeur permet d'écrire (2.29) sous la forme :

$$\frac{\partial \varepsilon_\ell \rho_\ell}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\ell \rho_\ell \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell) = -\dot{m} \quad (2.30)$$

Notons que dans le cas où la densité de la phase liquide est constante à l'échelle macroscopique, l'équation macroscopique (2.30) s'écrit sous la forme équivalente d'une équation de transport pour la fraction volumique liquide  $\varepsilon_\ell$  :

$$\frac{\partial \varepsilon_\ell}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_\ell \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell) = -\frac{\dot{m}}{\rho_\ell} \quad (2.31)$$

## 2.3 Equations de conservation des énergies

Nous présentons dans cette partie le changement d'échelle pour les équations d'énergie dans le cadre du non équilibre thermique local. Nous procédons ainsi à la prise de moyenne volumique des trois équations locales de transport (2.7), (2.8) et (2.9). Les trois équations de transport étant similaires, les principaux développements sont présentés pour l'équation d'énergie relative à la phase vapeur. Nous rapellons que les notations et les théorèmes relatifs à la prise de moyenne sont donnés en annexe A du mémoire.

### 2.3.1 Prise de moyenne volumique

La prise de moyenne volumique de l'équation locale de conservation de l'énergie (2.7) relative à la phase vapeur conduit à l'équation de transport macroscopique :

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g h_g) \right\rangle + \langle \nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v}_g) \rangle = -\langle \nabla \cdot \mathbf{q}_g \rangle \quad (2.32)$$

Nous rappelons que les masses volumiques des phases liquide et vapeur sont supposées constantes à l'intérieur du volume de prise de moyenne. La vitesse de déplacement de l'interface vapeur-solide étant nulle, le terme instationnaire de (2.32) s'écrit, à partir du théorème du transport de Reynolds (A.8), sous la forme :

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} (\rho_g h_g) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g \langle h_g \rangle^g) - \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g h_g \mathbf{w} dA \quad (2.33)$$

A partir du théorème de moyenne spatiale (A.9) et de la condition de non glissement (2.3) de la vapeur à l'interface vapeur-solide, le terme convectif de (2.32) peut s'écrire dans un premier temps sous la forme :

$$\langle \nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v}_g) \rangle = \nabla \cdot \langle \rho_g h_g \mathbf{v}_g \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g h_g \mathbf{v}_g dA \quad (2.34)$$

Le premier terme du second membre de (2.34) peut être développé en introduisant la décomposition spatiale (A.5) pour l'enthalpie et la vitesse :

$$h_g = \gamma_g \langle h_g \rangle^g + \tilde{h}_g \quad (2.35)$$

$$\mathbf{v}_g = \gamma_g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g + \tilde{\mathbf{v}}_g \quad (2.36)$$

On obtient ainsi à partir de (A.12), en introduisant les décompositions (2.35)-(2.36) dans le premier terme du second membre de (2.34) :

$$\langle \nabla \cdot (\rho_g h_g \mathbf{v}_g) \rangle = \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \langle h_g \rangle^g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g) + \nabla \cdot \langle \rho_g \tilde{h}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g h_g \mathbf{v}_g dA \quad (2.37)$$

A l'aide du théorème de moyenne spatiale (A.9), le flux conductif de (2.32) peut être développé à partir de son expression donnée par la loi de Fourier et s'écrit :

$$\langle \nabla \cdot (k_g \nabla T_g) \rangle = \nabla \cdot \langle k_g \nabla T_g \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot k_g \nabla T_g dA + \frac{1}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla T_g dA \quad (2.38)$$

A ce stade, on suppose que les conductivités thermiques ne varient pas significativement à l'intérieur du volume de prise de moyenne. Elles seront donc supposées constantes au cours de la prise de moyenne volumique. On pourra trouver dans [153] les contraintes associées à ce type de simplification à partir de l'analyse du développement en série de Taylor de la conductivité autour du centre du volume de prise de moyenne. Comme pour les densités, cette hypothèse ne signifie pas que les conductivités thermique sont constantes à l'échelle macroscopique.

Avec cette hypothèse, l'expression (2.38) s'écrit, en développant le premier terme du second membre à partir de la relation (A.16) :

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot (k_g \nabla T_g) \rangle &= \nabla \cdot \left[ \varepsilon_g k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] \\ &\quad + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla T_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla T_g dA \end{aligned} \quad (2.39)$$

où nous avons utilisé la décomposition spatiale pour la température  $T_g$  :

$$T_g = \gamma_g \langle T_g \rangle^g + \tilde{T}_g \quad (2.40)$$

Enfin, en introduisant la décomposition (2.40) dans les deux derniers termes de (2.39), la moyenne volumique du terme associé au transport par conduction s'écrit, en reprenant les développements de la relation (A.16) :

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot (k_g \nabla T_g) \rangle &= \nabla \cdot \left[ \varepsilon_g k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] \\ &\quad - \nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA \end{aligned} \quad (2.41)$$

En regroupant les relations (2.33), (2.37) et (2.41), l'équation macroscopique de conservation de

l'énergie relative à la phase gazeuse s'écrit :

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g \langle h_g \rangle^g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \langle h_g \rangle^g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g) + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g h_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) dA \\
& + \nabla \cdot \langle \rho_g \tilde{h}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_g k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] \\
& - \nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA \quad (2.42)
\end{aligned}$$

Les mêmes développements peuvent être menés pour les deux autres phases, liquide et solide, et on obtient des équations similaires non présentées ici.

A ce stade, notre objectif est d'obtenir des équations en température.

### Forme macroscopique en température

A partir de l'équation macroscopique de continuité (2.27) relative à la phase vapeur et de la définition (2.28) du taux d'évaporation, on peut écrire les trois premiers termes du premier membre de (2.42) sous la forme :

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g \langle h_g \rangle^g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \langle h_g \rangle^g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g) + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g h_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) dA \\
& = \varepsilon_g \rho_g \left( \frac{\partial \langle h_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle h_g \rangle^g \right) + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g (h_g - \langle h_g \rangle^g) (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) dA \quad (2.43)
\end{aligned}$$

Afin d'obtenir des équations en température, on introduit les relations locales suivantes entre enthalpie et température :

$$h_g = h_g^{sat} + C_{pg} (T_g - T^{sat}) \quad (2.44)$$

$$h_\ell = h_\ell^{sat} + C_{p\ell} (T_\ell - T^{sat}) \quad (2.45)$$

$$h_s = h_s^\circ + C_{ps} (T_s - T_s^\circ) \quad (2.46)$$

où  $h_g^{sat}$  et  $h_\ell^{sat}$  sont respectivement les enthalpies des phases vapeur et liquide à la température de saturation et où  $h_s^\circ$  désigne l'enthalpie à la température de référence  $T_s^\circ$  pour la phase solide. Si on suppose que la température de saturation et les chaleurs spécifiques restent constantes à l'intérieur du volume de prise de moyenne, la moyenne volumique intrinsèque des relations locales (2.44)-(2.46) conduit directement aux relations macroscopiques suivantes :

$$\langle h_g \rangle^g = h_g^{sat} + C_{pg} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) \quad (2.47)$$

$$\langle h_\ell \rangle^\ell = h_\ell^{sat} + C_{p\ell} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \quad (2.48)$$

$$\langle h_s \rangle^s = h_s^\circ + C_{ps} (\langle T_s \rangle^s - T_s^\circ) \quad (2.49)$$

A partir de (2.44) et (2.47), on peut écrire la relation suivante pour les déviations spatiales de l'enthalpie de la phase vapeur :

$$\tilde{h}_g = h_g - \langle h_g \rangle^g = C_{pg} (T_g - \langle T_g \rangle^g) = C_{pg} \tilde{T}_g \quad (2.50)$$

Avant de revenir à l'équation de transport macroscopique, nous reprenons les développements de Hager et Whitaker [72] et nous notons que lorsque les densités et les chaleurs spécifiques

restent constantes à l'intérieur du volume de prise de moyenne, la relation (2.50) permet d'écrire le terme de dispersion de l'équation de transport macroscopique (2.42) sous la forme classique en température suivante :

$$\langle \rho_g \tilde{h}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle = (\rho C_p)_g \langle \tilde{T}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle \quad (2.51)$$

Nous retournons désormais à l'équation de transport macroscopique (2.42) qui, à partir des relations (2.43), (2.47), (2.50) et (2.51), s'écrit sous la forme non conservative suivante :

$$\begin{aligned} & \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) + \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot (\rho C_p)_g \tilde{T}_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) dA \\ & + \nabla \cdot \left( (\rho C_p)_g \langle \tilde{T}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle \right) = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_g k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] \\ & - \nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA \end{aligned} \quad (2.52)$$

L'intégrale de surface du premier membre de (2.52) représente un terme de changement de phase à l'échelle macroscopique. Nous allons voir que, dans le cadre de l'équilibre thermodynamique local du liquide et de sa vapeur à l'interface liquide-vapeur, ce terme peut s'écrire explicitement en fonction du taux d'évaporation.

Pour cela, nous remarquons dans un premier temps que si l'on introduit la décomposition spatiale (2.40) pour  $T_g$  dans la condition d'équilibre thermodynamique local (2.14), on peut écrire cette condition sous la forme :

$$\tilde{T}_g = T^{sat} - \langle T_g \rangle^g, \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (2.53)$$

Ainsi, lorsque les températures  $T^{sat}$  et  $\langle T_g \rangle^g$  ne varient pas significativement à la petite échelle, nous pouvons utiliser la définition (2.28) du taux d'évaporation pour écrire le terme de changement de phase de (2.52) sous la forme :

$$\frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot (\rho C_p)_g \tilde{T}_g (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) dA = - \dot{m} C_{pg} (T^{sat} - \langle T_g \rangle^g) \quad (2.54)$$

Nous rappelons ici que lorsque les échelles de longueur sont convenablement séparées, plus précisément si  $\ell_g \ll r_0$  et  $r_0^2 \ll L^2$ , les variations spatiales de température moyenne peuvent être négligées<sup>3</sup> dans le volume de prise de moyenne et  $\langle T_g \rangle^g$  peut être sortie de l'intégrale de surface de (2.54). Nous rappelons également que la relation (2.54) a été obtenue en négligeant les variations de la chaleur spécifique et de la température de saturation à l'intérieur du volume de prise de moyenne. Evidemment, la température de saturation dépend de la pression locale de vapeur, cependant, il nous a semblé raisonnable de reprendre les arguments que nous avons apportés pour les densités et de considérer la température de saturation constante à l'intérieur du volume de prise de moyenne. Ici encore, nous rappelons que cette hypothèse ne signifie pas que la température de saturation reste constante à l'échelle macroscopique.

A partir de la relation (2.54), l'équation de transport macroscopique (2.52) relative à la phase

<sup>3</sup>cela ne signifie pas que  $\langle T_g \rangle^g$  est considéré comme constante dans le volume de prise de moyenne ; le lecteur intéressé par les développements conduisant à ce type de simplification pourra se reporter à [33, 124]

gazeuse s'écrit finalement sous la forme :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) - \dot{m} C_{pg} (T^{sat} - \langle T_g \rangle^g) \\
& + \nabla \cdot \left( (\rho C_p)_g \langle \tilde{T}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle \right) = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_g k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] \\
& - \nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA \quad (2.55)
\end{aligned}$$

Les équations de transport macroscopiques pour les phases liquide et solide sont obtenues de la même manière et elles sont présentées ci-dessous sans développements supplémentaires :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right) + \dot{m} C_{p\ell} (T^{sat} - \langle T_\ell \rangle^\ell) \\
& + \nabla \cdot \left( (\rho C_p)_\ell \langle \tilde{T}_\ell \tilde{\mathbf{v}}_\ell \rangle \right) = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_\ell k_\ell \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \tilde{T}_\ell dA + \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \tilde{T}_\ell dA \right] \\
& - \nabla \varepsilon_\ell \cdot k_\ell \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla \tilde{T}_\ell dA + \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla \tilde{T}_\ell dA \quad (2.56)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} = \nabla \cdot \left[ \varepsilon_s k_s \nabla \langle T_s \rangle^s + \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \tilde{T}_s dA + \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \tilde{T}_s dA \right] \\
& - \nabla \varepsilon_s \cdot k_s \nabla \langle T_s \rangle^s + \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla \tilde{T}_s dA + \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_s dA + \varepsilon_s \langle \varpi_s \rangle^s \quad (2.57)
\end{aligned}$$

### 2.3.2 Fermeture des équations macroscopiques

Les équations de transport macroscopiques (2.55), (2.56) et (2.57) font intervenir non seulement les températures moyennes  $\langle T_\beta \rangle^\beta$ , pour lesquelles la longueur caractéristique des variations est l'échelle macroscopique, mais aussi leur fluctuations  $\tilde{T}_\beta$ , pour lesquelles la longueur caractéristique des variations est l'échelle locale. A ce stade de l'analyse, les équations de transport macroscopiques ne constituent donc pas un système fermé et il est nécessaire de dériver le problème aux limites local pour les déviations  $\tilde{T}_\beta$ .

Notre objectif n'est pas de résoudre le problème mixte en  $\langle T_\beta \rangle^\beta$  et  $\tilde{T}_\beta$ , cela serait évidemment trop complexe et trop coûteux, mais plutôt de construire une approximation du problème mixte. Cette approximation consiste à établir des relations entre les températures moyennes et les déviations sur la base du problème local pour les déviations. Ces relations constituent les *relations de fermeture*, elles permettent de représenter les déviations en fonction des températures moyennes et de réaliser ainsi une approximation du problème mixte.

La première étape consiste donc à établir le problème aux limites local pour les déviations qui, par la suite, nous permettra d'identifier les *termes sources* responsables des déviations. A partir de cette analyse, on pourra proposer des représentations pour les déviations en fonction des termes sources et construire ainsi une approximation du problème mixte. Comme précédemment, on établit de manière détaillée le problème local relatif à la phase gazeuse, on étendra ensuite les résultats aux autres phases, c'est-à-dire aux phases liquide et solide.

### Problème aux limites local pour les déviations

Afin d'obtenir l'équation locale pour les déviations  $\tilde{T}_g$ , on note dans un premier temps que l'équation locale de transport de l'énergie relative à la phase gazeuse (2.7) peut s'écrire sous la forme non conservative en température suivante :

$$(\rho C_p)_g \left( \frac{\partial T_g}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla T_g \right) = \nabla \cdot (k_g \nabla T_g) \quad (2.58)$$

En multipliant cette équation par la fraction volumique  $\varepsilon_g$  et en introduisant la décomposition de Gray (A.5) pour la vitesse et la température, l'équation (2.58) devient :

$$\begin{aligned} \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{T}_g}{\partial t} + (\langle \mathbf{v}_g \rangle^g + \tilde{\mathbf{v}}_g) \cdot \nabla (\langle T_g \rangle^g + \tilde{T}_g) \right) \\ = \varepsilon_g \nabla \cdot (k_g \nabla (\langle T_g \rangle^g + \tilde{T}_g)) \end{aligned} \quad (2.59)$$

L'équation locale pour les déviations  $\tilde{T}_g$  s'obtient alors en prenant la différence des équations (2.59) et (2.55) :

$$\begin{aligned} (\rho C_p)_g \frac{\partial \tilde{T}_g}{\partial t} + (\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \tilde{T}_g + (\rho C_p)_g \tilde{\mathbf{v}}_g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \varepsilon_g^{-1} \dot{m} C_{pg} (T^{sat} - \langle T_g \rangle^g) \\ = \nabla \cdot (k_g \nabla \tilde{T}_g) - \varepsilon_g^{-1} \nabla \cdot \left[ \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] \\ + \varepsilon_g^{-1} \nabla \cdot \left( (\rho C_p)_g \langle \tilde{T}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle \right) - \frac{\varepsilon_g^{-1} k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA - \frac{\varepsilon_g^{-1} k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA \end{aligned} \quad (2.60)$$

Les équations locales pour les déviations  $\tilde{T}_\ell$  et  $\tilde{T}_s$  s'obtiennent à partir des mêmes développements et ont une forme similaire à l'équation locale (2.60) pour  $\tilde{T}_g$ . Les conditions aux limites pour les déviations s'obtiennent directement à partir des conditions aux limites locales (2.10)-(2.14) dans lesquelles on introduit la décomposition de Gray (A.5) pour  $T_g$ ,  $T_\ell$  et  $T_s$ .

Il faut noter ici que si l'équation locale de transport pour  $\tilde{T}_s$  s'écrit sous une forme plus simple en comparaison des équations pour  $\tilde{T}_g$  et  $\tilde{T}_\ell$ , en revanche elle exhibe la déviation spatiale  $\tilde{\omega}_{ss}$  du terme source de chaleur homogène. Cependant, cette déviation est nulle dans le cas d'un terme source constant ou son impact est négligeable pour des petites variations au sein du volume de prise de moyenne (Quintard *et al.* [120]).

A ce stade, pour obtenir une description macroscopique du système à trois phases, le problème est extrêmement complexe puisque l'on doit résoudre simultanément le problème aux limites local pour les déviations  $\tilde{T}_g$ ,  $\tilde{T}_\ell$  et  $\tilde{T}_s$ , et les équations de transport macroscopiques (2.55), (2.56) et (2.57) pour les températures moyennes  $\langle T_g \rangle^g$ ,  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  et  $\langle T_s \rangle^s$ .

Devant la complexité de ce problème, on est amené à simplifier le problème aux limites local et à construire une approximation du problème mixte en moyennes  $\langle T_\beta \rangle^\beta$  et déviations  $\tilde{T}_\beta$ . L'approximation du problème mixte sera discutée et présentée dans les prochains paragraphes. Nous commençons ici par simplifier le problème aux limites local.

Dans un premier temps, nous simplifions le problème local pour les déviations  $\tilde{T}_g$  et  $\tilde{T}_\ell$  en adoptant une *hypothèse de quasi-staticité* pour l'évolution des interfaces à l'échelle du pore. Une telle hypothèse est fréquemment adoptée pour les problèmes de transport en milieu poreux caractérisés par des frontières mobiles à l'échelle du pore [39, 125, 129]. Elle signifie que l'écoulement et

la position des interfaces sont supposés évoluer de manière quasi-stationnaire à la petite échelle en comparaison des autres temps de relaxation du problème.

L'hypothèse de quasi-staticité apporte une simplification importante pour le problème aux limites local puisqu'elle permet de négliger l'impact de la vitesse d'interface sur les déviations spatiales  $\tilde{T}_g$  et  $\tilde{T}_\ell$ . Contrairement aux problèmes de solidification en milieux poreux [25] où l'hypothèse de quasi-staticité paraît raisonnable, les mécanismes d'ébullition en milieux poreux sont généralement marqués, à la petite échelle, par des fluctuations très importantes de la position des interfaces [116] et, par conséquent, il faut garder à l'esprit qu'une telle hypothèse est relativement forte dans de nombreuses situations pratiques. Nous reviendrons plus loin sur les conséquences de cette hypothèse pour la description macroscopique du problème et nous noterons seulement ici, comme nous l'avons indiqué en introduction de ce chapitre, qu'elle est cohérente avec la théorie quasi-statique développée pour la description macroscopique de l'écoulement diphasique qui conduit à une description de type loi de Darcy généralisée.

Si on retourne à l'équation locale de transport (2.60) pour  $\tilde{T}_g$ , il est important de noter que si l'hypothèse de quasi-staticité permet de négliger l'impact de la vitesse d'interface, elle ne permet généralement pas de négliger le taux d'évaporation. On peut s'en convaincre facilement à partir de la définition (2.28) du taux d'évaporation. Nous manquons actuellement de données quantitatives pour estimer l'impact du taux d'évaporation sur les déviations et, dans une première approche, nous le *négligerons*.

Les équations locales de transport pour les déviations peuvent également être simplifiées à partir d'une analyse de l'ordre de grandeur des différents termes. Ce type d'analyse n'est pas nouvelle, elle a déjà été menée par Carbonell et Whitaker [33], Quintard et Whitaker [123, 130] et Whitaker [154]. Nous en présentons ici les principales étapes afin de justifier au mieux la forme finale du problème aux limites local.

Pour mener cette analyse, il est nécessaire dans un premier temps d'obtenir des estimations pour les déviations. Si on introduit la décomposition de Gray (A.5) pour la vitesse  $\mathbf{v}_g$  et la température  $T_g$  respectivement dans les conditions aux limites à l'interface vapeur-solide de non glissement et de continuité des flux thermiques, on obtient les estimations classiques :

$$\tilde{\mathbf{v}}_g = O(\langle \mathbf{v}_g \rangle^g) \quad (2.61)$$

$$\tilde{T}_g = O\left(\frac{\ell_g}{L} \langle T_g \rangle^g\right) \quad (2.62)$$

On rappelle également l'estimation classique pour les surfaces spécifiques [124] :

$$\frac{A_{g\ell}}{V}, \frac{A_{gs}}{V} = O\left(\frac{\varepsilon_g}{\ell_g}\right) \quad (2.63)$$

A partir des estimations (2.61), (2.62) et (2.63), on montre que l'on obtient dans (2.60) les ordres de grandeur suivants :

$$\nabla \cdot (k_g \nabla \tilde{T}_g) = O\left(\frac{k_g \langle T_g \rangle^g}{\ell_g L}\right) \quad (2.64)$$

$$\varepsilon_g^{-1} \nabla \cdot \left[ \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] = O\left(\frac{k_g \langle T_g \rangle^g}{L^2}\right) \quad (2.65)$$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \tilde{T}_g = O\left((\rho C_p)_g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \frac{\langle T_g \rangle^g}{L}\right) \quad (2.66)$$

$$\varepsilon_g^{-1} \nabla \cdot \left( (\rho C_p)_g \langle \tilde{T}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle \right) = O\left((\rho C_p)_g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \frac{\ell_g \langle T_g \rangle^g}{L^2}\right) \quad (2.67)$$

A partir des estimations (2.64)-(2.67) et sur la base de la contrainte  $\ell_g \ll L$ , on en déduit :

$$\nabla \cdot (k_g \nabla \tilde{T}_g) \gg \varepsilon_g^{-1} \nabla \cdot \left[ \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right] \quad (2.68)$$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \tilde{T}_g \gg \varepsilon_g^{-1} \nabla \cdot ((\rho C_p)_g \langle \tilde{T}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \rangle) \quad (2.69)$$

Ainsi, à partir de (2.68) et (2.69), l'équation locale (2.60) pour  $\tilde{T}_g$  se simplifie en :

$$\begin{aligned} & (\rho C_p)_g \frac{\partial \tilde{T}_g}{\partial t} + (\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \tilde{T}_g + (\rho C_p)_g \tilde{\mathbf{v}}_g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \\ & = \nabla \cdot (k_g \nabla \tilde{T}_g) - \frac{\varepsilon_g^{-1} k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA - \frac{\varepsilon_g^{-1} k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA \end{aligned} \quad (2.70)$$

En suivant la même démarche, on obtient des équations similaires pour les déviations  $\tilde{T}_\ell$  et  $\tilde{T}_s$  et nous rappelons que les conditions aux limites pour les déviations s'obtiennent directement en introduisant la décomposition spatiale dans les conditions aux limites (2.10)-(2.14).

Nous rappelons que notre objectif est de construire une approximation du problème mixte en moyennes et déviations et, avant de présenter la forme finale du problème local complet et de proposer des représentations pour les déviations, nous apportons dans le paragraphe suivant quelques éléments de discussion sur l'approximation du problème mixte.

### Sur l'approximation du problème mixte

Etant donné la nature du problème mixte, il est reconnu que la solution est très susceptible d'exhiber un comportement non-local en temps et en espace. En d'autres termes, en un point du milieu à l'échelle macroscopique, la solution du problème mixte intègre des informations et des effets d'histoire provenant d'autres points du milieu. Dans le cadre d'une théorie non-locale, la solution générale du problème mixte conduit à des équations de transport macroscopiques très complexes qui, typiquement, exhibent des produits de convolution en temps et en espace. On pourra se reporter à Cherblanc *et al.* [41] pour une revue bibliographique de ces approches dans le cadre de la dispersion de contaminants en milieux poreux hétérogènes et à Quintard et Whitaker [122] pour l'exploration d'une approche non-locale pour les écoulements diphasiques en milieux poreux hétérogènes dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique. En pratique, il est évidemment très difficile d'utiliser de tels modèles, même pour des problèmes *a priori* très simples, mais il est important de garder à l'esprit que les effets non-locaux, par exemple en espace, existent lorsque les échelles caractéristiques spatiales ne sont pas *convenablement* séparées.

Pour éviter un traitement aussi compliqué, les différentes échelles d'observation sont généralement supposées être convenablement séparées et quasiment toute la littérature existante pour les problèmes de transport en milieu poreux se concentre sur la construction d'une solution approchée du problème mixte.

Il existe plusieurs types d'approximations mais toutes conduisent à un modèle macroscopique *fermé*, c'est-à-dire faisant intervenir uniquement des termes en grandeurs moyennes, contrairement à une approche non-locale (en espace). Ces approximations sont discutées ici sur la base des études menées pour des problèmes de diffusion dans les systèmes à deux phases (désignées dans ce paragraphe par  $\beta$  et  $\sigma$ ) qui, dans le cadre du non équilibre local, ont reçu une attention particulière et pour lesquels il existe une abondante littérature. Nous renvoyons le lecteur au chapitre d'introduction pour une présentation des différentes approximations proposées. Nous revenons ici sur ces approximations et nous présentons quelques éléments de discussion.

Nous avons vu dans le chapitre d'introduction que plusieurs types d'approximations ont été proposés pour construire une solution approchée du problème mixte.

Historiquement, la première approximation proposée, qui reste à ce jour la plus utilisée, conduit aux modèles macroscopiques quasi-stationnaires à deux équations. Ce type d'approximation se base sur un traitement quasi-stationnaire des équations pour les déviations. En d'autres termes, la dérivée en temps dans ces équations est formellement éliminée. Pour une approximation quasi-stationnaire, la solution pour les déviations est ensuite recherchée, au premier ordre, sous la forme d'une combinaison linéaire des *termes sources* macroscopiques responsables des déviations dans le problème aux limites local.

Typiquement, pour un problème de conduction thermique dans un système à deux phases, l'approximation quasi-stationnaire consiste à introduire la représentation suivante pour les déviations :

$$\tilde{T}_\beta = -s_\beta \left( \langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) + \mathbf{b}_{\beta\beta} \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma \quad (2.71)$$

Dans le développement (2.71),  $(\langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma)$ ,  $\nabla \langle T_\beta \rangle^\beta$  et  $\nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma$  représentent les termes sources macroscopiques et  $s_\beta$ ,  $\mathbf{b}_{\beta\beta}$  et  $\mathbf{b}_{\beta\sigma}$  désignent les *variables de fermeture*, appelées également *inconnues de fermeture*. Pour une approximation quasi-stationnaire, ces inconnues dépendent uniquement de la variable d'espace et sont données par une série de problèmes locaux, ou *problèmes de fermeture*, quasi-stationnaires.

Lorsque les représentations (2.71) sont introduites dans les équations de transport macroscopiques, le modèle macroscopique quasi-stationnaire qui en résulte est alors caractérisé par des coefficients de transport effectifs indépendants du temps et, comme nous l'avons indiqué dans le chapitre d'introduction, des effets d'histoire peuvent être perdus dans cette approximation.

Pour des problèmes nécessitant une modélisation plus riche du comportement transitoire, des modèles macroscopiques dits instationnaires ont été proposés en abandonnant l'hypothèse de quasi-stationnarité pour les déviations.

L'approximation proposée par Moyne [104] puis Landereau [92] consiste à introduire la représentation suivante pour les déviations :

$$\tilde{T}_\beta = -s_\beta * \frac{\partial}{\partial t} \left( \langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) + \mathbf{b}_{\beta\beta} * \frac{\partial}{\partial t} \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\beta\sigma} * \frac{\partial}{\partial t} \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma \quad (2.72)$$

où la notation  $a * b(t)$  désigne le produit de convolution en temps :

$$a * b(t) = \int_0^t a(t - \tau) b(\tau) d\tau \quad (2.73)$$

Dans ce cas, les inconnues de fermeture dépendent non seulement de la variable d'espace mais également du temps. Comme pour l'approximation quasi-stationnaire, les inconnues de fermeture de (2.72) sont données par une série de problèmes de fermeture qui, dans ce cas, sont *instationnaires*. De la même manière, le modèle macroscopique qui résulte des représentations (2.72) est caractérisé par des propriétés effectives dynamiques.

En comparaison du modèle quasi-stationnaire, ce type de modèle instationnaire est bien sûr plus complexe puisqu'il prend en compte des effets d'histoire. Par exemple, le flux macroscopique d'échange entre les deux phases ne s'écrit plus sous la forme d'un terme directement proportionnel au déséquilibre macroscopique mais sous la forme d'un produit de convolution en temps du coefficient d'échange et du déséquilibre macroscopique. Il faut noter qu'aux temps longs, les représentations (2.72) convergent asymptotiquement vers les représentations d'une approximation quasi-stationnaire. En d'autres termes, le modèle instationnaire se comporte aux temps longs comme le modèle quasi-stationnaire.

Une approche alternative a été proposée par Bertin *et al.* [20] qui consiste à représenter les déviations sous la forme :

$$\tilde{T}_\beta = -s_\beta^I \left( \langle T_\beta \rangle^\beta - \langle T_\sigma \rangle^\sigma \right) + \mathbf{b}_{\beta\beta}^I \cdot \nabla \langle T_\beta \rangle^\beta + \mathbf{b}_{\beta\sigma}^I \cdot \nabla \langle T_\sigma \rangle^\sigma + \mathbf{b}_{\beta\beta}^{II} \cdot \nabla \frac{\partial \langle T_\beta \rangle^\beta}{\partial t} + \dots \quad (2.74)$$

où les inconnues de fermeture dépendent ici uniquement de la variable d'espace. Ce type de représentation a été proposée sur la base d'une *analogie* entre la méthode d'homogénéisation et la méthode de prise de moyenne volumique. Plus précisément, les développements conduisant au modèle macroscopique sont, dans un premier temps, menés en suivant la méthode des développements asymptotiques. Dans un deuxième temps, les auteurs présentent une représentation du type (2.74) dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique qui se trouve être équivalente au regard du modèle macroscopique.

En comparaison de l'approximation quasi-stationnaire, cette dernière approche consiste ainsi à prendre en compte les effets historiques en incluant des termes d'ordre supérieur dans la représentation des déviations. Le modèle macroscopique résultant présente des termes de transport supplémentaires caractérisés par des dérivées en temps des grandeurs moyennes et peut aussi être qualifié de modèle instationnaire puisque des effets dynamiques sont pris en compte.

Pour conclure, le type d'approximation du problème mixte ou, de manière équivalente, le type de représentation pour les déviations, dépend principalement de la précision demandée au cours des transitoires mais également, d'un point de vue pratique, de la complexité du problème considéré. En effet, si une approche quasi-stationnaire peut être pénalisante pour la description du comportement macroscopique aux temps courts ou la description macroscopique des phénomènes transitoires locaux, en revanche, elle conduit à des modèles macroscopiques qui restent d'un grand intérêt pratique du point de vue de leur utilisation et de la détermination des propriétés effectives pour une large gamme de problèmes.

A l'inverse, si une approche instationnaire est attractive pour une description fine des réponses du milieu aux temps courts et des phénomènes fortement transitoires, elle conduit à des modèles macroscopiques plus complexes qui apparaissent inutiles voire inaccessibles à ce stade des connaissances sur le problème d'ébullition en milieux poreux. Nous ne suivrons pas cette piste dans cette thèse, mais le lecteur retiendra que divers modèles plus ou moins sophistiqués peuvent être construits à partir de ce problème de changement d'échelle.

### Forme finale du problème local et représentation des déviations

Dans le cadre d'une théorie quasi-statique, le problème aux limites local complet pour les déviations  $\tilde{T}_g$ ,  $\tilde{T}_\ell$  et  $\tilde{T}_s$  est donné par :

$$\begin{aligned}
(\rho C_p)_g \frac{\partial \tilde{T}_g}{\partial t} + (\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \tilde{T}_g + \underbrace{(\rho C_p)_g \tilde{\mathbf{v}}_g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g}_{\text{source}} &= \nabla \cdot (k_g \nabla \tilde{T}_g) \\
- \frac{\varepsilon_g^{-1} k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA - \frac{\varepsilon_g^{-1} k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA, & \text{ dans la phase } g \quad (2.75)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\rho C_p)_\ell \frac{\partial \tilde{T}_\ell}{\partial t} + (\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla \tilde{T}_\ell + \underbrace{(\rho C_p)_\ell \tilde{\mathbf{v}}_\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell}_{\text{source}} &= \nabla \cdot (k_\ell \nabla \tilde{T}_\ell) \\
- \frac{\varepsilon_\ell^{-1} k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla \tilde{T}_\ell dA - \frac{\varepsilon_\ell^{-1} k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla \tilde{T}_\ell dA, & \text{ dans la phase } \ell \quad (2.76)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\rho C_p)_s \frac{\partial \tilde{T}_s}{\partial t} &= \nabla \cdot (k_s \nabla \tilde{T}_s) \\
- \frac{\varepsilon_s^{-1} k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla \tilde{T}_s dA - \frac{\varepsilon_s^{-1} k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_s dA, & \text{ dans la phase } s \quad (2.77)
\end{aligned}$$

$$\tilde{T}_\ell = \underbrace{T^{sat} - \langle T_\ell \rangle^\ell}_{\text{source}}, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (2.78)$$

$$\tilde{T}_g = \underbrace{T^{sat} - \langle T_g \rangle^g}_{\text{source}}, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (2.79)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot (k_s \nabla \tilde{T}_s - k_g \nabla \tilde{T}_g) = \underbrace{\mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g}_{\text{source}} - \underbrace{\mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla \langle T_s \rangle^s}_{\text{source}}, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.80)$$

$$\tilde{T}_s - \tilde{T}_g = \underbrace{(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})}_{\text{source}} - \underbrace{(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})}_{\text{source}}, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.81)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot (k_\ell \nabla \tilde{T}_\ell - k_s \nabla \tilde{T}_s) = \underbrace{\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla \langle T_s \rangle^s}_{\text{source}} - \underbrace{\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell}_{\text{source}}, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.82)$$

$$\tilde{T}_\ell - \tilde{T}_s = \underbrace{(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})}_{\text{source}} - \underbrace{(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})}_{\text{source}}, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.83)$$

Nous avons ici décomposé les conditions aux limites aux interfaces vapeur-solide (2.81) et liquide-solide (2.83) afin de faire apparaître explicitement la température de saturation qui, dans l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local, constitue une température de référence du système.

Pour que le problème local (2.75)-(2.83) soit bien posé, il est nécessaire d'écrire des conditions supplémentaires pour les déviations. Ces conditions correspondent aux conditions initiales et aux conditions aux limites, en entrée et en sortie du domaine macroscopique, pour les déviations. Les conditions initiales les plus simples sont des conditions d'équilibre thermique, elles correspondent à beaucoup de situations pratiques et se traduisent par :

$$\tilde{T}_g(t=0) = 0, \quad \tilde{T}_\ell(t=0) = 0, \quad \tilde{T}_s(t=0) = 0 \quad (2.84)$$

En ce qui concerne les conditions aux limites, il faut noter dans un premier temps que l'objectif ici n'est pas de résoudre le problème mixte sur tout le domaine macroscopique mais de construire une approximation du problème sur une région représentative du milieu. Pour un modèle spatialement périodique du milieu poreux, une telle région peut entièrement être représentée par une *cellule unitaire*, illustrée sur la figure (2.2), représentative du système à trois phases considéré.

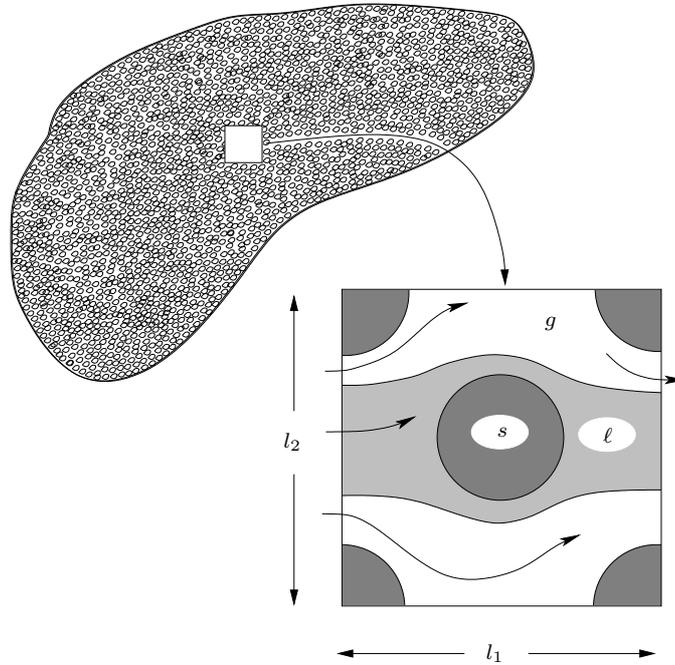


Figure 2.2: Modèle spatialement périodique d'un milieu poreux à trois phases

Dans ce cas, le volume élémentaire représentatif est assimilé à une période, c'est-à-dire à la cellule unitaire, et les conditions aux limites pour les déviations correspondent à des conditions de périodicité :

$$\tilde{T}_g(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{T}_g(\mathbf{r}), \quad \tilde{T}_\ell(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{T}_\ell(\mathbf{r}), \quad \tilde{T}_s(\mathbf{r} + l_i) = \tilde{T}_s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.85)$$

où  $\mathbf{r}$  désigne un point de la région représentative et  $l_i$  la période selon la direction  $i$ . Plusieurs remarques doivent être faites concernant l'impact et la signification des conditions de périodicité (2.85). Premièrement, Carbonell et Whitaker [33] et Whitaker [154] indiquent que ces conditions ont un impact négligeable sur les déviations car les conditions aux limites en entrée et en sortie du milieu ont une influence sur les déviations sur une longueur caractéristique  $\ell$  tandis que les conditions de périodicité sont imposées sur une région de taille caractéristique  $L$ . D'un autre côté, cela signifie également que les effets associés aux *régions d'entrée* ne seront pas pris en compte dans l'approximation du problème mixte. On pourra se reporter à Golfier *et al.* [61] pour une discussion et une illustration de ce point dans le cadre d'une comparaison entre la solution *asymptotique* produite par la méthode de prise de moyenne volumique et la solution exacte de Graetz pour les transferts de masse et de chaleur dans les tubes. Enfin, si les conditions de périodicité sont consistantes avec l'existence d'une cellule unitaire représentative d'un milieu poreux ordonné, on peut se poser la question de savoir dans quelle mesure ces conditions sont justifiées pour un milieu désordonné. Le lecteur intéressé par une analyse détaillée de cette question pourra se reporter à Quintard *et al.* [119] et Quintard et Whitaker [122, 123, 124]. Nous noterons seulement ici que pour un milieu désordonné, les conditions de périodicité sont

représentatives dès que la taille de la cellule unitaire est suffisamment grande devant la longueur de corrélation des hétérogénéités [119].

Les équations (2.75) à (2.85) constituent la forme finale du problème aux limites local pour les déviations et nous cherchons désormais à construire une approximation mixte. Dans les équations (2.75) à (2.83) du problème local, nous avons identifié six termes en tant que *termes sources macroscopiques* responsables des déviations  $\tilde{T}_g$ ,  $\tilde{T}_\ell$  et  $\tilde{T}_s$ . Ainsi, une solution approchée du problème mixte peut être proposée en représentant les déviations à partir de ces termes sources. A partir de la revue des différentes approximations proposées présentée dans le paragraphe précédent, le problème local (2.75)-(2.85) écrit dans l'espace de Laplace suggère au premier ordre la représentation suivante pour les déviations  $\tilde{T}_g$  et des représentations du même type pour  $\tilde{T}_\ell$  et  $\tilde{T}_s$  :

$$\begin{aligned} \{\tilde{T}_g\} &= -\{s_{\ell i}^g\}p\{\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}\} - \{s_{gi}^g\}p\{\langle T_g \rangle^g - T^{sat}\} - \{s_{si}^g\}p\{\langle T_s \rangle^s - T^{sat}\} \\ &\quad + \{\mathbf{b}_{gg}\} \cdot p\nabla\{\langle T_g \rangle^g\} + \{\mathbf{b}_{g\ell}\} \cdot p\nabla\{\langle T_\ell \rangle^\ell\} + \{\mathbf{b}_{gs}\} \cdot p\nabla\{\langle T_s \rangle^s\} \end{aligned} \quad (2.86)$$

où  $\{\psi\}$  désigne la transformée de Laplace de  $\psi$  et  $p$  la variable de Laplace. En appliquant la transformée de Laplace inverse, les représentations pour les déviations s'écrivent ainsi sous la forme (2.72) dite instationnaire. Le raisonnement conduisant à ce type de représentation est présenté en annexe B au travers d'un problème de conduction hétérogène.

Devant la complexité du problème à trois phases considéré, il nous a semblé qu'une approximation du problème mixte de type instationnaire était, dans une première approche, trop ambitieuse et prématurée et nous nous sommes orientés vers une approximation de type quasi-stationnaire.

On peut faire remarquer que les variables de fermeture évoluent généralement avec un temps caractéristique plus court que celui associé à l'évolution des températures moyennes. Une approximation quasi-stationnaire consiste alors à prendre les variables de fermeture sur un temps plus long que leur temps caractéristique (nous les noterons simplement ici  $s_{\ell i}^g, \dots, \mathbf{b}_{gg}, \dots$ , pour ne pas alourdir les notations) mais qui reste néanmoins plus court que le temps caractéristique des températures moyennes. Ici encore, nous invitons le lecteur à se reporter à l'annexe B pour une illustration du lien entre les approximations instationnaire et quasi-stationnaire.

Ainsi, pour une approximation quasi-stationnaire, les représentations pour les déviations s'écrivent dans l'espace physique sous la forme :

$$\begin{aligned} \tilde{T}_g &= -s_{\ell i}^g \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) - s_{gi}^g \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - s_{si}^g \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \\ &\quad + \mathbf{b}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{b}_{g\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{b}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\begin{aligned} \tilde{T}_\ell &= -s_{\ell i}^\ell \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) - s_{gi}^\ell \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - s_{si}^\ell \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \\ &\quad + \mathbf{b}_{\ell g} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{b}_{\ell\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{b}_{\ell s} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \end{aligned} \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned} \tilde{T}_s &= -s_{\ell i}^s \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) - s_{gi}^s \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - s_{si}^s \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \\ &\quad + \mathbf{b}_{sg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{b}_{s\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{b}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \end{aligned} \quad (2.89)$$

où les variables  $s_{\ell i}^g, \mathbf{b}_{gg}, \dots$ , sont respectivement les variables de fermeture scalaires et vectorielles qui réalisent une approximation du problème mixte. Ces variables sont solutions de problèmes aux limites locaux, appelés problèmes de fermeture, que nous présenterons dans le prochain paragraphe.

La nomenclature utilisée pour les variables scalaires est telle que l'exposant identifie la phase dans laquelle la variable est définie tandis que l'indice identifie le déséquilibre thermique macroscopique

de la représentation. Par exemple,  $s_{\ell i}^s$  est le scalaire qui relie  $\tilde{T}_s$  à  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$ , où l'indice  $i$  fait référence à la température d'interface  $T^{sat}$ . En ce qui concerne les variables vectorielles, le premier indice identifie la phase dans laquelle la variable est définie tandis que le deuxième identifie le gradient de température macroscopique de la représentation. Par exemple,  $\mathbf{b}_{sg}$  est le vecteur qui relie  $\tilde{T}_s$  à  $\nabla \langle T_g \rangle^g$ .

Comme nous l'avons déjà signalé, les inconnues de fermeture scalaires et vectorielles de l'approximation quasi-stationnaire (2.87)-(2.89) dépendent uniquement de la variable d'espace et la dépendance en temps des déviations provient uniquement de la dépendance en temps des termes sources macroscopiques. Nous rappelons que l'hypothèse de quasi-stationnarité revient à négliger la dérivée en temps des déviations dans les équations locales (2.75)-(2.77). En d'autres termes, bien que le problème à l'échelle macroscopique soit instationnaire, les déviations peuvent être considérées comme évoluant quasi-stationnairement par rapport aux températures macroscopiques si les contraintes suivantes sont vérifiées [33, 123, 130] :

$$\frac{\alpha_g t^*}{\ell_g^2} \gg 1, \quad \frac{\alpha_\ell t^*}{\ell_\ell^2} \gg 1, \quad \frac{\alpha_s t^*}{\ell_s^2} \gg 1 \quad (2.90)$$

où  $t^*$  désigne le temps caractéristique associé au processus considéré et  $\alpha_\beta = k_\beta / (\rho C_p)_\beta$  la diffusivité thermique de la phase  $\beta$ . A ce stade, si on souhaite pouvoir confirmer ou infirmer la validité des contraintes (2.90), il importe d'être plus renseigné sur le temps caractéristique  $t^*$ . On peut pour cela s'inspirer des développements de Quintard et Whitaker [127] et écrire, dans le cas purement diffusif, des contraintes plus explicites sur les temps caractéristiques du type :

$$\frac{\ell_g^2}{\alpha_g} \ll \frac{L^2}{\alpha_g}, \frac{L^2}{\alpha_\ell}, \frac{L^2}{\alpha_s}, \quad \frac{\ell_\ell^2}{\alpha_\ell} \ll \frac{L^2}{\alpha_g}, \frac{L^2}{\alpha_\ell}, \frac{L^2}{\alpha_s}, \quad \frac{\ell_s^2}{\alpha_s} \ll \frac{L^2}{\alpha_g}, \frac{L^2}{\alpha_\ell}, \frac{L^2}{\alpha_s} \quad (2.91)$$

A partir des contraintes (2.91), la validité d'une approximation quasi-stationnaire apparaît assez obscure. En effet, si la condition de séparabilité des échelles d'observation permet de vérifier une partie des contraintes (2.91), en revanche, selon le rapport des diffusivités thermiques et le rapport des deux échelles d'observation, il peut exister de nombreux cas où différents temps caractéristiques sont du même ordre de grandeur. En outre, des expériences numériques réalisées dans un cas purement diffusif à deux phases [126] ont montré un très fort impact des aspects topologiques de la répartition des phases qu'il est difficile de prendre en compte par une échelle de temps ou d'espace caractéristique.

Une discussion générale sur la validité de ce type de contrainte est donc extrêmement difficile et, la plupart du temps, la qualité d'une approximation quasi-stationnaire pour un problème donné est estimée sur la base d'expériences numériques. Nous suivrons dans ce travail le même type de démarche et nous estimerons dans le chapitre 3 la qualité de cette approximation pour un problème relativement simple de conduction thermique avec changement de phase.

### 2.3.3 Problèmes de fermeture

Les inconnues de fermetures scalaires et vectorielles des représentations (2.87)-(2.89) sont solutions de six problèmes aux limites locaux, appelés *problèmes de fermeture*, devant être résolus à l'échelle locale sur une région représentative du milieu poreux considéré.

Pour obtenir ces problèmes, les représentations (2.87)-(2.89) sont dans un premier temps introduites dans le problème local (2.75) à (2.85) pour les déviations. Sur la base de la contrainte de séparation des échelles de longueurs, les termes sources dans ce problème  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}), \dots$ , et  $\nabla \langle T_g \rangle^g, \dots$ , sont supposés indépendants et constants en espace sur le volume élémentaire représentatif.

On peut ainsi obtenir six problèmes de fermeture en rassemblant les termes proportionnels aux six termes sources macroscopiques puis en isolant les termes associés à  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$ ,  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$  et  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$  : problèmes I, II et III, puis  $\nabla \langle T_g \rangle^g$ ,  $\nabla \langle T_\ell \rangle^\ell$  et  $\nabla \langle T_s \rangle^s$  : problèmes IV, V, et VI.

Lors de l'introduction des représentations dans le problème local, nous adopterons les approximations classiques du type :

$$\begin{aligned} \nabla \tilde{T}_g \simeq & -\nabla s_{\ell i}^g (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) - \nabla s_{gi}^g (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) - \nabla s_{si}^g (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \\ & + \nabla \mathbf{b}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \nabla \mathbf{b}_{g\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \nabla \mathbf{b}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \end{aligned} \quad (2.92)$$

On pourra se reporter par exemple à Carbonell et Whitaker [33] et Quintard et Whitaker [123] pour une présentation détaillée des développements conduisant à ce type de simplification. L'approximation (2.92) est généralement justifiée sur la base des ordres de grandeur :

$$\nabla \mathbf{b}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g = O\left(\frac{\mathbf{b}_{gg} \langle T_g \rangle^g}{\ell_g L}\right) \quad (2.93)$$

$$\mathbf{b}_{gg} \cdot \nabla \nabla \langle T_g \rangle^g = O\left(\frac{\mathbf{b}_{gg} \langle T_g \rangle^g}{L^2}\right) \quad (2.94)$$

$$\nabla s_{gi}^g \langle T_g \rangle^g = O\left(\frac{s_{gi}^g \langle T_g \rangle^g}{\ell_g}\right) \quad (2.95)$$

$$s_{gi}^g \nabla \langle T_g \rangle^g = O\left(\frac{s_{gi}^g \langle T_g \rangle^g}{L}\right) \quad (2.96)$$

et, à partir de  $\ell_g \ll L$ , il vient : (2.94)  $\ll$  (2.93) et (2.96)  $\ll$  (2.95).

Récemment, dans le cadre du problème de Graetz sur un tube cylindrique, Golfier *et al.* [61] ont retenu les termes du type (2.96) dans (2.92) et ont observé, en se comparant à une solution exacte, que la description macroscopique était plus précise. Lorsque les termes du type (2.96) sont retenus dans le problème local, les auteurs montrent que les problèmes de fermeture sont couplés : les problèmes locaux pour les variables de fermeture associées aux termes d'ordre élevé des représentations (*i.e.* ici les inconnues vectorielles) font apparaître les solutions des variables de fermeture associées aux termes d'ordre inférieur (*i.e.* ici les inconnues scalaires). Le lecteur intéressé par la structure des problèmes de fermeture pourra se reporter à la référence citée plus haut.

Il est clair que lorsque ces termes sont conservés, le modèle macroscopique est *a priori* plus précis (comme c'est le cas pour le problème du tube cylindrique). Toutefois, l'impact de ces termes n'a pas été examiné pour une gamme plus large de problèmes. Par conséquent, on se contentera de retenir les deux termes *a priori* prépondérants et nous adopterons l'approximation classique du type (2.92). Dans ce cas, nous allons voir que les six problèmes de fermeture sont complètement indépendants.

L'ensemble des problèmes de fermeture est donné en annexe C. Les problèmes I à III d'une part et les problèmes IV à VI d'autre part ayant une structure similaire, nous nous intéressons aux problèmes I et IV.

Nous présentons ici ces deux problèmes sous leur forme instationnaire, c'est-à-dire la forme déterminée à partir de la version instationnaire (2.86) des représentations (2.87)-(2.89). Nous en verrons les raisons un peu plus loin dans ce paragraphe en ce qui concerne la forme quasi-stationnaire de ces problèmes, puis dans le chapitre 5, dans le cadre de leur résolution numérique.

**Problème I - instationnaire** problème associé à  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$

$$(\rho C_p)_g \left( \frac{\partial s_{li}^g}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla s_{li}^g \right) = k_g \nabla^2 s_{li}^g - \varepsilon_g^{-1} (h_{li}^{g\ell} + h_{li}^{gs}), \quad \text{dans la phase } g \quad (2.97)$$

$$(\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial s_{li}^\ell}{\partial t} + \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla s_{li}^\ell \right) = k_\ell \nabla^2 s_{li}^\ell - \varepsilon_\ell^{-1} (h_{li}^{\ell g} + h_{li}^{\ell s}), \quad \text{dans la phase } \ell \quad (2.98)$$

$$(\rho C_p)_s \frac{\partial s_{li}^s}{\partial t} = k_s \nabla^2 s_{li}^s - \varepsilon_s^{-1} (h_{li}^{sg} + h_{li}^{s\ell}), \quad \text{dans la phase } s \quad (2.99)$$

$$s_{li}^\ell = 1, \quad s_{li}^g = 0, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (2.100)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla s_{li}^g = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla s_{li}^s, \quad s_{li}^g = s_{li}^s, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.101)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla s_{li}^s = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla s_{li}^\ell, \quad s_{li}^\ell = s_{li}^s + 1, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.102)$$

$$s_{li}^g(\mathbf{r} + l_i) = s_{li}^g(\mathbf{r}), \quad s_{li}^\ell(\mathbf{r} + l_i) = s_{li}^\ell(\mathbf{r})$$

$$s_{li}^s(\mathbf{r} + l_i) = s_{li}^s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.103)$$

$$s_{li}^g(t = 0) = 0, \quad s_{li}^\ell(t = 0) = 0, \quad s_{li}^s(t = 0) = 0 \quad (2.104)$$

où on a adopté les notations :

$$h_{li}^{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla s_{li}^g dA, \quad h_{li}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla s_{li}^g dA \quad (2.105)$$

$$h_{li}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla s_{li}^\ell dA, \quad h_{li}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla s_{li}^\ell dA \quad (2.106)$$

$$h_{li}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla s_{li}^s dA = -h_{li}^{gs}, \quad h_{li}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla s_{li}^s dA = -h_{li}^{\ell s} \quad (2.107)$$

**Problème IV - instationnaire** problème associé à  $\nabla \langle T_g \rangle^g$

$$(\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \mathbf{b}_{gg}}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla \mathbf{b}_{gg} + \tilde{\mathbf{v}}_g \right) = k_g \nabla^2 \mathbf{b}_{gg} - \varepsilon_g^{-1} \mathbf{u}_{gg}, \quad \text{dans la phase } g \quad (2.108)$$

$$(\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \mathbf{b}_{\ell g}}{\partial t} + \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell g} \right) = k_\ell \nabla^2 \mathbf{b}_{\ell g} - \varepsilon_\ell^{-1} \mathbf{u}_{\ell g}, \quad \text{dans la phase } \ell \quad (2.109)$$

$$(\rho C_p)_s \frac{\partial \mathbf{b}_{sg}}{\partial t} = k_s \nabla^2 \mathbf{b}_{sg} - \varepsilon_s^{-1} \mathbf{u}_{sg}, \quad \text{dans la phase } s \quad (2.110)$$

$$\mathbf{b}_{\ell g} = 0, \quad \mathbf{b}_{gg} = 0, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (2.111)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla \mathbf{b}_{gg} + \mathbf{n}_{gs} k_g = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{sg}, \quad \mathbf{b}_{gg} = \mathbf{b}_{sg}, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.112)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla \mathbf{b}_{\ell g} = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{sg}, \quad \mathbf{b}_{\ell g} = \mathbf{b}_{sg}, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.113)$$

$$\mathbf{b}_{gg}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{gg}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{b}_{\ell g}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{\ell g}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{b}_{sg}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{sg}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.114)$$

$$\mathbf{b}_{gg}(t = 0) = 0, \quad \mathbf{b}_{\ell g}(t = 0) = 0, \quad \mathbf{b}_{sg}(t = 0) = 0 \quad (2.115)$$

où les vecteurs  $\mathbf{u}_{gg}$ ,  $\mathbf{u}_{\ell g}$  et  $\mathbf{u}_{sg}$  sont définis par

$$\mathbf{u}_{gg} = \mathbf{c}_{gg}^{g\ell} + \mathbf{c}_{gg}^{gs}, \quad \mathbf{u}_{\ell g} = \mathbf{c}_{\ell g}^{\ell g} + \mathbf{c}_{\ell g}^{\ell s}, \quad \mathbf{u}_{sg} = \mathbf{c}_{sg}^{s\ell} + \mathbf{c}_{sg}^{sg} \quad (2.116)$$

avec :

$$\mathbf{c}_{gg}^{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gg} dA, \quad \mathbf{c}_{gg}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gg} dA = -\mathbf{c}_{sg}^{sg} - \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} dA \quad (2.117)$$

$$\mathbf{c}_{\ell g}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell g} dA, \quad \mathbf{c}_{\ell g}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell g} dA = -\mathbf{c}_{sg}^{s\ell} \quad (2.118)$$

$$\mathbf{c}_{s\ell}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla \mathbf{b}_{sg} dA, \quad \mathbf{c}_{sg}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla \mathbf{b}_{sg} dA \quad (2.119)$$

A ce stade, nous nous concentrons sur le problème I pour illustrer le lien entre la forme instationnaire (2.97)-(2.107) et la forme quasi-stationnaire donnée en annexe C. Nous rappelons que les inconnues de fermeture de l'approximation instationnaire correspondent aux temps longs aux inconnues de fermeture de l'approximation quasi-stationnaire. En d'autres termes, comme nous l'avons signalé pour le problème local pour les déviations, le problème de fermeture quasi-stationnaire correspond au problème instationnaire lorsque les dérivées en temps sont formellement éliminées dans (2.97), (2.98) et (2.99). Dans ce cas, les conditions initiales (2.104) ne jouent aucun rôle et peuvent donc être éliminées. A ce stade, le problème quasi-stationnaire est mal posé dans le sens où les solutions sont définies à une constante additive près. Pour préciser cette constante, on a recours à la condition dite "de moyenne" donnée ici par :

$$\langle \tilde{T}_g \rangle^g = 0, \quad \langle \tilde{T}_\ell \rangle^\ell = 0, \quad \langle \tilde{T}_s \rangle^s = 0 \quad (2.120)$$

Les conditions (2.120) constituent des conditions supplémentaires pour le problème local des déviations et, par suite, pour les problèmes de fermeture. Ainsi la forme quasi-stationnaire du problème IV est donnée par :

### Problème I - quasi-stationnaire

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla s_{\ell i}^g = k_g \nabla^2 s_{\ell i}^g - \varepsilon_g^{-1} (h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs}), \quad \text{dans la phase } g \quad (2.121)$$

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla s_{\ell i}^\ell = k_\ell \nabla^2 s_{\ell i}^\ell - \varepsilon_\ell^{-1} (h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}), \quad \text{dans la phase } \ell \quad (2.122)$$

$$0 = k_s \nabla^2 s_{\ell i}^s - \varepsilon_s^{-1} (h_{\ell i}^{sg} + h_{\ell i}^{s\ell}), \quad \text{dans la phase } s \quad (2.123)$$

$$s_{\ell i}^\ell = 1, \quad s_{\ell i}^g = 0, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (2.124)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla s_{\ell i}^g = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla s_{\ell i}^s, \quad s_{\ell i}^g = s_{\ell i}^s, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (2.125)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla s_{\ell i}^s = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla s_{\ell i}^\ell, \quad s_{\ell i}^\ell = s_{\ell i}^s + 1, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (2.126)$$

$$s_{\ell i}^g(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_{\ell i}^g(\mathbf{r}), \quad s_{\ell i}^\ell(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_{\ell i}^\ell(\mathbf{r})$$

$$s_{\ell i}^s(\mathbf{r} + \mathbf{l}_i) = s_{\ell i}^s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (2.127)$$

$$\langle s_{\ell i}^g \rangle^g = 0, \quad \langle s_{\ell i}^\ell \rangle^\ell = 0, \quad \langle s_{\ell i}^s \rangle^s = 0 \quad (2.128)$$

Les propriétés effectives sont toujours données par (2.105)-(2.107) mais, comme les inconnues de fermeture, elles sont désormais indépendantes du temps.

Les conditions de moyennes (2.128), ou de manière équivalente (2.120), qui assurent l'unicité des solutions des problèmes quasi-stationnaires, sont consistantes avec la condition de séparation des échelles d'observation ainsi qu'avec les développements qui ont conduit aux équations de transport macroscopiques et au problème local pour les déviations. De plus, ces conditions sont consistantes avec la forme instationnaire si les conditions initiales (2.104) sont vérifiées. On peut en effet montrer, dans le cas purement diffusif, que la prise de moyenne des équations (2.97)-(2.99) conduit aux conditions de moyennes (2.128). La démonstration utilise des intégrations par parties et le fait que les coefficients  $h_{\ell i}^{g\ell}, \dots$ , sont constants sur la région représentative.

Nous verrons dans le prochain paragraphe que la résolution des problèmes de fermeture sur une région représentative du milieu permet de caractériser le milieu à l'échelle macroscopique. En d'autres termes, les propriétés effectives du modèle macroscopique résultant de l'approximation du problème mixte pourront être déterminées à partir de la résolution des problèmes de fermeture sur une cellule unitaire représentative. Ainsi, les propriétés effectives sont reliées, d'une manière claire, à la physique à l'échelle du pore au travers des problèmes de fermeture. Il est important de garder à l'esprit que les hypothèses de quasi-staticité et de quasi-stationnarité impliquent que les variables de fermeture et les propriétés effectives sont calculées pour une configuration locale donnée, c'est-à-dire pour un champ de vitesse et une topologie des interfaces liquide-vapeur *arbitrairement* donnés. Elles ne prennent donc pas en compte les effets d'histoire associés aux mouvements des interfaces comme par exemple les mouvements des lignes de contact, bien que ces effets puissent ne pas être négligeables dans tous les cas. Il est cependant important de noter que la prise en compte de ces effets pose de grosses difficultés. Par exemple, si on reprend la remarque de Quintard et Whitaker [121], l'abandon de l'hypothèse de quasi-staticité conduit à un problème à frontières mobiles à l'échelle de la cellule unitaire et, par suite, peut venir contredire les conditions aux limites périodiques qui sont une composante essentielle pour la résolution des problèmes de fermeture. D'un autre côté, il est possible de récupérer une partie de ces effets si les problèmes de fermeture sont utilisés pour construire pas à pas l'histoire du mouvement des interfaces en conjonction avec l'évolution des températures moyennes [1]. Ainsi, à partir d'une morphologie locale donnée qui fixe la répartition des phases, on connaît les solutions des problèmes de fermeture c'est-à-dire les propriétés effectives, que nous notons ici  $K_{eff}$ , et la théorie proposée conduit à des relations du type :

$$t \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_\ell(t), \dots \\ K_{eff}(t), \dots \end{array} \right. \quad (2.129)$$

Les relations du type (2.129) constituent une tâche très complexe au regard de la description macroscopique et, en pratique, on remplace cette relation directe en temps par des relations non linéaires mettant en jeu les fractions volumiques et d'autres paramètres liés au régime d'écoulement comme par exemple le nombre de Péclet :

$$K_{eff} = K_{eff}(\varepsilon_\ell, \dots) \quad (2.130)$$

Si les relations du type (2.130) conduisent à une théorie plus simple *complètement fermée*, elles présentent cependant des limitations. En principe, différentes histoires de l'évolution des interfaces peuvent conduire à une même fraction volumique  $\varepsilon_\ell$  mais à des propriétés effectives très différentes [103]. Par conséquent, il faut garder à l'esprit que la construction d'une théorie complètement fermée, c'est-à-dire la construction de (2.130), est inévitablement associée à la répartition des phases que l'on se donne.

### 2.3.4 Forme fermée des équations macroscopiques

La forme fermée des équations macroscopiques de conservation de l'énergie s'obtient en introduisant les représentations des déviations (2.87)-(2.89) dans les équations de transport macroscopiques (2.55)-(2.57). On décrit ici en détail les développements conduisant à la forme fermée de l'équation macroscopique relative à la phase vapeur, les résultats seront ensuite simplement présentés pour les formes fermées relatives aux deux autres phases liquide et solide.

On rappelle que l'équation de transport macroscopique non fermée pour la phase vapeur s'écrit :

$$\begin{aligned}
& \underbrace{\varepsilon_g (\rho C_p)_g \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t}}_{\text{accumulation}} + \underbrace{\varepsilon_g (\rho C_p)_g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g}_{\text{convection}} + \underbrace{\nabla \cdot \left( (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \tilde{T}_g \rangle \right)}_{\text{dispersion}} \\
& = \underbrace{\dot{m} C_{pg} (T^{sat} - \langle T_g \rangle^g)}_{\text{changement de phase}} + \underbrace{\nabla \cdot \left[ \varepsilon_g k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA \right]}_{\text{conduction}} \\
& \underbrace{- \nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA}_{\text{transport interfacial}} \tag{2.131}
\end{aligned}$$

Bien qu'à ce stade de l'analyse, la signification du terme proportionnel au gradient de fraction volumique  $\varepsilon_g$  dans (2.131) ne soit pas encore tout à fait claire, nous nous sommes inspirés de l'analyse de Quintard et Whitaker [125] et nous avons assimilé ce terme à un transport interfacial. Cependant, nous verrons plus loin, lorsque nous nous intéresserons à la forme macroscopique du taux d'évaporation, que l'on peut effectivement assimiler cette contribution à un transport interfacial.

L'introduction de la représentation (2.87) pour  $\tilde{T}_g$  dans les termes d'échanges aux interfaces de (2.131) permet d'obtenir :

$$\begin{aligned}
\frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \tilde{T}_g dA &= \mathbf{u}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{u}_{g\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \\
&+ \mathbf{u}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s - \left( h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \\
&- \left( h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs} \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - \left( h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{gs} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \tag{2.132}
\end{aligned}$$

Les coefficients de transport effectifs  $\mathbf{u}_{gg}$  et  $\mathbf{u}_{g\ell}$ ,  $\mathbf{u}_{gs}$  de (2.132) sont assimilés à des vitesses de transport pour les températures macroscopiques puisque leur contribution dans l'équation macroscopique s'écrit sous une forme similaire au terme convectif classique et sont appelés respectivement pseudo-vitesse et pseudo-vitesses couplées. Ces pseudo-vitesses sont définies directement à partir des relations des problèmes de fermeture IV à VI.

Les coefficients effectifs  $h_{\ell i}^{g\ell}$ ,  $h_{\ell i}^{gs}$ ,  $h_{gi}^{g\ell}$ ,  $h_{gi}^{gs}$ ,  $h_{si}^{g\ell}$  et  $h_{si}^{gs}$  de (2.132) désignent les coefficients macroscopiques d'échange entre phases et sont définis directement dans les problèmes de fermeture I à III.

L'introduction de la représentation pour  $\tilde{T}_g$  dans le terme de dispersion de (2.131) conduit à l'expression :

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot \left( (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \tilde{T}_g \rangle \right) &= \nabla \cdot \left[ (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \mathbf{b}_{gg} \rangle \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right] + \nabla \cdot \left[ (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \mathbf{b}_{g\ell} \rangle \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right] \\
&+ \nabla \cdot \left[ (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \mathbf{b}_{gs} \rangle \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right] - \nabla \cdot \left[ (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g s_{\ell i}^g \rangle \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \right] \\
&- \nabla \cdot \left[ (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g s_{gi}^g \rangle \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) \right] - \nabla \cdot \left[ (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g s_{si}^g \rangle \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \right] \tag{2.133}
\end{aligned}$$

Enfin, l'introduction de la représentation pour  $\tilde{T}_g$  dans le terme de conduction de (2.131) conduit

à l'expression :

$$\begin{aligned}
\varepsilon_g k_g \nabla \langle T_g \rangle^g + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \tilde{T}_g dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \tilde{T}_g dA &= \mathbf{K}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{g\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \\
+ \mathbf{K}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s - \left[ \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} dA + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} s_{gi}^g dA \right] &(\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) \\
- \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} s_{li}^g dA (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) - \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} s_{si}^g dA &(\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (2.134)
\end{aligned}$$

Le tenseur  $\mathbf{K}_{gg}$  et les tenseurs  $\mathbf{K}_{g\ell}$  et  $\mathbf{K}_{gs}$  désignent respectivement le tenseur de conductivité thermique effective dominant et les tenseurs de conductivité thermique effective couplés. Ces tenseurs sont définis à partir de (2.87) et de (2.134) par les relations :

$$\mathbf{K}_{gg} = \varepsilon_g k_g \mathbf{I} + \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \mathbf{b}_{gg} dA \quad (2.135)$$

$$\mathbf{K}_{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \mathbf{b}_{g\ell} dA \quad (2.136)$$

$$\mathbf{K}_{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \mathbf{b}_{gs} dA \quad (2.137)$$

Les intégrales de surface dans les expressions (2.135)-(2.137) prennent en compte la tortuosité du milieu, c'est-à-dire les effets de la géométrie locale du milieu sur le transport macroscopique. On regroupe généralement les termes de dispersion thermique de (2.133) dans les tenseurs de conduction thermique effective et, dans ce cas, les tenseurs de conductivité thermique effective dominant et couplés sont définis par :

$$\mathbf{K}_{gg} = \underbrace{\varepsilon_g k_g \mathbf{I}}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \mathbf{b}_{gg} dA}_{\text{tortuosité}} - \underbrace{(\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \mathbf{b}_{gg} \rangle}_{\text{dispersion}} \quad (2.138)$$

$$\mathbf{K}_{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \mathbf{b}_{g\ell} dA - (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \mathbf{b}_{g\ell} \rangle \quad (2.139)$$

$$\mathbf{K}_{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \mathbf{b}_{gs} dA - (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g \mathbf{b}_{gs} \rangle \quad (2.140)$$

Enfin, à partir des relations (2.133) et (2.134), on regroupe les termes associés aux déséquilibres thermiques macroscopiques et on définit les coefficients :

$$\mathbf{d}_{li}^g = (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g s_{li}^g \rangle - \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} s_{li}^g dA \quad (2.141)$$

$$\mathbf{d}_{gi}^g = (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g s_{gi}^g \rangle - \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} dA - \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} s_{gi}^g dA \quad (2.142)$$

$$\mathbf{d}_{si}^g = (\rho C_p)_g \langle \tilde{\mathbf{v}}_g s_{si}^g \rangle - \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} s_{si}^g dA \quad (2.143)$$

Comme pour les pseudo-vitesses, les coefficients de transport effectifs  $\mathbf{d}_{\ell i}^g$ ,  $\mathbf{d}_{gi}^g$  et  $\mathbf{d}_{si}^g$  sont assimilés à des vitesses de transport pour les déséquilibres thermique macroscopiques et sont ainsi appelés pseudo-vitesses couplées supplémentaires [125].

A partir des relations (2.132), (2.133) et (2.134) et des définitions pour les coefficients de transport effectifs (2.138)-(2.140) et (2.141)-(2.143), nous sommes désormais en mesure d'écrire la forme fermée de l'équation de transport macroscopique pour la phase vapeur :

$$\begin{aligned} \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) - \mathbf{u}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g - \mathbf{u}_{gl} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell - \mathbf{u}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \\ - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{\ell i}^g \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \right] - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{gi}^g \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) \right] \\ - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{si}^g \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \right] = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{gl} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) \\ - \nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g - \left( h_{\ell i}^{gl} + h_{\ell i}^{gs} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \\ - \left( h_{gi}^{gl} + h_{gi}^{gs} + \dot{m} C_{pg} \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - \left( h_{si}^{gl} + h_{si}^{gs} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \end{aligned} \quad (2.144)$$

En suivant la même démarche, on obtient la forme fermée de l'équation de transport macroscopique pour la phase liquide :

$$\begin{aligned} \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right) - \mathbf{u}_{\ell g} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g - \mathbf{u}_{\ell \ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell - \mathbf{u}_{\ell s} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \\ - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{\ell i}^\ell \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \right] - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{gi}^\ell \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) \right] \\ - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{si}^\ell \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \right] = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{\ell g} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{\ell \ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{\ell s} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) \\ - \nabla \varepsilon_\ell \cdot k_\ell \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell - \left( h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s} - \dot{m} C_{p\ell} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \\ - \left( h_{gi}^{\ell g} + h_{gi}^{\ell s} \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - \left( h_{si}^{\ell g} + h_{si}^{\ell s} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \end{aligned} \quad (2.145)$$

Dans (2.145), les pseudo-vitesses sont définies à partir des relations des problèmes de fermeture IV à VI et les coefficients d'échange effectifs sont définis à partir des relations des problèmes de fermeture I à III. Les pseudo-vitesses supplémentaires sont définies par :

$$\mathbf{d}_{\ell i}^\ell = (\rho C_p)_\ell \langle \tilde{\mathbf{v}}_\ell s_{\ell i}^\ell \rangle - \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} dA - \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} s_{\ell i}^\ell dA \quad (2.146)$$

$$\mathbf{d}_{gi}^\ell = (\rho C_p)_\ell \langle \tilde{\mathbf{v}}_\ell s_{gi}^\ell \rangle - \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} s_{gi}^\ell dA \quad (2.147)$$

$$\mathbf{d}_{si}^\ell = (\rho C_p)_\ell \langle \tilde{\mathbf{v}}_\ell s_{si}^\ell \rangle - \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} s_{si}^\ell dA \quad (2.148)$$

Les tenseurs de conductivité thermique effective dominant  $\mathbf{K}_{\ell \ell}$  et couplés  $\mathbf{K}_{\ell g}$  et  $\mathbf{K}_{\ell s}$  de (2.145) sont définis par :

$$\mathbf{K}_{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \mathbf{b}_{\ell g} dA - (\rho C_p)_\ell \langle \tilde{\mathbf{v}}_\ell \mathbf{b}_{\ell g} \rangle \quad (2.149)$$

$$\mathbf{K}_{\ell \ell} = \varepsilon_\ell k_\ell \mathbf{I} + \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \mathbf{b}_{\ell \ell} dA - (\rho C_p)_\ell \langle \tilde{\mathbf{v}}_\ell \mathbf{b}_{\ell \ell} \rangle \quad (2.150)$$

$$\mathbf{K}_{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \mathbf{b}_{\ell s} dA - (\rho C_p)_\ell \langle \tilde{\mathbf{v}}_\ell \mathbf{b}_{\ell s} \rangle \quad (2.151)$$

Finalement, la forme fermée de l'équation de transport macroscopique pour la phase solide s'écrit :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} - \mathbf{u}_{sg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g - \mathbf{u}_{s\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell - \mathbf{u}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \\
& - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{li}^s \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \right] - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{gi}^s \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) \right] \\
& - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{si}^s \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \right] = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{sg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{s\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) \\
& - \nabla \varepsilon_s \cdot k_s \nabla \langle T_s \rangle^s - \left( h_{li}^{s\ell} + h_{li}^{sg} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \\
& - \left( h_{gi}^{s\ell} + h_{gi}^{sg} \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - \left( h_{si}^{s\ell} + h_{si}^{sg} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) + \varepsilon_s \langle \varpi_s \rangle^s
\end{aligned} \tag{2.152}$$

Ici encore, les pseudo-vitesses et les coefficients d'échange effectifs de (2.152) sont définis respectivement à partir des relations des problèmes de fermeture IV à VI et I à III. Les pseudo-vitesses supplémentaires sont définies par :

$$\mathbf{d}_{li}^s = -\frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} s_{li}^s dA - \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} s_{li}^s dA \tag{2.153}$$

$$\mathbf{d}_{gi}^s = -\frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} s_{gi}^s dA - \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} s_{gi}^s dA \tag{2.154}$$

$$\mathbf{d}_{si}^s = -\frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} s_{si}^s dA - \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} s_{si}^s dA \tag{2.155}$$

Enfin, les tenseurs de conductivité thermique effective dominant  $\mathbf{K}_{ss}$  et couplés  $\mathbf{K}_{sg}$  et  $\mathbf{K}_{s\ell}$  de (2.152) sont définis par :

$$\mathbf{K}_{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \mathbf{b}_{sg} dA + \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{sg} dA \tag{2.156}$$

$$\mathbf{K}_{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \mathbf{b}_{s\ell} dA + \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{s\ell} dA \tag{2.157}$$

$$\mathbf{K}_{ss} = \varepsilon_s k_s \mathbf{I} + \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \mathbf{b}_{ss} dA + \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \mathbf{b}_{ss} dA \tag{2.158}$$

Le modèle macroscopique à trois équations (2.144)-(2.152) proposé dans ce travail se présente sous une forme similaire aux modèles heuristiques à trois équations proposés dans la littérature dans le sens où il représente les échanges de manière quasi-stationnaire. En revanche, en comparaison des modèles heuristiques, le modèle proposé comprend des termes de transport non-traditionnels tels que les pseudo-vitesses et les tenseurs de conductivité thermique effective couplés. Ainsi, le modèle obtenu peut être vu comme une généralisation des modèles à trois équations existants. D'un autre côté, il apparaît beaucoup plus complexe au regard du nombre des coefficients de transport effectifs traduisant une description macroscopique plus précise. Nous verrons dans les prochains chapitres dans quels cas certains termes peuvent être négligés et nous présenterons une comparaison plus détaillée avec les modèles heuristiques à trois équations traditionnels. L'intérêt majeur de l'approche développée dans ce travail réside dans l'estimation des propriétés effectives du modèle. En effet, six problèmes de fermeture sont associés au modèle et ces problèmes permettent de déterminer toutes les propriétés effectives à partir d'une description locale sur une région représentative du milieu étudié.

### 2.3.5 Forme fermée du taux d'évaporation

Pour fermer complètement les équations macroscopiques de conservation d'énergie des phases liquide et vapeur, il reste à obtenir une expression fermée du taux d'évaporation à l'échelle macroscopique. On dispose pour cela de la condition de saut à l'interface liquide-vapeur qui peut s'écrire à partir du bilan de masse sous la forme :

$$\mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g (h_g - h_\ell) (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) = \mathbf{n}_{g\ell} \cdot (k_g \nabla T_g - k_\ell \nabla T_\ell), \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (2.159)$$

Nous rappelons ici que la température sur l'interface liquide-vapeur est *fixée* à la température de saturation, en raison de la condition d'équilibre thermodynamique local. Ainsi, la condition de saut (2.159) n'a pas été utilisée lors du changement d'échelle et apparaît ici comme une *relation auxiliaire* qui peut être utilisée pour développer une forme fermée du taux d'évaporation à l'échelle macroscopique.

Nous nous concentrons dans un premier temps sur le membre de gauche de la condition de saut (2.159). Nous rappelons que lorsque la température de saturation et les capacités calorifiques sont supposées constantes à l'intérieur du volume de prise de moyenne on peut écrire :

$$h_g = \langle h_g \rangle^g + \tilde{h}_g = h_g^{sat} + C_{pg} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + C_{pg} \tilde{T}_g \quad (2.160)$$

$$h_\ell = \langle h_\ell \rangle^\ell + \tilde{h}_\ell = h_\ell^{sat} + C_{p\ell} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) + C_{p\ell} \tilde{T}_\ell \quad (2.161)$$

Les relations (2.160)-(2.161) sont valables en tout point du milieu. En particulier, sur l'interface liquide-vapeur, on a à partir des conditions aux limites (2.78) et (2.79) pour les déviations  $\tilde{T}_\ell$  et  $\tilde{T}_g$  :

$$h_g - h_\ell = h_g^{sat} - h_\ell^{sat} = \Delta h, \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (2.162)$$

Ainsi, l'intégration du premier membre de (2.159) sur l'interface liquide-vapeur conduit, à partir de la relation (2.162) et de la définition (2.28) du taux d'évaporation, à la relation suivante lorsque la chaleur latente de vaporisation  $\Delta h$  ne varie pas significativement à l'intérieur du volume de prise de moyenne :

$$\frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \rho_g (h_g - h_\ell) (\mathbf{v}_g - \mathbf{w}) dA = - \dot{m} \Delta h \quad (2.163)$$

A ce stade de l'analyse, à partir des relations (2.159) et (2.163), le taux d'évaporation à l'échelle macroscopique s'écrit sous la forme :

$$\dot{m} \Delta h = \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot (k_\ell \nabla T_\ell - k_g \nabla T_g) dA \quad (2.164)$$

L'expression (2.164) indique ainsi clairement que l'estimation du taux d'évaporation  $\dot{m}$  est équivalente à l'estimation des transferts de chaleur entre les phases liquide et vapeur. Avant de poursuivre les développements, nous revenons dans un premier temps sur les différentes expressions proposées pour le taux d'évaporation qui ont été présentées dans le chapitre d'introduction.

Nous commençons par revenir sur le modèle à une température qui s'appuie sur l'hypothèse d'équilibre thermique local. Pour que cette hypothèse soit acceptable, les nombres de Fourier locaux (*i.e.* construits à l'échelle microscopique) associés aux trois phases du système doivent être grand devant l'unité [149], en d'autres termes, les transferts de chaleur entre phases sont supposés être infiniment rapides en comparaison des autres phénomènes de transport. Une telle situation est évidemment assez éloignée des situations suggérées par (2.164) et, par suite, la relation

(2.164) n'apporte ici aucune information supplémentaire. Nous rappelons que dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermique local, les températures macroscopiques sont suffisamment proches les unes des autres pour pouvoir être remplacées par une température unique  $\langle T \rangle$  telle que  $\langle T_g \rangle^g \simeq \langle T_\ell \rangle^\ell \simeq \langle T_s \rangle^s \simeq \langle T \rangle$ . En particulier, pour le système à trois phases considéré dans ce travail sans incondensable dans la phase gazeuse, il semble raisonnable à partir de la condition d'équilibre thermodynamique local (2.14) d'assimiler la zone diphasique à une zone quasi-isotherme, c'est-à-dire  $\langle T \rangle \simeq T^{sat}$ . Dans ce cas, pour un milieu poreux chauffé dans son volume, l'équation de transport macroscopique pour  $\langle T \rangle$  dans la zone diphasique conduit, comme nous l'avons vu dans le chapitre d'introduction, à une expression pour le taux d'évaporation :

$$\dot{m} \Delta h = \langle \varpi_s \rangle \quad (2.165)$$

La relation (2.165) permet ainsi d'estimer d'une manière très simple le taux d'évaporation. Il faut cependant souligner que la relation (2.165) est valable uniquement dans la région diphasique et pour  $\langle T \rangle \simeq T^{sat}$ . En particulier,  $\dot{m} = 0$  doit être spécifié explicitement dans les zones monophasiques pour décrire par exemple les transferts de chaleur dans les zones asséchées comme dans [44].

Lorsque l'hypothèse d'équilibre thermique local est abandonnée, il n'est plus possible d'estimer le taux d'évaporation à partir de la relation simple (2.165). Nous avons présenté dans le chapitre d'introduction plusieurs types de modèles quasi-stationnaires à non équilibre local : les modèles à deux équations, un modèle à deux équations et trois températures et les modèles à trois équations.

Le modèle à deux équations proposé par Sözen et Vafai [141] s'appuie sur une hypothèse d'équilibre thermique local entre les phases liquide et vapeur, c'est-à-dire  $\langle T_g \rangle^g \simeq \langle T_\ell \rangle^\ell \simeq \langle T_f \rangle^f$ . En reprenant les arguments évoqués pour le modèle à une équation, on peut raisonnablement considérer que  $\langle T_f \rangle^f \simeq T^{sat}$  dans la zone diphasique. Ainsi, l'équation de transport macroscopique pour  $\langle T_f \rangle^f$  conduit également dans la zone diphasique à une expression pour le taux d'évaporation :

$$\dot{m} \Delta h = h_{fs} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (2.166)$$

Ici encore, la relation (2.166) est valable uniquement dans la zone diphasique et  $\dot{m} = 0$  doit être spécifié dans les régions monophasiques dans le cas d'un coefficient d'échange  $h_{fs}$  constant.

Bien que le modèle proposé par Décossin [47] à deux équations et trois températures ne s'appuie pas sur une hypothèse d'équilibre local, le taux d'évaporation est également estimé à partir de la relation (2.166) sur la base des mêmes arguments. Nous rappelons que ce modèle est caractérisé par deux équations de transport macroscopiques pour  $\langle T_g \rangle^g$  et  $\langle T_s \rangle^s$  et la phase liquide est considérée quasi-isotherme  $\langle T_\ell \rangle^\ell \simeq T^{sat}$ .

D'une manière générale, ces modèles à deux équations peuvent difficilement prendre en compte le sous refroidissement ou la surchauffe des phases fluides dans les régions diphasiques en raison de l'hypothèse  $\langle T_g \rangle^g \simeq \langle T_\ell \rangle^\ell$  ou  $\langle T_\ell \rangle^\ell \simeq T^{sat}$ . En revanche, la description du milieu à partir d'un modèle à trois équations permet de prendre en compte de telles situations puisque, dans ce cas, les échanges de chaleur peuvent avoir trois effets différents : chauffage ou refroidissement des phases liquide et vapeur, et condensation ou évaporation.

Si les modèles à trois équations sont plus riches que les modèles à deux équations, en revanche, ils présentent l'inconvénient d'une description macroscopique des échanges beaucoup plus complexe en raison de la multiplicité des continums. En particulier, il n'est plus possible pour un milieu à trois continums d'exprimer le taux d'évaporation à partir de la relation relativement simple (2.166). Pour estimer le taux d'évaporation, une solution possible consisterait à considérer seulement les deux continums liquide et vapeur pour estimer le second membre de (2.164), comme

cela est illustré sur la figure (2.3).

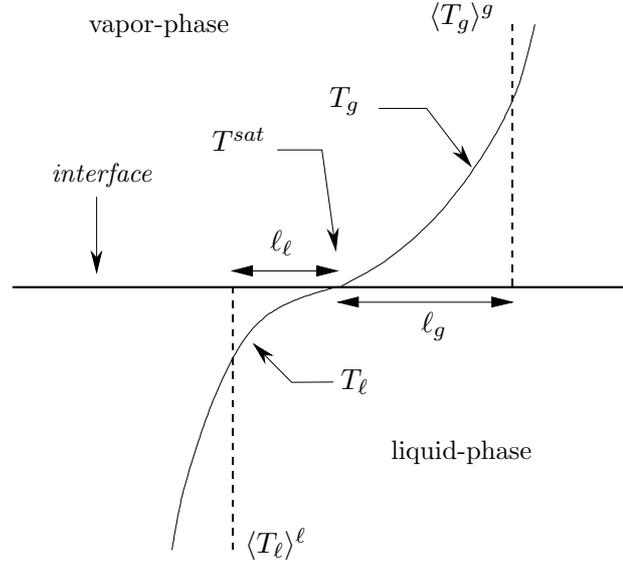


Figure 2.3: Condition d'équilibre thermodynamique local et estimation du taux d'évaporation

Dans ce cas, à partir de l'ordre de grandeur (2.63) des surfaces spécifiques, on pourrait écrire les approximations suivantes pour le second membre de (2.164) :

$$\frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot k_\ell \nabla T_\ell dA \simeq O\left(\frac{\varepsilon_\ell k_\ell}{\ell_\ell^2} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})\right) \quad (2.167)$$

$$\frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot k_g \nabla T_g dA \simeq O\left(\frac{\varepsilon_g k_g}{\ell_g^2} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat})\right) \quad (2.168)$$

Ainsi, le taux d'évaporation devrait s'écrire sous la forme :

$$\dot{m} \Delta h = h_{gi} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + h_{li} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \quad (2.169)$$

Une telle forme a été proposée par Angelini *et al.* [6] et Park *et al.* [113] à partir d'une approche heuristique. Comme nous l'avons indiqué, l'expression (2.169) est construite en ignorant complètement le troisième continuum associé à la phase solide. En particulier, la relation (2.169) indique que les transferts de chaleur avec la phase solide ont un impact direct sur les températures des phases liquide et vapeur et seulement un impact indirect sur le taux d'évaporation. Cette forme pour le taux d'évaporation apparaît ainsi comme un cas particulier d'une forme plus générale qui devrait s'écrire :

$$\dot{m} \Delta h = h_{gi} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + h_{li} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) + h_{si} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (2.170)$$

Une telle forme a été proposée par Berthoud et Valette [19] et Likhanskii *et al.* [97] sur la base d'une approche heuristique. Dans ces deux dernières références, si la forme (2.170) est dérivée d'une manière consistante avec les termes d'échange des équations de transport macroscopiques, en revanche, il n'existe aucune information sur les coefficients d'échange, c'est-à-dire la manière dont les flux sont répartis, puisque ces modèles sont établis à partir d'une approche heuristique. Cette répartition des flux dépend en première approximation, comme le montrent les relations

(2.167)-(2.168), de la distribution des surfaces d'échange dans le volume élémentaire représentatif (*i.e.* des surfaces spécifiques) et nous invitons le lecteur à se reporter au chapitre d'introduction pour les difficultés associées à l'estimation des flux macroscopiques d'échange dans le contexte d'une approche heuristique.

Après cette discussion sur les différentes expressions proposées pour le taux d'évaporation, nous revenons sur la relation (2.164) et nous poursuivons nos développements en nous inspirant des développements menés par Quintard et Whitaker [129] et Hager et Whitaker [72] pour obtenir une forme fermée du taux d'évaporation dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique. Nous rappelons que le taux d'évaporation est donné par la relation (2.164) et nous nous concentrons désormais sur le membre de droite de cette relation.

Dans un premier temps, nous introduisons la décomposition de Gray (A.5) pour les températures  $T_g$  et  $T_\ell$  puis nous utilisons les représentations (2.87) et (2.88) pour les déviations  $\tilde{T}_g$  et  $\tilde{T}_\ell$ . A partir des définitions des coefficients de transport effectifs, le membre de droite de la relation (2.164) s'écrit alors sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot (k_\ell \nabla T_\ell - k_g \nabla T_g) dA &= \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} dA \cdot \left( k_\ell \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell - k_g \nabla \langle T_g \rangle^g \right) \\ &\quad - \left( \mathbf{c}_{\ell g}^{\ell g} + \mathbf{c}_{g g}^{g \ell} \right) \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g - \left( \mathbf{c}_{\ell \ell}^{\ell g} + \mathbf{c}_{g \ell}^{g \ell} \right) \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \\ &\quad - \left( \mathbf{c}_{\ell s}^{\ell g} + \mathbf{c}_{g s}^{g \ell} \right) \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s + \left( h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{g \ell} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \\ &\quad + \left( h_{g i}^{\ell g} + h_{g i}^{g \ell} \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) + \left( h_{s i}^{\ell g} + h_{s i}^{g \ell} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \end{aligned} \quad (2.171)$$

Pour simplifier ce résultat, on peut écrire, à partir des définitions des pseudo-vitesses et des conditions aux limites des problèmes de fermeture IV, V et VI les relations :

$$\mathbf{c}_{\ell g}^{\ell g} + \mathbf{c}_{g g}^{g \ell} = \mathbf{u}_{\ell g} + \mathbf{u}_{g g} + \mathbf{u}_{s g} + \frac{k_g}{V} \int_{A_{g s}} \mathbf{n}_{g s} dA \quad (2.172)$$

$$\mathbf{c}_{\ell \ell}^{\ell g} + \mathbf{c}_{g \ell}^{g \ell} = \mathbf{u}_{\ell \ell} + \mathbf{u}_{g \ell} + \mathbf{u}_{s \ell} + \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} dA \quad (2.173)$$

$$\mathbf{c}_{\ell s}^{\ell g} + \mathbf{c}_{g s}^{g \ell} = \mathbf{u}_{\ell s} + \mathbf{u}_{g s} + \mathbf{u}_{s s} - k_s \nabla \varepsilon_s \quad (2.174)$$

Finalement, à partir de (2.164) et (2.171) et des relations (2.172)-(2.174), nous obtenons l'expression suivante pour la forme fermée du taux d'évaporation :

$$\begin{aligned} \dot{m} \Delta h &= \left( k_g \nabla \varepsilon_g - \mathbf{u}_g^* \right) \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \left( k_\ell \nabla \varepsilon_\ell - \mathbf{u}_\ell^* \right) \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \\ &\quad + \left( k_s \nabla \varepsilon_s - \mathbf{u}_s^* \right) \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s + \left( h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{g \ell} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \\ &\quad + \left( h_{g i}^{\ell g} + h_{g i}^{g \ell} \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) + \left( h_{s i}^{\ell g} + h_{s i}^{g \ell} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \end{aligned} \quad (2.175)$$

où nous avons posé :

$$\mathbf{u}_\ell^* = \mathbf{u}_{\ell \ell} + \mathbf{u}_{g \ell} + \mathbf{u}_{s \ell} \quad (2.176)$$

$$\mathbf{u}_g^* = \mathbf{u}_{\ell g} + \mathbf{u}_{g g} + \mathbf{u}_{s g} \quad (2.177)$$

$$\mathbf{u}_s^* = \mathbf{u}_{\ell s} + \mathbf{u}_{g s} + \mathbf{u}_{s s} \quad (2.178)$$

Nous noterons ici que les termes de transport qualifiés de *non classiques* dans les équations de transport (2.144)-(2.152), *i.e.* les pseudo-vitesses et les gradients de fraction volumique, apparaissent également dans la forme macroscopique (2.175) du taux d'évaporation. Nous noterons également que, si ces termes sont négligeables, le taux d'évaporation (2.175) présente alors une forme similaire à celle proposée à partir d'une approche heuristique, c'est-à-dire la forme (2.170).

### 2.3.6 Liens vers les modèles à deux et une équation

Il est intéressant de connaître les liens entre le modèle à trois équations proposé et le modèle à deux équations obtenus dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermique local entre les phases liquide et vapeur du système d'une part, et le modèle à une équation à équilibre local d'autre part. Ce paragraphe illustre ces liens et montre que le modèle à trois équations dégénère bien vers les modèles à deux et une équation.

#### Modèle à deux équations

Pour connaître le lien entre le modèle à trois équations proposé et le modèle à deux équations, la première étape consiste à sommer les équations de transport macroscopiques des phases liquide (2.145) et vapeur (2.144) afin d'obtenir une seule équation de transport à deux températures. Cette première étape conduit à l'équation de transport suivante :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) + \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right) \\
& - (\mathbf{u}_{gg} + \mathbf{u}_{\ell g}) \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g - (\mathbf{u}_{g\ell} + \mathbf{u}_{\ell\ell}) \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell - (\mathbf{u}_{gs} + \mathbf{u}_{\ell s}) \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \\
& - \nabla \cdot \left[ (\mathbf{d}_{\ell i}^g + \mathbf{d}_{\ell i}^\ell) (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \right] - \nabla \cdot \left[ (\mathbf{d}_{gi}^g + \mathbf{d}_{gi}^\ell) (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) \right] \\
& - \nabla \cdot \left[ (\mathbf{d}_{si}^g + \mathbf{d}_{si}^\ell) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \right] = -\nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g - \nabla \varepsilon_\ell \cdot k_\ell \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \\
& + \nabla \cdot [(\mathbf{K}_{gg} + \mathbf{K}_{\ell g}) \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g] + \nabla \cdot [(\mathbf{K}_{g\ell} + \mathbf{K}_{\ell\ell}) \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell] \\
& + \nabla \cdot [(\mathbf{K}_{gs} + \mathbf{K}_{\ell s}) \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s] - \left( h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs} + h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s} - \dot{m} C_{p\ell} \right) (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \\
& - \left( h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs} + h_{gi}^{\ell g} + h_{gi}^{\ell s} + \dot{m} C_{pg} \right) (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) \\
& - \left( h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{gs} + h_{si}^{\ell g} + h_{si}^{\ell s} \right) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \tag{2.179}
\end{aligned}$$

A ce stade, l'équation de transport (2.179) est assez complexe mais nous allons voir que la forme fermée (2.175) du taux d'évaporation apporte d'importantes simplifications. En effet, il apparaît que si l'on écrit dans (2.175) les termes d'échange entre phases en fonction du taux d'évaporation, des termes en gradient de fraction volumique et des termes portés par les pseudo-vitesses, et que ce résultat est substitué dans (2.179), alors l'équation de transport à deux températures devient :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) + \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right) \\
& + \mathbf{u}_{sg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{u}_{s\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{u}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s - \nabla \cdot \left[ (\mathbf{d}_{\ell i}^g + \mathbf{d}_{\ell i}^\ell) (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \right] \\
& - \nabla \cdot \left[ (\mathbf{d}_{gi}^g + \mathbf{d}_{gi}^\ell) (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) \right] - \nabla \cdot \left[ (\mathbf{d}_{si}^g + \mathbf{d}_{si}^\ell) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \right] \\
& = \nabla \varepsilon_s \cdot k_s \nabla \langle T_s \rangle^s + \nabla \cdot [(\mathbf{K}_{gg} + \mathbf{K}_{\ell g}) \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g] + \nabla \cdot [(\mathbf{K}_{g\ell} + \mathbf{K}_{\ell\ell}) \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell] \\
& + \nabla \cdot [(\mathbf{K}_{gs} + \mathbf{K}_{\ell s}) \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s] - \dot{m} \Delta h \\
& - \left( h_{\ell i}^{gs} + h_{\ell i}^{\ell s} - \dot{m} C_{p\ell} \right) (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \\
& - \left( h_{gi}^{gs} + h_{gi}^{\ell s} + \dot{m} C_{pg} \right) (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) - \left( h_{si}^{gs} + h_{si}^{\ell s} \right) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \tag{2.180}
\end{aligned}$$

Avant d'aller plus loin, il est important de remarquer dès à présent que les pseudo-vitesses et, à partir des conditions aux limites des problèmes de fermeture I à III, les coefficients d'échange sont les opposés de ceux apparaissant dans l'équation de transport macroscopique (2.152) relative à la phase solide.

Plaçons nous désormais dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermique local entre les deux phases liquide et vapeur du système. Dans ce cas, on définit une température macroscopique dite fluide notée  $\langle T_f \rangle^f$  telle que :

$$\langle T_g \rangle^g \simeq \langle T_\ell \rangle^\ell \simeq \langle T_f \rangle^f \quad (2.181)$$

$$\langle T_f \rangle = \frac{1}{V} \int_{V_f} T_f dV = \varepsilon_g \langle T_g \rangle^g + \varepsilon_\ell \langle T_\ell \rangle^\ell \quad (2.182)$$

On obtient ainsi, à partir de cette définition, un modèle à deux températures, fluide et solide, en écrivant formellement l'égalité des températures moyennes intrinsèques des phases liquide et vapeur dans l'équation de transport (2.180) et dans l'équation de transport (2.152) relative à la phase solide :

$$\begin{aligned} & (1 - \varepsilon_s) \langle \rho_f \rangle \langle C_{pf} \rangle \frac{\partial \langle T_f \rangle^f}{\partial t} + \left( \varepsilon_g (\rho C_p)_g \langle \mathbf{v}_g \rangle^g + \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \right) \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f \\ & - \mathbf{u}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - \mathbf{u}_{fs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{fi}^f \left( \langle T_f \rangle^f - T^{sat} \right) \right] - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{si}^f \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \right] \\ & = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{ff} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{fs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) + \nabla \varepsilon_s \cdot k_s \nabla \langle T_s \rangle^s \\ & + h_{fi} \left( \langle T_f \rangle^f - T^{sat} \right) + h_{si} \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) - \dot{m} \langle \Delta h \rangle \end{aligned} \quad (2.183)$$

$$\begin{aligned} & \varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} - \mathbf{u}_{sf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f - \mathbf{u}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{fi}^s \left( \langle T_f \rangle^f - T^{sat} \right) \right] \\ & - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}_{si}^s \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \right] = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{sf} \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + \mathbf{K}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) - \nabla \varepsilon_s \cdot k_s \nabla \langle T_s \rangle^s \\ & - h_{fi} \left( \langle T_f \rangle^f - T^{sat} \right) - h_{si} \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) + \varepsilon_s \langle \varpi_s \rangle^s \end{aligned} \quad (2.184)$$

Les coefficients de transport effectifs intervenant dans ces deux équations sont donnés explicitement en fonction des coefficients du modèle à trois équations par :

$$\mathbf{K}_{ff} = \mathbf{K}_{gg} + \mathbf{K}_{lg} + \mathbf{K}_{gl} + \mathbf{K}_{\ell\ell} \quad (2.185)$$

$$\mathbf{K}_{fs} = \mathbf{K}_{gs} + \mathbf{K}_{\ell s} \quad (2.186)$$

$$\mathbf{K}_{sf} = \mathbf{K}_{sg} + \mathbf{K}_{s\ell} \quad (2.187)$$

$$\mathbf{u}_{sf} = -\mathbf{u}_{ff} = \mathbf{u}_{sg} + \mathbf{u}_{s\ell} \quad (2.188)$$

$$\mathbf{u}_{fs} = -\mathbf{u}_{ss} \quad (2.189)$$

$$\mathbf{d}_{si}^f = \mathbf{d}_{si}^g + \mathbf{d}_{si}^\ell \quad (2.190)$$

$$\mathbf{d}_{fi}^f = \mathbf{d}_{\ell i}^g + \mathbf{d}_{\ell i}^\ell + \mathbf{d}_{gi}^g + \mathbf{d}_{gi}^\ell \quad (2.191)$$

$$\mathbf{d}_{fi}^s = \mathbf{d}_{\ell i}^s + \mathbf{d}_{gi}^s \quad (2.192)$$

$$h_{si} = h_{si}^{\ell} + h_{si}^{sg} = - \left( h_{si}^{\ell s} + h_{si}^{gs} \right) \quad (2.193)$$

$$h_{fi} = h_{\ell i}^{\ell} + h_{\ell i}^{sg} + h_{gi}^{\ell} + h_{gi}^{sg} = - \left( h_{\ell i}^{\ell s} + h_{\ell i}^{gs} + h_{gi}^{\ell s} + h_{gi}^{gs} \right) \quad (2.194)$$

Dans (2.183),  $\langle \rho_f \rangle$  et  $\langle C_{pf} \rangle$  désignent respectivement la densité et la capacité calorifique du mélange liquide-vapeur et sont définies par :

$$\langle \rho_f \rangle = \varepsilon_g \rho_g + \varepsilon_\ell \rho_\ell, \quad \langle \rho_f C_{pf} \rangle = \langle \rho_f \rangle \langle C_{pf} \rangle = \frac{\varepsilon_g (\rho C_p)_g + \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell}{1 - \varepsilon_s} \quad (2.195)$$

La grandeur  $\langle \Delta h \rangle$  désigne l'enthalpie de changement de phase du mélange liquide-vapeur à l'échelle macroscopique et est définie par :

$$\langle \Delta h \rangle = \Delta h + (C_{pg} - C_{p\ell}) \left( \langle T_f \rangle^f - T^{sat} \right) \quad (2.196)$$

Enfin, dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermique local entre les phases liquide et vapeur, le taux d'évaporation (2.175) s'écrit sous la forme plus condensée :

$$\begin{aligned} \dot{m} \Delta h &= (k_g \nabla \varepsilon_g + k_\ell \nabla \varepsilon_\ell - \mathbf{u}_f^*) \cdot \nabla \langle T_f \rangle^f + (k_s \nabla \varepsilon_s - \mathbf{u}_s^*) \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \\ &+ h_{fi}^* \left( \langle T_f \rangle^f - T^{sat} \right) + h_{si}^* \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \end{aligned} \quad (2.197)$$

avec :

$$\mathbf{u}_f^* = \mathbf{u}_g^* + \mathbf{u}_\ell^* \quad (2.198)$$

$$h_{fi}^* = h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{\ell g} + h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{\ell g} \quad (2.199)$$

$$h_{si}^* = h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{\ell g} \quad (2.200)$$

### Modèle à une équation

En reprenant la démarche menée pour établir un modèle à deux équations, la première étape consiste à sommer les trois équations de transport macroscopiques des phases liquide, vapeur et solide pour obtenir une seule équation à trois températures. On peut bénéficier ici des simplifications et des résultats précédents et il suffit de sommer l'équation (2.180) pour les températures moyennes intrinsèques des phases liquide et vapeur avec l'équation de transport (2.152) relative à la phase solide. Ainsi l'équation à trois températures s'écrit :

$$\begin{aligned} &\varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) + \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right) \\ &+ \varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} - \nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{d}_{\ell i}^g + \mathbf{d}_{\ell i}^\ell + \mathbf{d}_{\ell i}^s \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \right] \\ &- \nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{d}_{gi}^g + \mathbf{d}_{gi}^\ell + \mathbf{d}_{gi}^s \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) \right] - \nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{d}_{si}^g + \mathbf{d}_{si}^\ell + \mathbf{d}_{si}^s \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \right] \\ &= \nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{K}_{gg} + \mathbf{K}_{\ell g} + \mathbf{K}_{sg} \right) \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right] + \nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{K}_{g\ell} + \mathbf{K}_{\ell\ell} + \mathbf{K}_{s\ell} \right) \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right] \\ &+ \nabla \cdot \left[ \left( \mathbf{K}_{gs} + \mathbf{K}_{\ell s} + \mathbf{K}_{ss} \right) \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right] + \varepsilon_s \langle \varpi_s \rangle^s \\ &- \dot{m} \left( \Delta h + C_{pg} \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - C_{p\ell} \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.201)$$

Dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermique local, les températures moyennes des trois phases sont suffisamment proches les unes des autres pour pouvoir être remplacées par une température macroscopique unique  $\langle T \rangle$  telle que :

$$\langle T_g \rangle^g \simeq \langle T_\ell \rangle^\ell \simeq \langle T_s \rangle^s \simeq \langle T \rangle \quad (2.202)$$

$$\langle T \rangle = \frac{1}{V} \int_V T dV = \varepsilon_g \langle T_g \rangle^g + \varepsilon_\ell \langle T_\ell \rangle^\ell + \varepsilon_s \langle T_s \rangle^s \quad (2.203)$$

On obtient ainsi à partir de cette définition un modèle à une équation à équilibre thermique local en écrivant formellement l'égalité des températures moyennes intrinsèques dans l'équation de transport macroscopique à trois températures (2.201) :

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \langle C_p \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \left( (\rho C_p)_g \langle \mathbf{v}_g \rangle + (\rho C_p)_\ell \langle \mathbf{v}_\ell \rangle \right) \cdot \nabla \langle T \rangle - \nabla \cdot \left[ \mathbf{d}^* \left( \langle T \rangle - T^{sat} \right) \right] \\ = \nabla \cdot \left( \mathbf{K}^* \cdot \nabla \langle T \rangle \right) - \dot{m} \langle \Delta h \rangle + \varepsilon_s \langle \varpi_s \rangle^s \end{aligned} \quad (2.204)$$

Dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermique local, le taux d'évaporation dégénère en :

$$\dot{m} \Delta h = (k_g \nabla \varepsilon_g + k_\ell \nabla \varepsilon_\ell + k_s \nabla \varepsilon_s - \mathbf{u}^*) \cdot \nabla \langle T \rangle + h^* \left( \langle T \rangle - T^{sat} \right) \quad (2.205)$$

Dans (2.204) et (2.205), les propriétés effectives et les grandeurs macroscopiques sont définies par :

$$\mathbf{K}^* = \mathbf{K}_{gg} + \mathbf{K}_{lg} + \mathbf{K}_{sg} + \mathbf{K}_{gl} + \mathbf{K}_{ll} + \mathbf{K}_{sl} + \mathbf{K}_{gs} + \mathbf{K}_{ls} + \mathbf{K}_{ss} \quad (2.206)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}_g^* + \mathbf{u}_l^* + \mathbf{u}_s^* \quad (2.207)$$

$$\mathbf{d}^* = \mathbf{d}_{li}^g + \mathbf{d}_{li}^l + \mathbf{d}_{li}^s + \mathbf{d}_{gi}^g + \mathbf{d}_{gi}^l + \mathbf{d}_{gi}^s + \mathbf{d}_{si}^g + \mathbf{d}_{si}^l + \mathbf{d}_{si}^s \quad (2.208)$$

$$h^* = h_{li}^{gl} + h_{li}^{lg} + h_{gi}^{gl} + h_{gi}^{lg} + h_{si}^{gl} + h_{si}^{lg} \quad (2.209)$$

$$\langle \rho \rangle \langle C_p \rangle = \varepsilon_g (\rho C_p)_g + \varepsilon_l (\rho C_p)_l + \varepsilon_s (\rho C_p)_s \quad (2.210)$$

$$\langle \Delta h \rangle = \Delta h + (C_{pg} - C_{pl}) (\langle T \rangle - T^{sat}) \quad (2.211)$$

## 2.4 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre un **modèle macroscopique à non équilibre thermique local** pour la description macroscopique des transferts de masse et de chaleur dans un milieu poreux parcouru par un écoulement diphasique avec changement de phase. Ce modèle ne fait pas l'hypothèse d'équilibre thermique local entre les trois phases du système et a été obtenu dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique.

Après avoir indiqué les différentes hypothèses physiques à l'échelle du pore : matrice solide consolidée, phase gazeuse constituée uniquement de vapeur, condition d'équilibre thermodynamique local et découplage du problème des transferts de chaleur du problème de l'écoulement, nous avons procédé dans un premier temps à la prise de moyenne volumique des équations de transport locales qui conduit à une forme dite non fermée des équations de transport macroscopiques.

A la suite de cette étape, nous avons discuté sur l'**approximation du problème mixte**, c'est-à-dire le problème couplé en grandeurs moyennes et grandeurs fluctuantes, qui conduit à une forme fermée des équations macroscopiques. Devant la complexité du problème considéré, cette approximation est construite dans le cadre d'une **théorie quasi-statique** pour laquelle les interfaces liquide-vapeur sont supposées évoluer de manière quasi-stationnaire à l'échelle du pore. Si une telle hypothèse est assez éloignée des situations d'ébullition intense, nous avons souligné qu'elle était en revanche cohérente avec la théorie quasi-statique développée pour la description macroscopique de l'écoulement diphasique conduisant à une description du type loi de Darcy généralisée qu'on utilise généralement pour la quantité de mouvement.

Dans ce contexte de quasi-staticité des interfaces, nous avons ensuite proposé une **approximation quasi-stationnaire** du problème mixte pour laquelle les déviations de températures sont écrites sous la forme d'une combinaison linéaire des termes sources macroscopiques. Les représentations (2.87)-(2.89) proposées pour les déviations constituent les relations de fermeture qui permettent d'obtenir un modèle macroscopique fermé. Une des caractéristiques originales de l'approche développée a concerné l'établissement d'une **forme fermée pour le taux d'évaporation** à l'échelle macroscopique qui s'appuie sur le bilan enthalpique à l'interface liquide-vapeur et qui est développée d'une manière consistante avec l'approximation proposée pour le problème mixte.

Le modèle macroscopique obtenu se présente sous la forme d'un **modèle quasi-stationnaire à trois équations** et peut être vu comme une généralisation des modèles heuristiques traditionnels. De plus, nous avons vu que, sans faire d'hypothèses supplémentaires, le modèle dégénérerait naturellement vers les modèles à deux et une équation. S'il est encore trop tôt pour le comparer aux modèles heuristiques actuels, le modèle proposé ici apparaît cependant plus riche dans le sens où il comprend des termes supplémentaires qui n'apparaissent jamais dans les modèles

traditionnels. Nous reviendrons sur ces termes dans le prochain chapitre en apportant quelques éléments de discussion sur leur importance.

L'intérêt majeur de l'approche développée ici est de proposer **six problèmes de fermeture** qui fournissent une relation explicite claire entre la description à l'échelle locale et les coefficients de transport effectifs du modèle. En particulier, la résolution de ces problèmes sur des **cellules unitaires représentatives** du milieu permet de déterminer l'ensemble des propriétés effectives. La suite de ce mémoire est consacrée à la résolution de ces problèmes et à l'estimation des coefficients de transport effectifs, pour des géométries simples puis plus complexes.

## Chapitre 3

# Propriétés effectives : cellules unitaires simples

Nous avons vu dans le chapitre 2 que le modèle macroscopique quasi-stationnaire obtenu à partir de la méthode de prise de moyenne volumique possédait la même structure que les modèles heuristiques traditionnels à trois températures. Cependant, on peut constater plusieurs différences entre les équations (2.144)-(2.152) et les équations (1.15)-(1.17) des modèles heuristiques présentées dans le chapitre d'introduction. La principale différence est la présence de termes de couplage supplémentaires dont certains peuvent être qualifiés de *non classiques*. En effet, si pour les modèles heuristiques, les couplages entre chaque continuum sont représentés principalement par les coefficients d'échange entre phases, en revanche, le modèle proposé ici contient des termes de couplage supplémentaires représentés non seulement par les tenseurs de conductivité thermique effective couplés mais également par les vitesses de transport additionnelles, c'est-à-dire les termes *pseudo-convectifs*. Ces vitesses, ainsi que les termes faisant intervenir les gradients de fraction volumique, n'apparaissent jamais dans les modèles macroscopiques actuels et, à ce titre, constituent les termes de transport non classiques du modèle. Ainsi, ce modèle apparaît comme une généralisation des modèles quasi-stationnaires à trois températures existants. Comme nous l'avons vu, il possède en contre partie un nombre plus élevé de coefficients de transport effectifs qui traduit une description macroscopique plus précise. Cependant, l'intérêt majeur de l'approche développée dans ce travail est de proposer six problèmes de fermeture qui permettent de calculer l'ensemble des coefficients de transport du modèle sur des cellules unitaires représentatives.

Pour être représentatives d'un milieu poreux réel, les cellules unitaires doivent évidemment contenir le plus d'informations possibles relatives à la structure du milieu ainsi qu'à la topologie des interfaces liquide-vapeur et à la structure de l'écoulement. L'étude de ce type de cellule passe alors au préalable par une connaissance fine de l'écoulement diphasique à l'échelle du pore, c'est-à-dire par une simulation numérique directe, et par une résolution numérique des problèmes de fermeture. Avant d'aborder l'étude de ce type de cellule, il est intéressant et instructif d'étudier dans un premier temps des cellules plus simples qui sont certes moins réalistes mais permettent d'obtenir assez rapidement des informations sur les propriétés effectives.

Ainsi, nous nous intéressons dans ce chapitre à deux cellules unitaires simples représentatives respectivement d'un milieu stratifié et d'un milieu ayant une structure géométrique analogue à un arrangement de tubes capillaires. Pour ces cellules, nous considérons deux configurations types : une configuration classique pour les milieux non saturés où la phase liquide est mouillante, et une configuration plus spécifique aux problèmes d'ébullition où la phase vapeur est "mouillante", c'est-à-dire lorsqu'un film stable de vapeur recouvre entièrement la matrice solide surchauffée. La simplicité géométrique de ces cellules offre la possibilité de résoudre analytiquement les six

problèmes de fermeture et d'obtenir ainsi les coefficients de transport du modèle de manière analytique.

Nous présentons dans un premier temps quelques caractéristiques des problèmes de fermeture puis nous menons une étude détaillée sur la cellule unitaire représentative d'un milieu stratifié. Bien que cette cellule soit assez éloignée d'un milieu réel, elle permet d'obtenir des expressions analytiques pour l'ensemble des coefficients de transport du modèle et ainsi d'apporter les premiers éléments de discussion sur la comparaison du modèle avec les modèles à non équilibre actuels. Nous verrons dans ce chapitre qu'elle permet également d'introduire quelques remarques concernant la signification de la phase mouillante au regard des déséquilibres thermiques macroscopiques relatifs à la température de saturation. La deuxième cellule considérée est déjà plus complexe et nous limiterons nos développements au calcul des coefficients d'échange entre phases. A la suite de cette étape, nous disposons d'un modèle macroscopique complètement fermé pour les milieux considérés dans le sens où les propriétés effectives sont désormais connues sur les deux cellules unitaires représentatives de ces milieux. Nous cherchons alors à estimer la qualité de l'approximation du problème mixte proposée. Pour cela, la solution macroscopique prédite par le modèle est comparée à la solution obtenue à partir d'une résolution directe du problème à l'échelle du pore, c'est-à-dire ici à l'échelle de la cellule unitaire, pour un problème de chauffage volumique de la matrice solide et un problème de relaxation vers la température d'équilibre. Si ces expériences numériques sont menées pour des problèmes *simples* de conduction avec changement de phase, elles permettent cependant d'illustrer le bon comportement de l'approximation quasi-stationnaire dans le cas purement diffusif et elles laissent entrevoir les potentialités du modèle macroscopique pour les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris surchauffés.

### 3.1 Caractéristiques des problèmes de fermeture

Sous leur forme instationnaire ou quasi-stationnaire, les problèmes de fermeture ont pour caractéristique commune de se présenter sous la forme d'un système d'équations intégro-différentielles. Ces problèmes font en effet intervenir des intégrales surfaciques des solutions en tant que termes sources volumiques dans les équations de transport pour les solutions. Si cette caractéristique est classique et que des solutions ont été proposées pour les systèmes à deux phases [123, 119] pour éviter la résolution d'un problème intégro-différentiel, nous verrons dans le chapitre 5 que le cas à trois phases pose des difficultés supplémentaires. La méthode de résolution numérique de ces problèmes est présentée dans le chapitre 5.

Nous présentons ici quelques remarques concernant la forme et la résolution de ces problèmes pour les types de cellules unitaires considérées dans ce chapitre. Les problèmes I à III d'une part et les problèmes IV à VI d'autre part présentant une structure similaire, ces remarques sont illustrées au travers des problèmes I et IV.

Comme nous l'avons indiqué en introduction de ce chapitre, nous nous intéressons à deux configurations types où une seule phase est mouillante. Ces configurations correspondent, comme le notent Bloch et Auriault [21], à des écoulements annulaires et nous allons voir que cette répartition particulière des phases apporte des simplifications importantes pour les problèmes de fermeture. Il faut souligner que ces simplifications ne sont pas restreintes aux cellules simples, les écoulements de type annulaire peuvent en effet être observés pour beaucoup de milieux poreux réels. Plaçons nous par exemple dans la situation où la phase vapeur est mouillante. Dans ce

cas, à partir du théorème de moyenne spatiale (A.9), on a :

$$\nabla \varepsilon_g = -\frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} dA \quad (3.1)$$

$$\nabla \varepsilon_\ell = -\frac{1}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} dA \quad (3.2)$$

$$\nabla \varepsilon_s = -\frac{1}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{s\ell} dA \quad (3.3)$$

En raison des conditions de périodicité, on doit satisfaire simultanément sur la cellule unitaire (mais pas à l'échelle macroscopique) les trois conditions :  $\nabla \varepsilon_g = 0$ ,  $\nabla \varepsilon_\ell = 0$  et  $\nabla \varepsilon_s = 0$  et, par conséquent, toutes les intégrales de surface de (3.1)-(3.3) sont nulles. Ceci apporte ainsi une première simplification pour les problèmes IV à VI concernant les relations entre les vecteurs définissant les pseudo-vitesses.

De plus, pour une configuration annulaire, la condition d'équilibre thermodynamique local introduit un découplage particulier et conduit à deux sous-problèmes indépendants. Si on reprend l'exemple de la phase vapeur mouillante, le problème I se décompose en :

#### Problème I-a

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla s_{\ell i}^\ell = k_\ell \nabla^2 s_{\ell i}^\ell - \varepsilon_\ell^{-1} h_{\ell i}^{\ell g}, \quad \text{dans la phase } \ell \quad (3.4)$$

$$s_{\ell i}^\ell = 1, \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (3.5)$$

$$s_{\ell i}^\ell(\mathbf{r} + l_i) = s_{\ell i}^\ell(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.6)$$

$$\langle s_{\ell i}^\ell \rangle^\ell = 0 \quad (3.7)$$

#### Problème I-b

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla s_{\ell i}^g = k_g \nabla^2 s_{\ell i}^g - \varepsilon_g^{-1} (h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs}), \quad \text{dans la phase } g \quad (3.8)$$

$$0 = k_s \nabla^2 s_{\ell i}^s + \varepsilon_s^{-1} h_{\ell i}^{gs}, \quad \text{dans la phase } s \quad (3.9)$$

$$s_{\ell i}^g = 0, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (3.10)$$

$$s_{\ell i}^g = s_{\ell i}^s, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (3.11)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla s_{\ell i}^g = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla s_{\ell i}^s, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (3.12)$$

$$s_{\ell i}^g(\mathbf{r} + l_i) = s_{\ell i}^g(\mathbf{r}), \quad s_{\ell i}^s(\mathbf{r} + l_i) = s_{\ell i}^s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.13)$$

$$\langle s_{\ell i}^g \rangle^g = 0, \quad \langle s_{\ell i}^s \rangle^s = 0 \quad (3.14)$$

De la même manière, le problème IV se décompose en :

#### Problème IV-a

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell g} = k_\ell \nabla^2 \mathbf{b}_{\ell g} - \varepsilon_\ell^{-1} \mathbf{u}_{\ell g}, \quad \text{dans la phase } \ell \quad (3.15)$$

$$\mathbf{b}_{\ell g} = 0, \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (3.16)$$

$$\mathbf{b}_{\ell g}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{\ell g}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.17)$$

$$\langle \mathbf{b}_{\ell g} \rangle^\ell = 0 \quad (3.18)$$

**Problème IV-b**

$$(\rho C_p)_g (\mathbf{v}_g \cdot \nabla \mathbf{b}_{gg} + \tilde{\mathbf{v}}_g) = k_g \nabla^2 \mathbf{b}_{gg} - \varepsilon_g^{-1} \mathbf{u}_{gg}, \quad \text{dans la phase } g \quad (3.19)$$

$$0 = k_s \nabla^2 \mathbf{b}_{sg} - \varepsilon_s^{-1} \mathbf{u}_{sg}, \quad \text{dans la phase } s \quad (3.20)$$

$$\mathbf{b}_{gg} = 0, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (3.21)$$

$$\mathbf{b}_{gg} = \mathbf{b}_{sg}, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (3.22)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla \mathbf{b}_{gg} + \mathbf{n}_{gs} k_g = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{sg}, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (3.23)$$

$$\mathbf{b}_{gg}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{gg}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{b}_{sg}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{sg}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.24)$$

$$\langle \mathbf{b}_{gg} \rangle^g = 0, \quad \langle \mathbf{b}_{sg} \rangle^s = 0 \quad (3.25)$$

Ainsi, dans le cas où la phase vapeur mouille parfaitement la phase solide, les inconnues de fermeture relatives à la phase liquide peuvent être déterminées indépendamment des deux autres phases dans les problèmes I à III et IV à VI. On obtient évidemment le même résultat pour les inconnues de fermeture relatives à la phase vapeur lorsque la répartition des phases est inversée. Ce résultat est relativement important car il permet d'estimer les propriétés effectives à partir de problèmes beaucoup plus simples et, comme nous l'avons indiqué, la configuration annulaire peut être représentative d'un grand nombre de milieux poreux réels. Il est également intéressant de remarquer que ces deux sous-problèmes sont similaires aux problèmes obtenus pour d'autres problèmes de transport en milieu poreux. Le problème IV-a présente en effet une analogie avec ceux obtenus pour le transport de contaminants en milieu poreux [39, 125] et le problème IV-b présente certaines similitudes avec ceux obtenus pour les transferts de chaleur dans les systèmes à deux phases [33, 95, 123, 119]. En particulier, selon la répartition des phases, les problèmes de fermeture I à VI pour la phase non mouillante sont identiques aux problèmes obtenus par Bousquet-Mélou *et al.* [25] pour les problèmes de transport de soluté au cours de la solidification d'un mélange binaire.

A ce stade de l'analyse, il semble difficile d'apporter des simplifications supplémentaires sans préciser une géométrie de la cellule unitaire. Deux types de cellules sont considérés dans la suite de ce chapitre mais avant de présenter ces cellules nous notons ici une dernière simplification pour des problèmes purement diffusifs. Pour ces problèmes, on peut montrer que lorsque les cellules considérées possèdent un axe de symétrie<sup>1</sup>, les vecteurs  $\mathbf{c}_{gg}^{\ell}$ ,  $\mathbf{c}_{gg}^{gs}$ , ..., des problèmes de fermeture IV à VI sont tous identiquement nuls. Le lecteur intéressé pourra se reporter à Quintard et Whitaker [123] pour une démonstration de ce résultat. Ceci constitue une importante simplification du modèle macroscopique puisque cela signifie que les pseudo-vitesses  $\mathbf{u}_{gg}$ ,  $\mathbf{u}_{\ell g}$ , ..., sont toutes identiquement nulles pour des problèmes purement diffusifs et lorsque la cellule unitaire est symétrique. Dans le cas diffusif, ce résultat est relativement important car il n'est pas limité à des géométries élémentaires, les cellules unitaires symétriques pouvant en effet être extrêmement complexes [123].

### 3.2 Cellule unitaire stratifiée

Nous présentons dans cette partie une étude détaillée de la cellule unitaire représentative d'un milieu stratifié. Ce type de cellule, très simple, a largement été étudié dans le cadre des systèmes à deux phases pour d'une part, déterminer les coefficients de transport effectifs [2, 104, 121, 125, 119] et, d'autre part, estimer la validité des modèles macroscopiques [60, 104, 106, 126, 128, 120]. L'étude de ce type de cellule a récemment été étendue aux systèmes à trois phases sans changement de phase par Petit *et al.* [117] pour le calcul des coefficients d'échange dans le cadre

<sup>1</sup>on parle dans ce cas de *cellules symétriques*

d'un modèle quasi-stationnaire à non équilibre local. Nous reprenons ici la cellule stratifiée à trois phases pour déterminer l'ensemble des coefficients de transport du modèle.

La cellule unitaire stratifiée est illustrée sur la figure (3.1) pour les deux configurations types : phase liquide mouillante, désignée par SLG, et phase vapeur mouillante, désignée par SGL. On supposera ici que l'écoulement est laminaire et correspond à un écoulement co-courant des phases liquide et vapeur le long de la direction  $x$ . La longueur caractéristique  $H$  de la cellule unitaire est donnée par la relation :

$$H = l_g + l_\ell + l_s = H(\varepsilon_g + \varepsilon_\ell + \varepsilon_s), \quad l_g = H\varepsilon_g, \quad l_\ell = H\varepsilon_\ell, \quad l_s = H\varepsilon_s$$

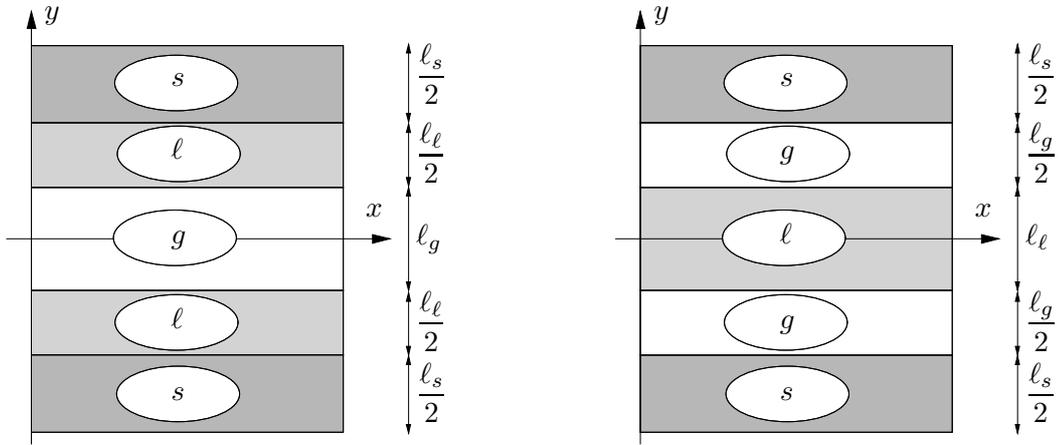


Figure 3.1: Cellule unitaire stratifiée symétrique 1D : configurations SLG et SGL

Etant donné la géométrie de la cellule stratifiée, il est possible d'apporter des simplifications supplémentaires à celles présentées dans le paragraphe précédent pour les problèmes de fermeture. En suivant les développements de Quintard et Whitaker [123] et Whitaker [154], on peut montrer d'une part, que les inconnues de fermeture scalaires (problèmes I à III) et vectorielles (problèmes IV à VI) dépendent uniquement de la variable d'espace  $y$  en raison des conditions de périodicité et, d'autre part, que les inconnues scalaires ainsi que la composante axiale des inconnues vectorielles sont symétriques par rapport à l'axe  $x$  et les composantes transverses sont anti-symétriques par rapport à l'axe  $x$ .

L'écoulement étant dirigé selon la direction  $x$ , on remarque ainsi que les vitesses ne jouent aucun rôle dans les problèmes de fermeture I à III pour les inconnues scalaires et, par suite, pour les coefficients d'échange. De plus, ces inconnues étant symétriques, les problèmes I-a (3.4)-(3.7) et I-b (3.8)-(3.14) peuvent s'écrire sur la demi-cellule  $y \geq 0$  :

#### Problème I-a

$$k_\ell \frac{d^2 s_{\ell i}^\ell}{dy^2} - \varepsilon_\ell^{-1} h_{\ell i}^{\ell g} = 0, \quad \text{pour } 0 \leq y \leq \frac{\ell_\ell}{2} \quad (3.26)$$

$$s_{\ell i}^\ell = 1, \quad \text{en } y = \frac{\ell_\ell}{2} \quad (3.27)$$

$$\langle s_{\ell i}^\ell \rangle^\ell = 0 \quad (3.28)$$

**Problème I-b**

$$k_g \frac{d^2 s_{\ell i}^g}{dy^2} - \varepsilon_g^{-1} \left( h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs} \right) = 0, \quad \text{pour } \frac{\ell_\ell}{2} \leq y \leq \frac{\ell_\ell + \ell_g}{2} \quad (3.29)$$

$$k_s \frac{d^2 s_{\ell i}^s}{dy^2} + \varepsilon_s^{-1} h_{\ell i}^{gs} = 0, \quad \text{pour } \frac{\ell_\ell + \ell_g}{2} \leq y \leq \frac{H}{2} \quad (3.30)$$

$$s_{\ell i}^g = 0, \quad \text{en } y = \frac{\ell_\ell}{2} \quad (3.31)$$

$$s_{\ell i}^g = s_{\ell i}^s, \quad \text{en } y = \frac{\ell_\ell + \ell_g}{2} \quad (3.32)$$

$$k_g \frac{ds_{\ell i}^g}{dy} = k_s \frac{ds_{\ell i}^s}{dy}, \quad \text{en } y = \frac{\ell_\ell + \ell_g}{2} \quad (3.33)$$

$$\langle s_{\ell i}^g \rangle^g = 0, \quad \langle s_{\ell i}^s \rangle^s = 0 \quad (3.34)$$

Les conditions de périodicité (3.6) et (3.13) sont remplacées par les conditions de symétrie :

$$\frac{ds_{\ell i}^\ell}{dy} = 0, \quad \text{en } y = 0, \quad \frac{ds_{\ell i}^s}{dy} = 0, \quad \text{en } y = \frac{H}{2} \quad (3.35)$$

La méthodologie pour résoudre analytiquement ces problèmes est classique [123] : dans un premier temps les coefficients d'échange sont supposés *a priori* connus et les problèmes I-a et I-b sont résolus sans les conditions de moyenne nulle (3.28) et (3.34). On obtient alors pour les inconnues de fermeture des paraboles paramétrées par les coefficients d'échange. Dans un deuxième temps, les conditions de moyenne, qui rappellent le sont les conditions d'unicité de la solution, sont ensuite utilisées pour déterminer les coefficients d'échange et préciser le paramétrage des paraboles.

La résolution analytique des problèmes IV à VI pour les inconnues vectorielles s'appuie sur une démarche similaire mais il faut noter deux différences importantes. La première est que, comme nous l'avons signalé, les inconnues transverses sont anti-symétriques et, par conséquent, il faut substituer les conditions du type (3.35) par des conditions d'anti-symétrie. En pratique, pour la cellule stratifiée, ces conditions s'écrivent pour le problème IV [110] :

$$(\mathbf{b}_{\ell g})_y = 0, \quad \text{en } y = 0, \quad (\mathbf{b}_{sg})_y = 0, \quad \text{en } y = \frac{H}{2} \quad (3.36)$$

Evidemment, les conditions de moyenne nulle n'apportent aucune information supplémentaire lorsque les inconnues sont anti-symétriques, cependant ces conditions ne sont pas nécessaires car la condition d'anti-symétrie indique que la composante transverse des vecteurs  $\mathbf{c}_{gg}^{g\ell}$ ,  $\mathbf{c}_{gg}^{gs}$ , ..., est identiquement nulle.

La deuxième différence provient de la composante axiale des inconnues de fermeture vectorielles. En effet, si ces composantes sont symétriques comme les inconnues scalaires, en revanche les vitesses jouent un rôle pour ces inconnues. Par exemple, la résolution du problème IV-b projeté selon  $x$  nécessite la connaissance de la déviation  $\tilde{\mathbf{v}}_g$  selon  $x$  qui apparaît en tant que terme source dans l'équation de transport (3.19) pour  $\mathbf{b}_{gg}$ . De plus, ces vitesses apparaissent dans les expressions des tenseurs de conductivité effective et des pseudo-vitesses supplémentaires. Ainsi, avant de résoudre les problèmes de fermeture et de déterminer l'ensemble des propriétés effectives, la première étape consiste à déterminer les vitesses locales et les vitesses de Darcy dans la cellule unitaire.

**3.2.1 Vitesses de Darcy dans les strates**

Dans le cas où l'une des deux phases est immobile [125] ou lorsque l'écoulement se présente sous la forme d'une seule phase [119], l'expression analytique du terme source est déterminée à

partir de la distribution de vitesse de l'écoulement de Poiseuille plan. Le cas des écoulements de deux phases incompressibles et non miscibles suivant la direction  $x$  sous l'effet d'un gradient de pression horizontal constitue une généralisation de l'écoulement de Poiseuille plan à deux phases. Dans le cas d'un écoulement permanent et laminaire, les équations de Stokes dans chacune des phases se réduisent à l'équation :

$$\eta_\beta \frac{d^2 u_\beta}{dy^2} = \frac{\partial p_\beta}{\partial x} = -g_\beta, \quad \beta = \ell, g \quad (3.37)$$

où  $g_\beta$  représente le gradient de pression horizontal dans la phase  $\beta$ . Les calculs sont menés pour la configuration SLG, c'est-à-dire lorsque la phase liquide est mouillante. Les résultats pour la configuration SGL seront simplement déduits en intervertissant les indices des phases liquide et vapeur. La cellule étant symétrique, le problème est résolu sur la demi cellule  $y \geq 0$ . L'intégration de (3.37) selon  $y$  conduit, pour les phases liquide et vapeur, aux expressions :

$$\eta_\beta \frac{du_\beta}{dy} = -g_\beta y + a_\beta, \quad \beta = \ell, g \quad (3.38)$$

Pour les systèmes stratifiés, la courbure de l'interface séparant les deux fluides est nulle et, dans ce cas, les conditions aux limites classiques [151] à l'interface liquide-vapeur se réduisent à une condition de continuité des contraintes tangentielles et des pressions entre les deux phases :

$$\eta_g \frac{du_g}{dy} = \eta_\ell \frac{du_\ell}{dy}, \quad p_g = p_\ell, \quad \text{en } y = \frac{H\varepsilon_g}{2} \quad (3.39)$$

Les relations (3.39) permettent, à partir des équations (3.38), d'introduire une constante d'intégration unique  $a$  et un gradient de pression unique  $g$ . L'intégration des équations (3.38) donne alors :

$$u_\beta = -\frac{g}{2\eta_\beta} y^2 + \frac{a}{\eta_\beta} y + f_\beta \quad (3.40)$$

Les trois constantes d'intégration  $a$ ,  $f_\ell$  et  $f_g$  sont déterminées à partir des trois conditions aux limites suivantes : symétrie sur le bord de la cellule, non glissement des phases à l'interface liquide-vapeur et adhérence du liquide sur la paroi solide :

$$\frac{du_g}{dy} = 0, \quad \text{en } y = 0 \quad (3.41)$$

$$u_g = u_\ell, \quad \text{en } y = \frac{H\varepsilon_g}{2} \quad (3.42)$$

$$u_\ell = 0, \quad \text{en } y = \frac{H(\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)}{2} \quad (3.43)$$

La condition de symétrie (3.41) conduit à  $a = 0$  et les conditions aux limites de non glissement des phases (3.42) et d'adhérence (3.43) permettent de déterminer  $f_\ell$  et  $f_g$  :

$$f_\ell = \frac{gH^2}{8\eta_\ell} (\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)^2 \quad (3.44)$$

$$f_g = \frac{gH^2}{8\eta_g} \left( \varepsilon_g^2 (1 - \eta_{g\ell}) + \eta_{g\ell} (\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)^2 \right) \quad (3.45)$$

où  $\eta_{g\ell}$  dénote le rapport des viscosités  $\eta_{g\ell} = \eta_g/\eta_\ell$ . Les champs locaux  $u_\ell$  et  $u_g$  sur la demi cellule  $y \geq 0$  sont alors donnés par les relations :

$$u_\ell = \frac{gH^2}{2\eta_\ell} \left[ \left( \frac{\varepsilon_\ell + \varepsilon_g}{2} \right)^2 - \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.46)$$

$$u_g = \frac{gH^2}{2\eta_g} \left[ \left( \frac{\varepsilon_g}{2} \right)^2 (1 - \eta_{g\ell}) + \eta_{g\ell} \left( \frac{\varepsilon_\ell + \varepsilon_g}{2} \right)^2 - \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.47)$$

A partir des expressions (3.46) et (3.47) et des propriétés de symétrie, les vitesses moyennes intrinsèques dans les strates s'écrivent :

$$\langle u_\ell \rangle^\ell = \frac{2}{H\varepsilon_\ell} \int_{\frac{\ell_g}{2}}^{\frac{\ell_g + \ell_\ell}{2}} u_\ell(y) dy = \frac{gH^2}{24\eta_\ell} (2\varepsilon_\ell^2 + 3\varepsilon_g\varepsilon_\ell) \quad (3.48)$$

$$\langle u_g \rangle^g = \frac{2}{H\varepsilon_g} \int_0^{\frac{\ell_g}{2}} u_g(y) dy = \frac{gH^2}{24\eta_g} (2\varepsilon_g^2 + 3\eta_{g\ell}\varepsilon_\ell (2\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)) \quad (3.49)$$

On peut remarquer que les expressions (3.48) et (3.49) sont cohérentes avec l'expression classique de la vitesse moyenne d'un écoulement de Poiseuille lorsque une seule des deux phases est présente, c'est-à-dire  $\langle u_\ell \rangle^\ell$  pour  $\varepsilon_g = 0$  et  $\langle u_g \rangle^g$  pour  $\varepsilon_\ell = 0$ . Les expressions (3.46)-(3.47) des vitesses locales et (3.48)-(3.49) permettent de déterminer les déviations  $\tilde{u}_\ell$  et  $\tilde{u}_g$  à partir des relations :

$$\tilde{u}_\ell = u_\ell - \langle u_\ell \rangle^\ell = \frac{gH^2}{24\eta_\ell} \left[ 3\varepsilon_g (1 - \varepsilon_s) + \varepsilon_\ell^2 - 12 \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.50)$$

$$\tilde{u}_g = u_g - \langle u_g \rangle^g = \frac{gH^2}{24\eta_g} \left[ \varepsilon_g^2 - 12 \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.51)$$

Afin d'éliminer le gradient de pression dans les expressions (3.50)-(3.51) des déviations, les vitesses moyennes intrinsèques (3.48)-(3.49) sont écrites dans un premier temps sous la forme donnée par les équations de Darcy généralisées :

$$\langle u_\beta \rangle^\beta = \varepsilon_\beta^{-1} \langle u_\beta \rangle = \frac{K k_{r\beta}}{\eta_\beta} \varepsilon_\beta^{-1} g, \quad \beta = \ell, g \quad (3.52)$$

où  $\langle u_\beta \rangle$  est la vitesse de Darcy, c'est-à-dire la vitesse superficielle ou encore vitesse de filtration,  $K$  est la perméabilité intrinsèque du milieu et  $k_{r\beta}$  est la perméabilité relative. Pour un milieu stratifié, la perméabilité intrinsèque est déterminée, par analogie avec la loi de Darcy, à partir de l'expression de la vitesse moyenne pour un écoulement de Poiseuille à une phase dans la strate, soit :

$$K = \frac{H^2 (1 - \varepsilon_s)^3}{12} \quad (3.53)$$

Ainsi, en identifiant les expressions (3.48)-(3.49) et (3.52), les perméabilités relatives du milieu stratifié sont données dans le cas SLG par les relations :

$$k_{r\ell} = \frac{\varepsilon_\ell^2 (3\varepsilon_g + 2\varepsilon_\ell)}{2(1 - \varepsilon_s)^3}, \quad k_{rg} = \frac{\varepsilon_g}{(1 - \varepsilon_s)^3} \left( \varepsilon_g^2 + \frac{3}{2} \eta_{g\ell} \varepsilon_\ell (2\varepsilon_g + \varepsilon_\ell) \right) \quad (3.54)$$

Les relations (3.52) permettent d'écrire le gradient de pression en fonction des vitesses moyennes intrinsèques où  $K$  et  $k_{r\beta}$  sont données par les relations (3.53) et (3.54). On peut ainsi écrire les déviations (3.50)-(3.51) en fonction des vitesses moyennes intrinsèques sous la forme :

$$\tilde{u}_\ell = \frac{\varepsilon_\ell H^2 \langle u_\ell \rangle^\ell}{24K k_{r\ell}} \left[ 3\varepsilon_g (1 - \varepsilon_s) + \varepsilon_\ell^2 - 12 \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.55)$$

$$\tilde{u}_g = \frac{\varepsilon_g H^2 \langle u_g \rangle^g}{24K k_{rg}} \left[ \varepsilon_g^2 - 12 \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.56)$$

Finalement, à partir des relations (3.54), on peut écrire les déviations  $\tilde{u}_\ell$  et  $\tilde{u}_g$  explicitement en fonction des vitesses moyennes intrinsèques :

$$\tilde{u}_\ell = \frac{\langle u_\ell \rangle^\ell}{\varepsilon_\ell (3\varepsilon_g + 2\varepsilon_\ell)} \left[ 3\varepsilon_g (1 - \varepsilon_s) + \varepsilon_\ell^2 - 12 \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.57)$$

$$\tilde{u}_g = \frac{\langle u_g \rangle^g}{2\varepsilon_g^2 + 3\varepsilon_\ell \eta_{g\ell} (\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_g)} \left[ \varepsilon_g^2 - 12 \left( \frac{y}{H} \right)^2 \right] \quad (3.58)$$

Ces résultats s'étendent directement au cas de la configuration SGL en permutant les indices  $g$  et  $\ell$  dans les expressions des déviations (3.57)-(3.58).

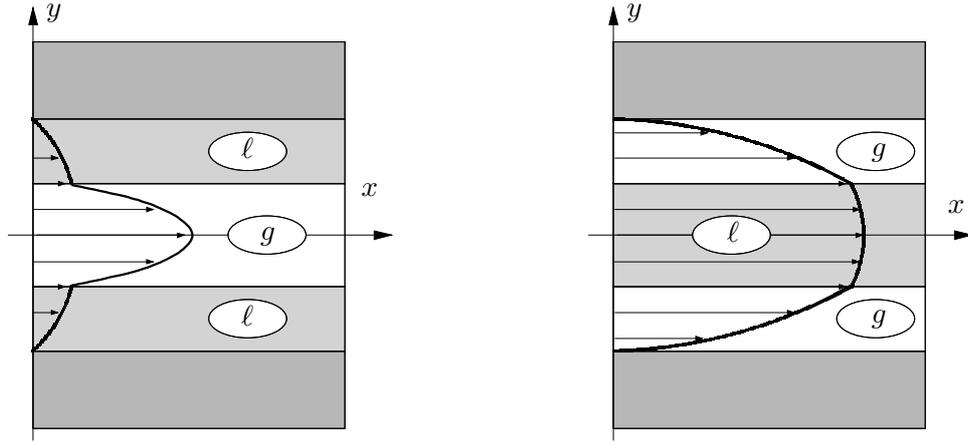


Figure 3.2: Allures des profils de vitesse  $u_\ell$  et  $u_g$  : configurations SLG et SGL ( $\eta_{lg} > 1$ )

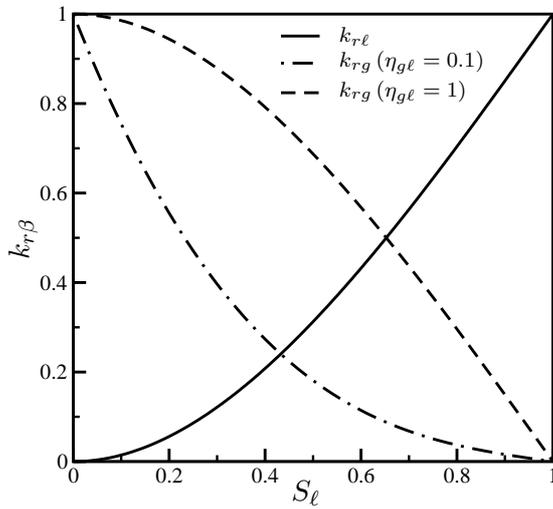


Figure 3.3:  $k_{r\ell}$ ,  $k_{rg}$  : configuration SLG

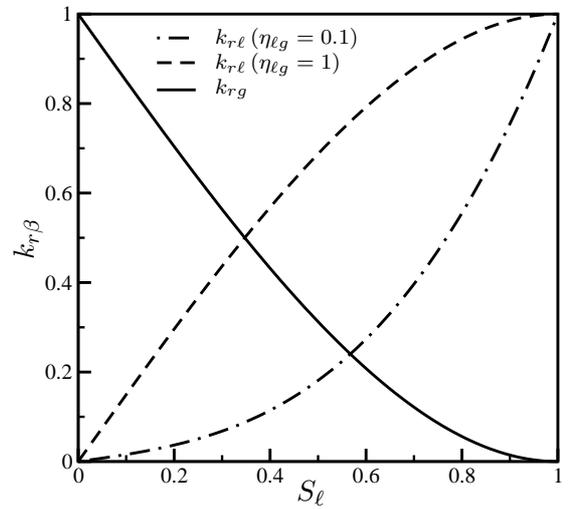


Figure 3.4:  $k_{r\ell}$ ,  $k_{rg}$  : configuration SGL

Les allures des profils de vitesse dans les strates sont illustrées sur la figure (3.2) et les figures (3.3) et (3.4) représentent les perméabilités relatives en fonction de la saturation. Nous ne commenterons pas dans le détail ces résultats mais on peut déjà se rendre compte de l'impact important de la répartition des phases sur les perméabilités relatives. Comme l'a noté Petit [115], cela signifie qu'il faut utiliser avec prudence les corrélations classiques, proposées pour des problèmes diphasiques sans changement de phase (*e.g.* génie pétrolier), dans le cadre des problèmes d'ébullition en milieux poreux.

### 3.2.2 Propriétés effectives

A partir de la résolution analytique des problèmes de fermeture I à VI décrite précédemment, nous présentons dans ce paragraphe les résultats pour l'ensemble des coefficients de transport macroscopiques du modèle. Ces coefficients sont présentés sous une forme adimensionnée, pour la plupart, par rapport aux propriétés de la phase mouillante. Lorsqu'elles ne seront pas explicitées, les grandeurs utilisées pour représenter les propriétés effectives seront celles indiquées dans le tableau (3.1). Nous utiliserons également les rapports de viscosité dynamique et de conductivité thermique suivants :

$$\eta_{gl} = \frac{\eta_g}{\eta_\ell}, \quad \eta_{\ell g} = \frac{1}{\eta_{gl}}, \quad \kappa_{\ell s} = \frac{k_\ell}{k_s}, \quad \kappa_{gs} = \frac{k_g}{k_s} \quad (3.59)$$

Cellule unitaire	$\varepsilon_g$ 0.2	$\varepsilon_\ell$ 0.2	$\varepsilon_s$ 0.6
Capacités calorifiques [J.m <sup>-3</sup> .K <sup>-1</sup> ]	$(\rho C_p)_g$ 2 10 <sup>3</sup>	$(\rho C_p)_\ell$ 4.2 10 <sup>6</sup>	$(\rho C_p)_s$ 3.5 10 <sup>6</sup>
Conductivités thermiques [W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]	$k_g$ 0.025	$k_\ell$ 0.68	$k_s$ 17

Tableau 3.1: Propriétés pour la cellule stratifiée

#### Tenseurs de conductivité thermique effective

Les tenseurs dominants et couplés de conductivité thermique effective du modèle sont définis dans le chapitre 2 par les relations (2.138)-(2.140), (2.149)-(2.151) et (2.156)-(2.158). Nous rapellons que ces tenseurs prennent en compte la diffusion et la dispersion thermique ainsi que la tortuosité du milieu à trois phases, on a par exemple pour les tenseurs dominants :

$$\mathbf{K}_{\beta\beta} = \underbrace{\varepsilon_\beta k_\beta \mathbf{I}}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\frac{k_\beta}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \mathbf{b}_{\beta\beta} dA}_{\text{tortuosité}} - \underbrace{(\rho C_p)_\beta \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \mathbf{b}_{\beta\beta} \rangle}_{\text{dispersion}}, \quad \beta, \sigma = g, \ell, s \quad (3.60)$$

Dans le cas particulier de la cellule stratifiée, les inconnues de fermeture ne dépendent que de la variable d'espace  $y$  et l'écoulement est dirigé selon la direction  $x$ , l'expression (3.60) s'écrit alors explicitement sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{\beta\beta} = & \varepsilon_\beta k_\beta \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{k_\beta}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} (\mathbf{n}_{\beta\sigma})_y \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ (\mathbf{b}_{\beta\beta})_x & (\mathbf{b}_{\beta\beta})_y \end{bmatrix} dA \\ & - (\rho C_p)_\beta \begin{bmatrix} \langle \tilde{u}_\beta (\mathbf{b}_{\beta\beta})_x \rangle & \langle \tilde{u}_\beta (\mathbf{b}_{\beta\beta})_y \rangle \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.61)$$

Nous avons vu que les composantes  $(\mathbf{b}_{\beta\beta})_x$  étaient symétriques alors que les composantes  $(\mathbf{b}_{\beta\beta})_y$  étaient anti-symétriques. Ainsi, à partir de (3.61), il apparaît que pour la cellule unitaire symétrique stratifiée, les tenseurs de conductivité thermique effective sont diagonaux.

Dans le cas de la configuration SLG, c'est-à-dire pour une phase liquide mouillante, la résolution

des problèmes de fermeture IV à VI conduit aux composantes non nulles suivantes :

$$\frac{(\mathbf{K}_{gg})_{xx}}{k_\ell} = \frac{\varepsilon_g k_g}{k_\ell} \left( 1 + \frac{1}{175} \frac{\varepsilon_g^4}{(2\varepsilon_g^2 + 3\varepsilon_\ell \eta_{g\ell} (2\varepsilon_g + \varepsilon_\ell))^2} \varepsilon_g^2 \text{Pe}_g^2 \right) \quad (3.62)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{gg})_{yy}}{k_\ell} = \frac{\varepsilon_g k_g}{k_\ell} \quad (3.63)$$

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{xx}}{k_\ell} = \varepsilon_\ell \left( 1 + \frac{3}{2800} \frac{\varepsilon_\ell (9\varepsilon_\ell^2 + 35\varepsilon_g (1 - \varepsilon_s))}{(2\varepsilon_\ell + 3\varepsilon_g)^2 (3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s \kappa_{\ell s})} \varepsilon_\ell^2 \text{Pe}_\ell^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{2800} \frac{\varepsilon_s \kappa_{\ell s} (99\varepsilon_\ell^2 + \varepsilon_g (350\varepsilon_\ell + 315\varepsilon_g))}{(2\varepsilon_\ell + 3\varepsilon_g)^2 (3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s \kappa_{\ell s})} \varepsilon_\ell^2 \text{Pe}_\ell^2 \right) \end{aligned} \quad (3.64)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{yy}}{k_\ell} = \frac{\varepsilon_\ell^2}{\varepsilon_\ell + \varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.65)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{\ell s})_{yy}}{k_\ell} = \frac{(\mathbf{K}_{s\ell})_{yy}}{k_\ell} = \frac{\varepsilon_\ell \varepsilon_s}{\varepsilon_\ell + \varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.66)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{ss})_{xx}}{k_\ell} = \frac{\varepsilon_s}{\kappa_{\ell s}} \quad (3.67)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{ss})_{yy}}{k_\ell} = \frac{\varepsilon_s^2}{\varepsilon_\ell + \varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.68)$$

Dans les expressions (3.62)-(3.68),  $\text{Pe}_\ell$  et  $\text{Pe}_g$  sont les nombres de Péclet associés respectivement aux phases liquide et vapeur, construits à partir de la longueur caractéristique de la cellule unitaire :

$$\text{Pe}_\beta = (\rho C_p)_\beta \frac{\langle u_\beta \rangle^\beta H}{k_\beta}, \quad \beta = g, \ell \quad (3.69)$$

Comme cela a été souligné par Quintard et Whitaker [125], le nombre de Péclet est ici le seul nombre sans dimension pertinent pour les propriétés effectives puisque les effets de dispersion ont été inclus à partir des solutions des équations de Stokes à l'échelle locale.

Dans le cas de la configuration SGL, c'est-à-dire lorsque la phase vapeur est mouillante, les composantes non nulles des tenseurs de conductivité thermique effective sont données par :

$$\begin{aligned} \frac{(\mathbf{K}_{gg})_{xx}}{k_g} = \varepsilon_g \left( 1 + \frac{3}{2800} \frac{\varepsilon_g (9\varepsilon_g^2 + 35\varepsilon_\ell (1 - \varepsilon_s))}{(2\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell)^2 (3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs})} \varepsilon_g^2 \text{Pe}_g^2 \right. \\ \left. + \frac{1}{2800} \frac{\varepsilon_s \kappa_{gs} (99\varepsilon_g^2 + \varepsilon_\ell (350\varepsilon_g + 315\varepsilon_\ell))}{(2\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell)^2 (3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs})} \varepsilon_g^2 \text{Pe}_g^2 \right) \end{aligned} \quad (3.70)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{gg})_{yy}}{k_g} = \frac{\varepsilon_g^2}{\varepsilon_g + \varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.71)$$

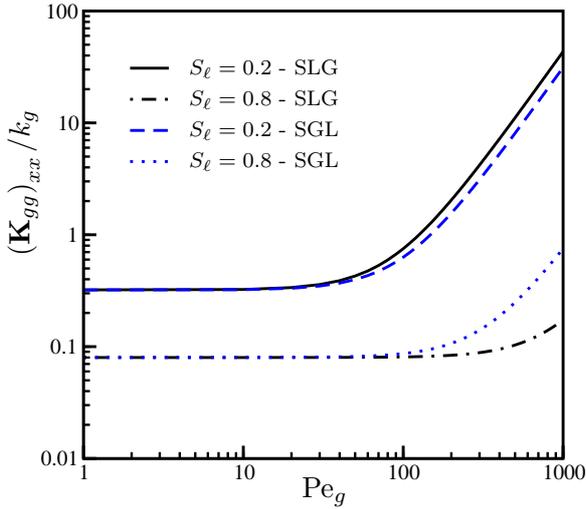
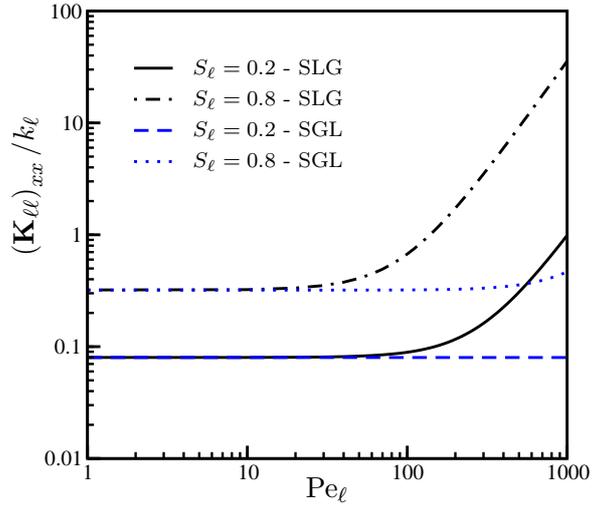
$$\frac{(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{xx}}{k_g} = \frac{\varepsilon_\ell k_\ell}{k_g} \left( 1 + \frac{1}{175} \frac{\varepsilon_\ell^4}{(2\varepsilon_\ell^2 + 3\varepsilon_g \eta_{\ell g} (2\varepsilon_\ell + \varepsilon_g))^2} \varepsilon_\ell^2 \text{Pe}_\ell^2 \right) \quad (3.72)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{yy}}{k_g} = \frac{\varepsilon_\ell k_\ell}{k_g} \quad (3.73)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{gs})_{yy}}{k_g} = \frac{(\mathbf{K}_{sg})_{yy}}{k_g} = \frac{\varepsilon_g \varepsilon_s}{\varepsilon_g + \varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.74)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{ss})_{xx}}{k_g} = \frac{\varepsilon_s}{\kappa_{gs}} \quad (3.75)$$

$$\frac{(\mathbf{K}_{ss})_{yy}}{k_g} = \frac{\varepsilon_s^2}{\varepsilon_g + \varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.76)$$

Figure 3.5: Coefficient longitudinal  $(\mathbf{K}_{gg})_{xx}$ Figure 3.6: Coefficient longitudinal  $(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{xx}$ 

Les coefficients de dispersion longitudinaux  $(\mathbf{K}_{gg})_{xx}$  et  $(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{xx}$  sont illustrés sur les figures (3.5) et (3.6) en fonction respectivement des nombres de Péclet vapeur et liquide de la cellule stratifiée. Si ces coefficients ont un comportement classique en  $Pe^2$  correspondant à une dispersion de Taylor pour les forts nombres de Péclet, en revanche on peut remarquer que la valeur de ces coefficients dans le régime diffusif ainsi que la zone de transition entre les régimes diffusifs et dispersifs sont fortement influencées par la répartition des phases et la saturation. On remarque également que si les coefficients de dispersion transverses  $(\mathbf{K}_{gg})_{yy}$  et  $(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{yy}$  ne sont pas affectés par la répartition des phases, en revanche, comme l'on pouvait s'y attendre, ils peuvent être du même ordre de grandeur que leurs homologues longitudinaux dans le régime diffusif alors qu'ils deviennent beaucoup plus petits pour des nombres de Péclet suffisamment grands. En effet, on a généralement  $\kappa_{\ell s} \ll 1$  et  $\kappa_{gs} \ll 1$ , et les expressions (3.63) et (3.65) dans le cas SLG et (3.71) et (3.73) dans le cas SGL indiquent que :

$$\frac{(\mathbf{K}_{gg})_{yy}}{k_g} \simeq \varepsilon_g, \quad \frac{(\mathbf{K}_{\ell\ell})_{yy}}{k_\ell} \simeq \varepsilon_\ell \quad (3.77)$$

D'autre part, on peut également remarquer que les tenseurs couplés ne sont pas nécessairement négligeables devant les tenseurs dominants. Par conséquent, ces termes de couplage supplémentaires ne doivent pas être systématiquement négligés dans les équations de transport macroscopiques.

### Termes de transport non classiques

Les termes de transport dits *non classiques* désignent l'ensemble des termes *pseudo-convectifs* du modèle macroscopique, c'est-à-dire les pseudo-vitesses  $\mathbf{u}_{gg}$ ,  $\mathbf{u}_{\ell g}$ , ..., et les pseudo-vitesses supplémentaires  $\mathbf{d}_{\ell i}^\ell$ ,  $\mathbf{d}_{\ell i}^g$ , ..., apparaissant dans les équations de transport macroscopiques sous la forme de termes convectifs additionnels. Nous commençons ici par les pseudo-vitesses en rappelant qu'elles sont définies par :

$$\mathbf{u}_{\beta\gamma} = \frac{k_\beta}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\beta\gamma} dA, \quad \sigma = g, \ell, s, \quad \beta, \gamma = g, \ell, s \quad (3.78)$$

Nous avons déjà signalé que dans le cas particulier de la cellule unitaire stratifiée symétrique, les composantes  $(\mathbf{b}_{\beta\gamma})_x$  des inconnues de fermeture vectorielles étaient symétriques alors que les

composantes  $(\mathbf{b}_{\beta\gamma})_y$  étaient anti-symétriques. En particulier, dans (3.78), les gradients  $\nabla(\mathbf{b}_{\beta\gamma})_x$  sont anti-symétriques alors que les gradients  $\nabla(\mathbf{b}_{\beta\gamma})_y$  sont symétriques. Par conséquent, les pseudo-vitesses transversales  $(\mathbf{u}_{\beta\gamma})_y$  sont toutes identiquement nulles pour la cellule stratifiée. Pour la configuration SLG, les pseudo-vitesses non nulles sont données par :

$$\frac{H(\mathbf{u}_{gg})_x}{k_\ell} = -\frac{2k_g}{5k_\ell} \frac{\varepsilon_g^2}{2\varepsilon_g^2 + 3\varepsilon_\ell\eta_{g\ell}(2\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)} \varepsilon_g \text{Pe}_g \quad (3.79)$$

$$\frac{H(\mathbf{u}_{\ell\ell})_x}{k_\ell} = \frac{1}{10} \frac{2\varepsilon_s\kappa_{\ell s}(7\varepsilon_\ell + 15\varepsilon_g) - 3\varepsilon_\ell^2}{(2\varepsilon_\ell + 3\varepsilon_g)(3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s\kappa_{\ell s})} \varepsilon_\ell \text{Pe}_\ell \quad (3.80)$$

$$\frac{H(\mathbf{u}_{s\ell})_x}{k_\ell} = \frac{1}{10} \frac{3\varepsilon_\ell(3\varepsilon_\ell + 5\varepsilon_g)}{(2\varepsilon_\ell + 3\varepsilon_g)(3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s\kappa_{\ell s})} \varepsilon_\ell \text{Pe}_\ell \quad (3.81)$$

Pour la configuration SGL, les pseudo-vitesses non nulles sont :

$$\frac{H(\mathbf{u}_{gg})_x}{k_g} = \frac{1}{10} \frac{2\varepsilon_s\kappa_{gs}(7\varepsilon_g + 15\varepsilon_\ell) - 3\varepsilon_g^2}{(2\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell)(3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s\kappa_{gs})} \varepsilon_g \text{Pe}_g \quad (3.82)$$

$$\frac{H(\mathbf{u}_{sg})_x}{k_g} = \frac{1}{10} \frac{3\varepsilon_g(3\varepsilon_g + 5\varepsilon_\ell)}{(2\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell)(3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s\kappa_{gs})} \varepsilon_g \text{Pe}_g \quad (3.83)$$

$$\frac{H(\mathbf{u}_{\ell\ell})_x}{k_g} = -\frac{2k_\ell}{5k_g} \frac{\varepsilon_\ell^2}{2\varepsilon_\ell^2 + 3\varepsilon_g\eta_{\ell g}(2\varepsilon_\ell + \varepsilon_g)} \varepsilon_\ell \text{Pe}_\ell \quad (3.84)$$

Avant d'examiner ces résultats, nous présentons les résultats pour les pseudo-vitesses supplémentaires. On rappelle que ces vitesses sont définies par :

$$\mathbf{d}_{\gamma i}^\beta = (\rho C_p)_\beta \langle s_{\gamma i}^\beta \tilde{\mathbf{v}}_\beta \rangle - \frac{k_\beta}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} s_{\gamma i}^\beta dA, \quad \sigma = g, \ell, s, \quad \beta, \gamma = g, \ell, s \quad (3.85)$$

Dans le cas particulier de la cellule unitaire stratifiée symétrique, les inconnues de fermeture scalaire  $s_{\gamma i}^\beta$  ne dépendent que de  $y$  et sont symétriques par rapport à l'axe  $x$ , et l'écoulement est dirigé selon la direction  $x$ . Dans ce cas, le dernier terme de (3.85) et les pseudo-vitesses supplémentaires transversales  $(\mathbf{d}_{\gamma i}^\beta)_y$  sont toutes identiquement nulles.

Dans le cas de la configuration SLG, les pseudo-vitesses supplémentaires non nulles sont :

$$\frac{H(\mathbf{d}_{\ell i}^\ell)_x}{k_\ell} = \frac{1}{10} \frac{2\varepsilon_s\kappa_{\ell s}(7\varepsilon_\ell + 15\varepsilon_g) - 3\varepsilon_\ell^2}{(2\varepsilon_\ell + 3\varepsilon_g)(3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s\kappa_{\ell s})} \varepsilon_\ell \text{Pe}_\ell \quad (3.86)$$

$$\frac{H(\mathbf{d}_{g i}^g)_x}{k_\ell} = -\frac{2k_g}{5k_\ell} \frac{\varepsilon_g^2}{2\varepsilon_g^2 + 3\varepsilon_\ell\eta_{g\ell}(2\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)} \varepsilon_g \text{Pe}_g \quad (3.87)$$

$$\frac{H(\mathbf{d}_{s i}^\ell)_x}{k_\ell} = \frac{1}{10} \frac{3\varepsilon_\ell(5\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell)}{(2\varepsilon_\ell + 3\varepsilon_g)(3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s\kappa_{\ell s})} \varepsilon_\ell \text{Pe}_\ell \quad (3.88)$$

Dans le cas de la configuration SGL, les pseudo-vitesses supplémentaires sont données par :

$$\frac{H(\mathbf{d}_{\ell i}^\ell)_x}{k_g} = -\frac{2k_\ell}{5k_g} \frac{\varepsilon_\ell^2}{2\varepsilon_\ell^2 + 3\varepsilon_g\eta_{\ell g}(2\varepsilon_\ell + \varepsilon_g)} \varepsilon_\ell \text{Pe}_\ell \quad (3.89)$$

$$\frac{H(\mathbf{d}_{g i}^g)_x}{k_g} = \frac{1}{10} \frac{2\varepsilon_s\kappa_{gs}(7\varepsilon_g + 15\varepsilon_\ell) - 3\varepsilon_g^2}{(2\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell)(3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s\kappa_{gs})} \varepsilon_g \text{Pe}_g \quad (3.90)$$

$$\frac{H(\mathbf{d}_{s i}^g)_x}{k_g} = \frac{1}{10} \frac{3\varepsilon_g(5\varepsilon_\ell + 3\varepsilon_g)}{(2\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell)(3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s\kappa_{gs})} \varepsilon_g \text{Pe}_g \quad (3.91)$$

On remarque ainsi que pour la cellule stratifiée, on a :

$$\mathbf{u}_{gg} = \mathbf{d}_{g i}^g, \quad \mathbf{u}_{sg} = \mathbf{d}_{s i}^g, \quad \mathbf{u}_{\ell\ell} = \mathbf{d}_{\ell i}^\ell, \quad \mathbf{u}_{s\ell} = \mathbf{d}_{s i}^\ell \quad (3.92)$$

Afin d'estimer l'importance relative de ces coefficients par rapport au transport macroscopique classique, les pseudo-vitesses supplémentaires sont adimensionnées par  $(\rho C_p)_\beta \langle u_\beta \rangle^\beta$  avec  $\beta = \ell$  pour  $\mathbf{d}_{\ell i}^\ell$  et  $\mathbf{d}_{si}^\ell$ ; et  $\beta = g$  pour  $\mathbf{d}_{gi}^g$  et  $\mathbf{d}_{si}^g$ . On rappelle en effet que  $\mathbf{d}_{\ell i}^\ell$  et  $\mathbf{d}_{si}^\ell$  interviennent dans l'équation de transport macroscopique de  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  alors que  $\mathbf{d}_{gi}^g$  et  $\mathbf{d}_{si}^g$  interviennent dans l'équation de  $\langle T_g \rangle^g$ . Ces pseudo-vitesses adimensionnées sont représentées sur les figures (3.7) et (3.8) en fonction de la saturation, les propriétés physiques sont celles du tableau (3.1).

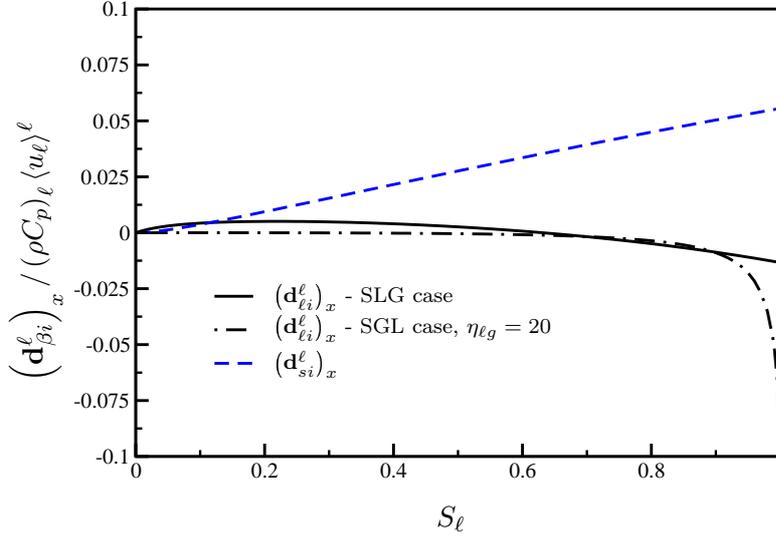


Figure 3.7: Coefficients pseudo-convectifs  $(\mathbf{d}_{\beta i}^\ell)_x$  dans l'équation de transport de  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  en fonction de la saturation  $S_\ell$

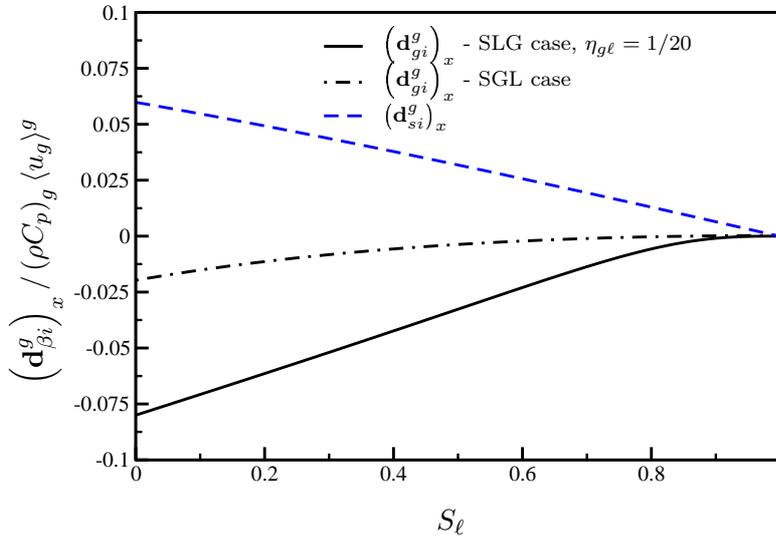


Figure 3.8: Coefficients pseudo-convectifs  $(\mathbf{d}_{\beta i}^g)_x$  dans l'équation de transport de  $\langle T_g \rangle^g$  en fonction de la saturation  $S_\ell$

Pour les propriétés physiques considérées, qui correspondent aux propriétés typiques des lits de débris, les termes convectifs supplémentaires ont une contribution de l'ordre de 5% au transport convectif macroscopique classique. Il apparaît ainsi que, pour la cellule unitaire stratifiée, ces termes puissent être négligés dans le modèle macroscopique. Il est cependant important de noter qu'il peut être dangereux de généraliser ce résultat et que des calculs sur d'autres cellules unitaires, plus complexes, sont nécessaires pour vérifier si effectivement ces coefficients peuvent

être négligés dans le cas général [125].

### Coefficients effectifs de transfert thermique

Nous rappelons que les coefficients d'échange effectifs sont définis directement par les problèmes de fermeture I à III. La résolution de ces problèmes dans le cas SLG conduit aux coefficients non nuls suivants, adimensionnés par la conductivité de la phase mouillante et par la longueur caractéristique de la cellule unitaire :

$$\frac{H^2 h_{li}^{\ell g}}{k_\ell} = \frac{24(3\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s \kappa_{\ell s})}{\varepsilon_\ell(3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s \kappa_{\ell s})} \quad (3.93)$$

$$\frac{H^2 h_{li}^{\ell s}}{k_\ell} = \frac{72}{3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.94)$$

$$\frac{H^2 h_{gi}^{g\ell}}{k_\ell} = \frac{12k_g}{\varepsilon_g k_\ell} \quad (3.95)$$

$$\frac{H^2 h_{si}^{\ell s}}{k_\ell} = \frac{-48}{3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.96)$$

$$\frac{H^2 h_{si}^{\ell g}}{k_\ell} = \frac{-24}{3\varepsilon_\ell + 4\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.97)$$

Dans le cas SGL, les coefficients d'échange non nuls sont :

$$\frac{H^2 h_{li}^{\ell g}}{k_g} = \frac{12k_\ell}{\varepsilon_\ell k_g} \quad (3.98)$$

$$\frac{H^2 h_{gi}^{g\ell}}{k_g} = \frac{24(3\varepsilon_g + 2\varepsilon_s \kappa_{gs})}{\varepsilon_g(3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs})} \quad (3.99)$$

$$\frac{H^2 h_{gi}^{gs}}{k_g} = \frac{72}{3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.100)$$

$$\frac{H^2 h_{si}^{gs}}{k_g} = \frac{-48}{3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.101)$$

$$\frac{H^2 h_{si}^{g\ell}}{k_g} = \frac{-24}{3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.102)$$

Les figures (3.9), (3.10), (3.11) et (3.12) représentent quelques coefficients en fonction de la saturation pour les deux répartitions. Etant donné la multiplicité des continums, c'est-à-dire des échanges, l'objectif ici n'est pas de faire une étude comparative complète et détaillée des coefficients d'échange mais seulement d'apporter quelques commentaires. Comme nous l'avons signalé, les vitesses ne jouent aucun rôle dans les problèmes de fermeture I à III et, par conséquent, les coefficients d'échange sont indépendants du nombre de Péclet. En revanche, comme on peut le remarquer sur ces figures, les coefficients d'échange dépendent non seulement de la saturation mais aussi de la répartition des phases. En d'autres termes, comme l'ont noté Petit *et al.* [117], cela signifierait qu'il est insuffisant d'estimer les coefficients d'échange uniquement en fonction de la saturation et, par exemple, du nombre de Péclet. Les paramètres moyens permettant de caractériser la répartition des phases sont cependant mal définis et on se contente généralement de la saturation, alors que doivent aussi intervenir par exemple  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$  et les vitesses des phases. Si il est encore trop tôt pour conclure sur l'importance de la répartition des phases, on retrouve cependant une caractéristique classique des corrélations pour les écoulements diphasiques hors milieux poreux (*e.g.* dans les tubes) dans le sens où celles-ci sont généralement associées à

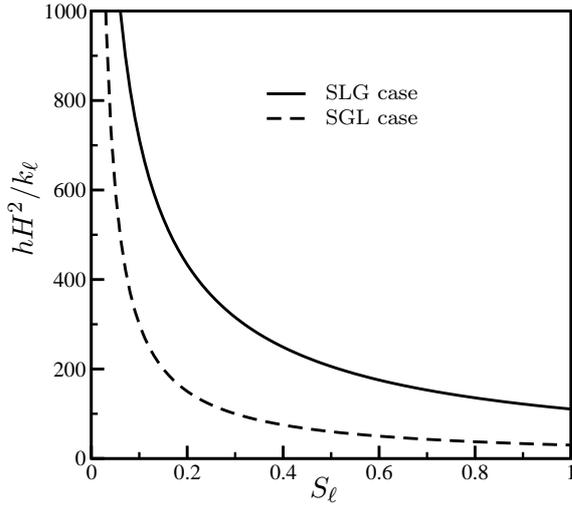


Figure 3.9:  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  : coefficient  $h = h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}$  pour l'échange  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$

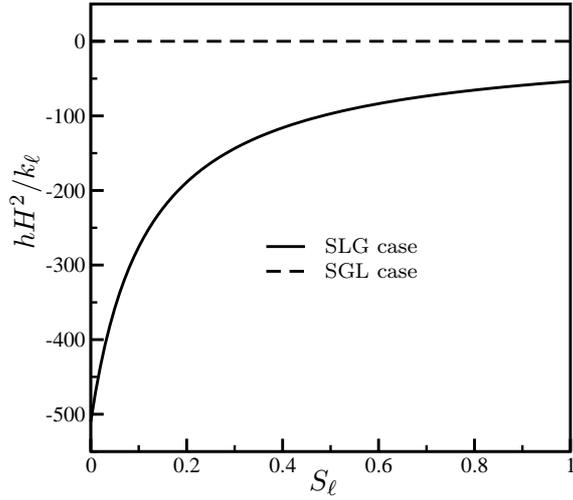


Figure 3.10:  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  : coefficient  $h = h_{si}^{\ell g} + h_{si}^{\ell s}$  pour l'échange  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$

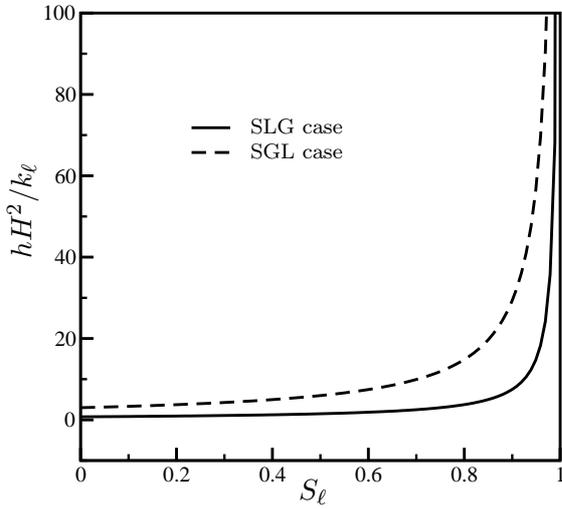


Figure 3.11:  $\langle T_g \rangle^g$  : coefficient  $h = h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs}$  pour l'échange  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$

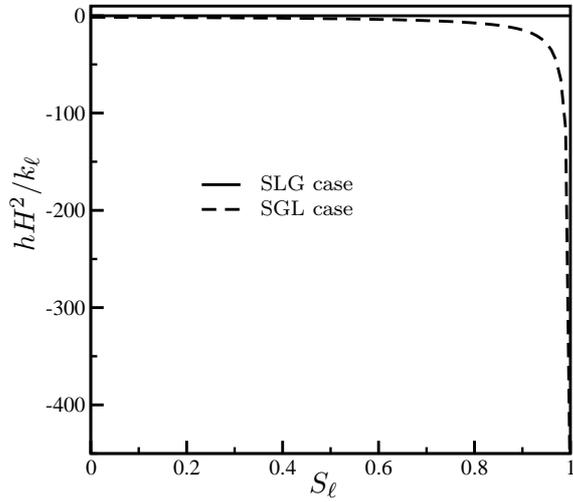


Figure 3.12:  $\langle T_g \rangle^g$  : coefficient  $h = h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{gs}$  pour l'échange  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$

une configuration donnée de l'écoulement (*i.e.* écoulement à bulles, bouchons, ...). A ce stade, nous renvoyons le lecteur au paragraphe 2.3.3 du chapitre 2 et nous rappelons que ce type de corrélation est généralement nécessaire dans le cadre d'une théorie complètement fermée.

D'autre part, si on retourne aux équations de transport macroscopiques (2.144)-(2.152), ces résultats amènent deux remarques importantes. La première est que lorsque la phase liquide mouille parfaitement le solide, les continus solide et vapeur *ne se voient pas directement* en termes d'échange (*i.e.* pas de terme en  $\langle T_s \rangle^s$  dans l'équation pour  $\langle T_g \rangle^g$ ). Le résultat est symétrique dans le cas SGL. La deuxième remarque est que, pour les deux répartitions de phases considérées, les termes d'échange proportionnels au déséquilibre  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$  sont nuls pour l'équation de  $\langle T_g \rangle^g$  et ceux proportionnels au déséquilibre  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$  sont nuls pour l'équation de  $\langle T_\ell \rangle^\ell$ . Si ces résultats sont à prendre avec prudence dans le sens où la cellule stratifiée est très simple, il est cependant très probable que ces résultats s'étendent à des cellules plus complexes en raison de la condition d'équilibre thermodynamique local qui, comme nous l'avons vu, introduit un découplage entre la phase solide et la phase non mouillante.

### 3.3 Cellule unitaire de Chang

Dans ce paragraphe, nous présentons une étude des coefficients d'échange effectifs pour une cellule unitaire représentative d'un milieu ayant une structure géométrique analogue à un arrangement de tubes capillaires. Cette cellule, initialement proposée par Chang [37] dans le cadre de la méthode des développements asymptotiques (et donc connue sous le nom de cellule unitaire de Chang) a également, comme la cellule stratifiée, beaucoup été étudiée pour les systèmes à deux phases (*e.g.* [33, 126]). On se propose ici d'étendre la cellule de Chang aux systèmes à trois phases et d'estimer les coefficients d'échange. Cette cellule est illustrée sur la figure (3.13) pour les deux configurations types. Signalons que contrairement aux travaux de Zanotti et Carbonell [33] pour un système à deux phases, la phase solide constitue ici le cylindre central de la cellule. Il nous a semblé que cette géométrie était plus représentative des problèmes considérés dans ce travail.

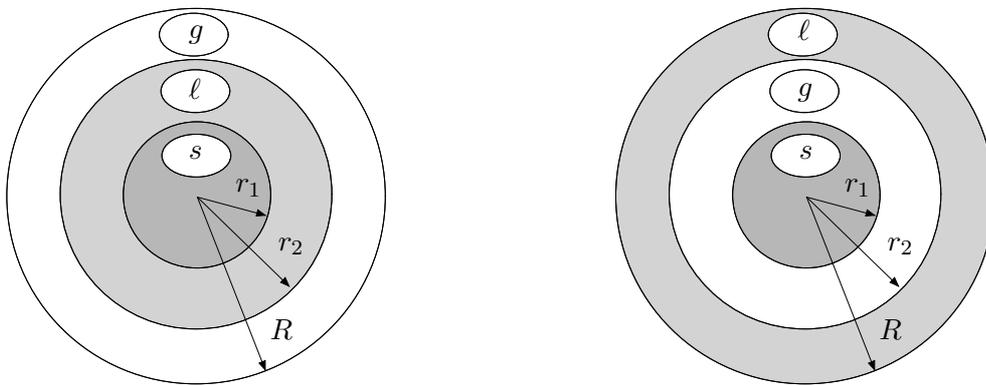


Figure 3.13: Cellule unitaire de Chang : configurations SLG et SGL

Dans le cas SLG, la longueur caractéristique  $R$  de la cellule et les fractions volumiques sont données par les relations :

$$\varepsilon_s = \frac{r_1^2}{R^2}, \quad \varepsilon_\ell = \frac{r_2^2 - r_1^2}{R^2}, \quad \varepsilon_g = \frac{R^2 - r_2^2}{R^2}$$

On en déduit ainsi l'expression des rayons en fonction de la longueur caractéristique  $R$  de la cellule et des fractions volumiques :

$$r_1 = R\sqrt{\varepsilon_s}, \quad r_2 = R\sqrt{\varepsilon_s + \varepsilon_\ell}$$

Le problème étant à symétrie radiale, les vitesses ne jouent aucun rôle dans les problèmes I à III et, en reprenant les développements de Quintard et Whitaker [126], les problèmes de fermeture I-a et I-b s'écrivent :

#### Problème I-a

$$\frac{k_\ell}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{ds_{li}^\ell}{dr} \right) - \varepsilon_\ell^{-1} h_{li}^{\ell g} = 0, \quad \text{pour } r_2 \leq r \leq R \quad (3.103)$$

$$s_{li}^\ell = 1, \quad \text{en } r = r_2 \quad (3.104)$$

$$\langle s_{li}^\ell \rangle^\ell = 0 \quad (3.105)$$

**Problème I-b**

$$\frac{k_g}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{ds_{li}^g}{dr} \right) - \varepsilon_g^{-1} \left( h_{li}^{g\ell} + h_{li}^{g_s} \right) = 0, \quad \text{pour } r_1 \leq r \leq r_2 \quad (3.106)$$

$$\frac{k_s}{r} \frac{d}{dr} \left( r \frac{ds_{li}^s}{dr} \right) + \varepsilon_s^{-1} h_{li}^{g_s} = 0, \quad \text{pour } 0 \leq r \leq r_1 \quad (3.107)$$

$$s_{li}^g = 0, \quad \text{en } r = r_2 \quad (3.108)$$

$$k_g \frac{ds_{li}^g}{dr} = k_s \frac{ds_{li}^s}{dr}, \quad s_{li}^g = s_{li}^s, \quad \text{en } r = r_1 \quad (3.109)$$

$$\langle s_{li}^g \rangle^g = 0, \quad \langle s_{li}^s \rangle^s = 0 \quad (3.110)$$

La cellule unitaire étant à symétrie radiale, les conditions de périodicité ont été remplacées par les conditions de symétrie :

$$s_{li}^g = s_{li}^g(r), \quad s_{li}^\ell = s_{li}^\ell(r), \quad s_{li}^s = s_{li}^s(r) \quad (3.111)$$

Le problème de fermeture est complété en imposant aux inconnues de fermeture une condition de symétrie en  $r = R$  et  $r = 0$ .

**3.3.1 Coefficients d'échange - Cas cylindrique**

En adoptant le même adimensionnement que pour la cellule stratifiée, les coefficients d'échange dans le cas SLG sont donnés par :

$$\frac{R^2 h_{li}^{\ell g}}{k_\ell} = \frac{8\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell (\kappa_{\ell s} - 2) + 4(1 - \varepsilon_g) \xi_g)}{\varepsilon_\ell (\kappa_{\ell s} (\varepsilon_\ell - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_\ell) + 4(\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{\ell s}) \xi_g} \quad (3.112)$$

$$\frac{R^2 h_{li}^{\ell s}}{k_\ell} = \frac{16\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell - 2\varepsilon_s \xi_g)}{\varepsilon_\ell (\kappa_{\ell s} (\varepsilon_\ell - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_\ell) + 4(\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{\ell s}) \xi_g} \quad (3.113)$$

$$\frac{R^2 h_{gi}^{g\ell}}{k_\ell} = \frac{-8\varepsilon_g^2 k_g}{k_\ell (\varepsilon_g (\varepsilon_g + 2) + 4 \ln \sqrt{1 - \varepsilon_g})} \quad (3.114)$$

$$\frac{R^2 h_{si}^{\ell g}}{k_\ell} = \frac{-8\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s) + 32\varepsilon_s (1 - \varepsilon_g) \xi_g}{\varepsilon_\ell (\kappa_{\ell s} (\varepsilon_\ell - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_\ell) + 4(\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{\ell s}) \xi_g} \quad (3.115)$$

$$\frac{R^2 h_{si}^{\ell s}}{k_\ell} = \frac{-8\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell - 2\varepsilon_s) - 32\varepsilon_s^2 \xi_g}{\varepsilon_\ell (\kappa_{\ell s} (\varepsilon_\ell - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_\ell) + 4(\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{\ell s}) \xi_g} \quad (3.116)$$

Dans le cas SGL, on obtient :

$$\frac{R^2 h_{li}^{\ell g}}{k_g} = \frac{-8\varepsilon_\ell^2 k_\ell}{k_g (\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell + 2) + 4 \ln \sqrt{1 - \varepsilon_\ell})} \quad (3.117)$$

$$\frac{R^2 h_{gi}^{g\ell}}{k_g} = \frac{8\varepsilon_g (\varepsilon_g (\kappa_{gs} - 2) + 4(1 - \varepsilon_\ell) \xi_\ell)}{\varepsilon_g (\kappa_{gs} (\varepsilon_g - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_g) + 4(\varepsilon_g (\varepsilon_g + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{gs}) \xi_\ell} \quad (3.118)$$

$$\frac{R^2 h_{gi}^{g_s}}{k_g} = \frac{16\varepsilon_g (\varepsilon_g - 2\varepsilon_s \xi_\ell)}{\varepsilon_g (\kappa_{gs} (\varepsilon_g - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_g) + 4(\varepsilon_g (\varepsilon_g + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{gs}) \xi_\ell} \quad (3.119)$$

$$\frac{R^2 h_{si}^{g\ell}}{k_g} = \frac{-8\varepsilon_g (\varepsilon_g + 2\varepsilon_s) + 32\varepsilon_s (1 - \varepsilon_\ell) \xi_\ell}{\varepsilon_g (\kappa_{gs} (\varepsilon_g - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_g) + 4(\varepsilon_g (\varepsilon_g + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{gs}) \xi_\ell} \quad (3.120)$$

$$\frac{R^2 h_{si}^{g_s}}{k_g} = \frac{-8\varepsilon_g (\varepsilon_g - 2\varepsilon_s) - 32\varepsilon_s^2 \xi_\ell}{\varepsilon_g (\kappa_{gs} (\varepsilon_g - 2\varepsilon_s) - 4\varepsilon_g) + 4(\varepsilon_g (\varepsilon_g + 2\varepsilon_s) + \varepsilon_s^2 \kappa_{gs}) \xi_\ell} \quad (3.121)$$

où on a posé :

$$\xi_g = \ln \sqrt{\frac{1 - \varepsilon_g}{\varepsilon_s}}, \quad \xi_\ell = \ln \sqrt{\frac{1 - \varepsilon_\ell}{\varepsilon_s}} \quad (3.122)$$

### 3.3.2 Coefficients d'échange - Cas sphérique

La résolution analytique des problèmes de fermeture peut être étendue à la version sphérique de la cellule de Chang. Dans le cas SLG, les rayons  $r_1$  et  $r_2$  s'écrivent en fonction de la longueur caractéristique  $R$  de la cellule et des fractions volumiques à partir des relations :

$$r_1 = R\varepsilon_s^{1/3}, \quad r_2 = R(\varepsilon_s + \varepsilon_\ell)^{1/3}$$

Dans le cas SLG, les coefficients d'échange sont donnés par :

$$\frac{R^2 h_{\ell i}^{\ell g}}{k_\ell} = \frac{30\varepsilon_\ell a_g^{2/3} \left( 15 \left( \varepsilon_s^{1/3} a_g^{2/3} - \varepsilon_s \right) - 2\varepsilon_\ell (5 + \kappa_{\ell s}) \right)}{\Lambda_g} \quad (3.123)$$

$$\frac{R^2 h_{\ell i}^{\ell s}}{k_\ell} = \frac{150\varepsilon_\ell \varepsilon_s^{1/3} a_g^{1/3} \left( 3\varepsilon_s^{2/3} a_g^{1/3} - 3\varepsilon_s - \varepsilon_\ell \right)}{\Lambda_g} \quad (3.124)$$

$$\frac{R^2 h_{g i}^{g \ell}}{k_\ell} = \frac{-15\varepsilon_g^2 a_g^{1/3} k_g}{\left( 9a_g^{1/3} + \varepsilon_\ell (2\varepsilon_s - 5) + \varepsilon_s (\varepsilon_s - 5) + \varepsilon_\ell^2 - 5 \right) k_\ell} \quad (3.125)$$

$$\frac{R^2 h_{s i}^{\ell g}}{k_\ell} = \frac{90 \left( \varepsilon_s^{1/3} a_g^{4/3} (\varepsilon_\ell + 6\varepsilon_s) - \varepsilon_s a_g^{2/3} (5\varepsilon_\ell + 6\varepsilon_s) \right)}{\Lambda_g} \quad (3.126)$$

$$\frac{R^2 h_{s i}^{\ell s}}{k_\ell} = \frac{60\varepsilon_s^{1/3} a_g^{1/3} \left( 9\varepsilon_s^2 - 9\varepsilon_s^{5/3} a_g^{1/3} + 3\varepsilon_\ell \varepsilon_s - \varepsilon_\ell^2 \right)}{\Lambda_g} \quad (3.127)$$

Dans le cas SGL, on obtient :

$$\frac{R^2 h_{\ell i}^{\ell g}}{k_g} = \frac{-15\varepsilon_\ell^2 a_\ell^{1/3} k_\ell}{\left( 9a_\ell^{1/3} + \varepsilon_g (2\varepsilon_s - 5) + \varepsilon_s (\varepsilon_s - 5) + \varepsilon_g^2 - 5 \right) k_g} \quad (3.128)$$

$$\frac{R^2 h_{g i}^{g \ell}}{k_g} = \frac{30\varepsilon_g a_\ell^{2/3} \left( 15 \left( \varepsilon_s^{1/3} a_\ell^{2/3} - \varepsilon_s \right) - 2\varepsilon_g (5 + \kappa_{g s}) \right)}{\Lambda_\ell} \quad (3.129)$$

$$\frac{R^2 h_{g i}^{g s}}{k_g} = \frac{150\varepsilon_g \varepsilon_s^{1/3} a_\ell^{1/3} \left( 3\varepsilon_s^{2/3} a_\ell^{1/3} - 3\varepsilon_s - \varepsilon_g \right)}{\Lambda_\ell} \quad (3.130)$$

$$\frac{R^2 h_{s i}^{g \ell}}{k_g} = \frac{90 \left( \varepsilon_s^{1/3} a_\ell^{4/3} (\varepsilon_g + 6\varepsilon_s) - \varepsilon_s a_\ell^{2/3} (5\varepsilon_g + 6\varepsilon_s) \right)}{\Lambda_\ell} \quad (3.131)$$

$$\frac{R^2 h_{s i}^{g s}}{k_g} = \frac{60\varepsilon_s^{1/3} a_\ell^{1/3} \left( 9\varepsilon_s^2 - 9\varepsilon_s^{5/3} a_\ell^{1/3} + 3\varepsilon_g \varepsilon_s - \varepsilon_g^2 \right)}{\Lambda_\ell} \quad (3.132)$$

avec :

$$\begin{aligned} \Lambda_g &= 45\varepsilon_s^{1/3} a_g^2 + 9\varepsilon_s^{5/3} a_g^{2/3} (5 - 4\kappa_{\ell s}) \\ &\quad - 2a_g^{1/3} (\varepsilon_\ell \varepsilon_s (45 - 6\kappa_{\ell s}) + 9\varepsilon_s^2 (5 - 2\kappa_{\ell s}) + 2\varepsilon_\ell^2 (5 + \kappa_{\ell s})) \end{aligned} \quad (3.133)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_\ell &= 45\varepsilon_s^{1/3} a_\ell^2 + 9\varepsilon_s^{5/3} a_\ell^{2/3} (5 - 4\kappa_{g s}) \\ &\quad - 2a_\ell^{1/3} (\varepsilon_g \varepsilon_s (45 - 6\kappa_{g s}) + 9\varepsilon_s^2 (5 - 2\kappa_{g s}) + 2\varepsilon_g^2 (5 + \kappa_{g s})) \end{aligned} \quad (3.134)$$

où on a posé :

$$a_g = 1 - \varepsilon_g, \quad a_\ell = 1 - \varepsilon_\ell$$

Ici encore, comme pour la cellule unitaire stratifiée, l'objectif n'est pas de faire une étude comparative complète et détaillée des coefficients d'échange pour les versions cylindrique et sphérique

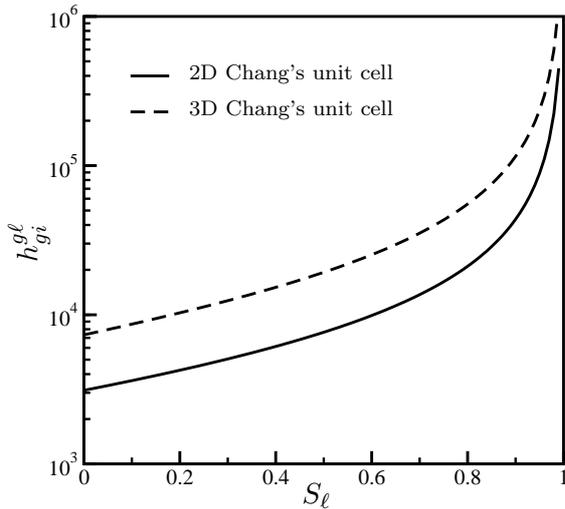


Figure 3.14: Coefficient d'échange  $h_{gi}^{g\ell}$  : cas  
SLG,  $r_1 = 0.01\text{m}$

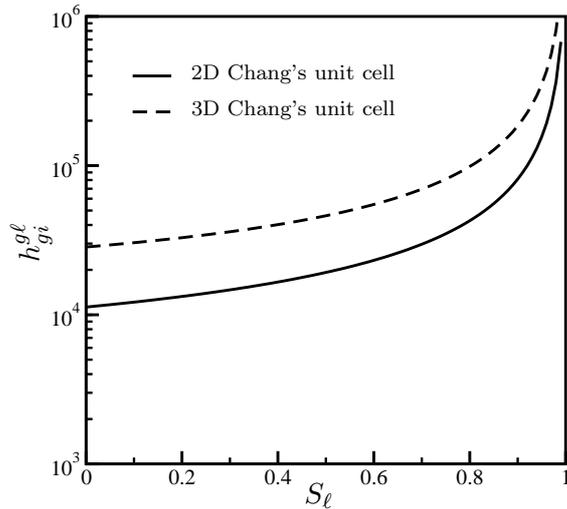


Figure 3.15: Coefficient d'échange  $h_{gi}^{g\ell}$  : cas  
SGL,  $r_1 = 0.01\text{m}$

de la cellule de Chang mais seulement d'apporter quelques commentaires. Premièrement, les coefficients d'échange non nuls correspondent aux coefficients non nuls de la cellule stratifiée et, par suite, on peut reprendre l'intégralité des remarques qui ont été faites dans le cadre de la cellule stratifiée. Deuxièmement, malgré la relative simplicité de la cellule de Chang, les expressions des coefficients d'échange sont beaucoup plus complexes que celles obtenues pour la cellule stratifiée et correspondent à une cellule unitaire *plus réaliste*. En effet, contrairement à la cellule stratifiée où la surface spécifique d'échange liquide-vapeur reste constante quelle que soit la fraction volumique liquide, la cellule de Chang prend en compte une variation de cette surface spécifique. De plus, nous verrons dans le chapitre 5 que la cellule de Chang fournit un bon estimateur des coefficients d'échange dans le cas de cellules unitaires plus complexes et ce, même lorsque la phase liquide (ou vapeur) ne mouille pas parfaitement le solide.

### 3.4 Influence de la répartition des phases sur les températures

Pour les deux cellules unitaires simples considérées dans ce travail, la cellule stratifiée et la cellule de Chang, nous avons distingué deux configurations types d'écoulements annulaires. La première, classique pour les milieux poreux non saturés, correspond à une phase liquide mouillante tandis que la deuxième, plus spécifique aux problèmes d'ébullition, correspond à une phase vapeur "mouillante".

Pour ces deux cellules et ces deux types de configurations, nous avons vu que les problèmes de fermeture pouvaient être résolus analytiquement et, par conséquent, que les inconnues de fermeture et les coefficients de transport effectifs du modèle à non équilibre local pouvaient être calculés analytiquement. En particulier, on peut obtenir des expressions analytiques pour les déviations spatiales dans la cellule en fonction des *termes sources macroscopiques* et, à partir de la décomposition de Gray (A.5), obtenir l'évolution des températures locales dans la cellule. L'intérêt de ce type de démarche est d'étudier, selon un critère restant à définir, quelles sont les solutions *physiquement admissibles*, c'est-à-dire les solutions vérifiant :

$$T_\ell \leq T^{sat}, \text{ en tout point de la phase } \ell \quad (3.135)$$

$$T_g \geq T^{sat}, \text{ en tout point de la phase } g \quad (3.136)$$

En effet, si le modèle macroscopique se base sur une condition d'équilibre thermodynamique

local à l'interface liquide-vapeur, *i.e.*  $T_\ell = T_g = T^{sat}$  sur  $A_{\ell g}$ , en revanche, à aucun moment nous n'avons interdit à la phase liquide d'être surchauffée et à la phase vapeur d'être sous-refroidie.

On se propose ici d'étudier, pour la cellule unitaire stratifiée, dans quels cas les contraintes (3.135) et (3.136) sont simultanément vérifiées. Pour mener cette étude, on va considérer le cas où il n'y a pas de gradient de températures moyennes (*i.e.* milieu infini dans toutes les directions) où les représentations pour les déviations s'écrivent sous la forme plus simple :

$$\tilde{T}_g = -s_{\ell i}^g \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) - s_{g i}^g \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - s_{s i}^g \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \quad (3.137)$$

$$\tilde{T}_\ell = -s_{\ell i}^\ell \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) - s_{g i}^\ell \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - s_{s i}^\ell \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \quad (3.138)$$

$$\tilde{T}_s = -s_{\ell i}^s \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) - s_{g i}^s \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - s_{s i}^s \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \quad (3.139)$$

Nous rappelons que les inconnues de fermeture scalaires des représentations (3.137)-(3.139) sont solutions des problèmes I à III. Les évolutions de ces inconnues pour la cellule stratifiée sont illustrées sur les figures (3.16) à (3.21) en fonction de la variable d'espace, adimensionnée par la longueur caractéristique de la cellule,  $y^* = y/H$ , pour les configurations SLG, phase liquide mouillante, et SGL, phase vapeur mouillante.

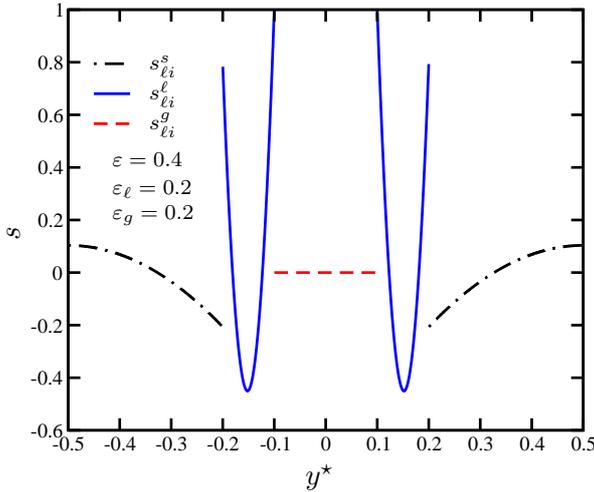


Figure 3.16: Problème I - SLG : inconnues de fermeture pour  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$

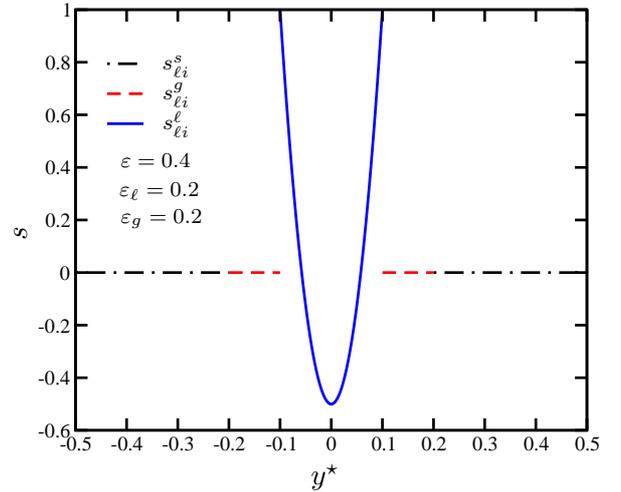


Figure 3.17: Problème I - SGL : inconnues de fermeture pour  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$

### 3.4.1 Configuration SLG : liquide mouillant

Dans le cas de la configuration SLG et lorsque on utilise la décomposition de Gray (A.5) pour  $T_g$ ,  $T_\ell$  et  $T_s$ , les représentations (3.137), (3.138) et (3.139) s'écrivent en termes de températures locales sous la forme :

$$\Delta T_g = \left( 1 - s_{g i}^g \right) \Delta \langle T_g \rangle^g \quad (3.140)$$

$$\Delta T_\ell = \left( 1 - s_{\ell i}^\ell \right) \Delta \langle T_\ell \rangle^\ell - s_{s i}^\ell \Delta \langle T_s \rangle^s \quad (3.141)$$

$$\Delta T_s = -s_{\ell i}^s \Delta \langle T_\ell \rangle^\ell + \left( 1 - s_{s i}^s \right) \Delta \langle T_s \rangle^s \quad (3.142)$$

où on a posé :

$$\Delta T_\beta = T_\beta - T^{sat}, \quad \Delta \langle T_\beta \rangle^\beta = \langle T_\beta \rangle^\beta - T^{sat}, \quad \beta = g, \ell, s \quad (3.143)$$

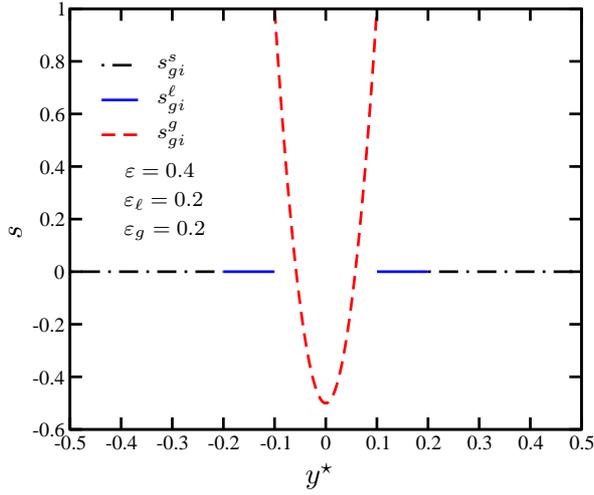


Figure 3.18: Problème II - SLG : inconnues de fermeture pour  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$

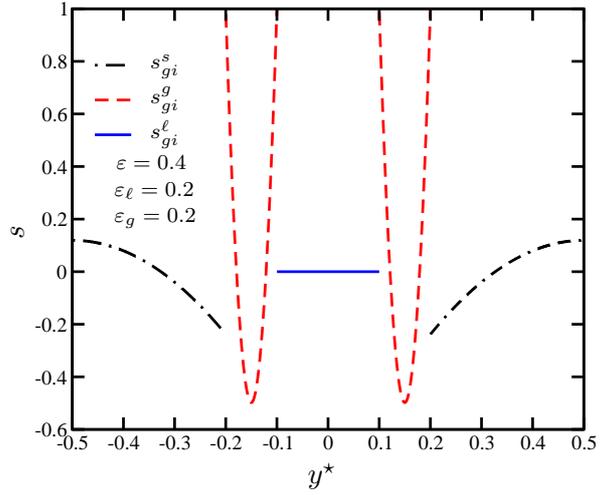


Figure 3.19: Problème II - SGL : inconnues de fermeture pour  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$

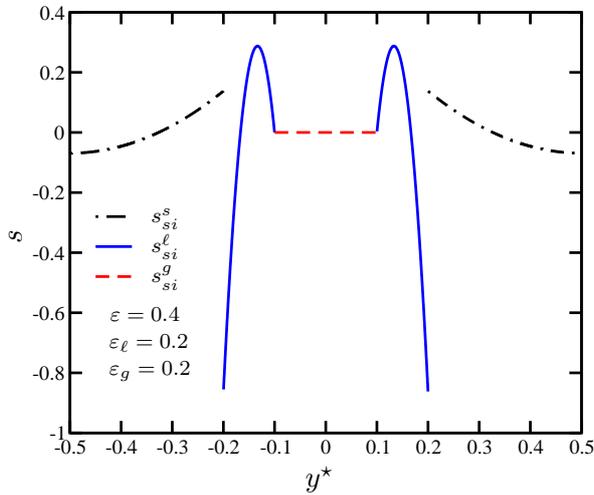


Figure 3.20: Problème III - SLG : inconnues de fermeture pour  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$

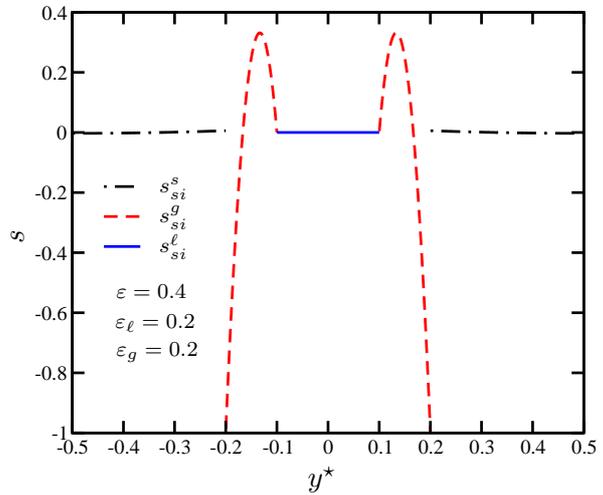


Figure 3.21: Problème III - SGL : inconnues de fermeture pour  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$

Dans (3.140)-(3.142), les inconnues de fermeture sur la demi-cellule  $y \geq 0$  sont données par :

$$s_{li}^l = \frac{1}{\varepsilon_l^2 (3\varepsilon_l + 4\varepsilon_s \kappa_{ls})} [24 (3\varepsilon_l + \varepsilon_s \kappa_{ls}) y^{*2} - 12 (3\varepsilon_l (2\varepsilon_g + \varepsilon_l) + 2\varepsilon_s (1 - \varepsilon_s) \kappa_{ls}) y^* + 3\varepsilon_l (6\varepsilon_g (1 - \varepsilon_s) + \varepsilon_l^2) + 2\varepsilon_s \kappa_{ls} (3\varepsilon_g (\varepsilon_g + 2\varepsilon_l) + 2\varepsilon_l^2)] \quad (3.144)$$

$$s_{li}^s = \frac{-3\kappa_{ls}}{\varepsilon_s (3\varepsilon_l + 4\varepsilon_s \kappa_{ls})} [12y^{*2} - 12y^* + 3(\varepsilon_g + \varepsilon_l)^2 + 2\varepsilon_s (3 - 2\varepsilon_s)] \quad (3.145)$$

$$s_{gi}^g = \frac{12y^{*2} - \varepsilon_g^2}{2\varepsilon_g^2} \quad (3.146)$$

$$s_{si}^l = \frac{-3}{\varepsilon_l (3\varepsilon_l + 4\varepsilon_s \kappa_{ls})} [12y^{*2} - 4(\varepsilon_l + 3\varepsilon_g) y^* + \varepsilon_g (2\varepsilon_l + 3\varepsilon_g)] \quad (3.147)$$

$$s_{si}^s = \frac{2\kappa_{ls}}{\varepsilon_s (3\varepsilon_l + 4\varepsilon_s \kappa_{ls})} [12y^{*2} - 12y^* + 3(\varepsilon_g + \varepsilon_l)^2 + 2\varepsilon_s (3 - 2\varepsilon_s)] \quad (3.148)$$

Nous rappelons que les inconnues de fermeture sont symétriques par rapport à l'axe  $x$  de la cellule et, par conséquent, les contraintes (3.135) et (3.136) sont examinées ici sur la demi-cellule  $y \geq 0$  à partir de (3.144)-(3.148).

Examinons dans un premier temps la représentation (3.140) pour  $\Delta T_g$  et la contrainte (3.136), c'est-à-dire  $\Delta T_g \geq 0$ . Cette contrainte devant être vérifiée en tout point, on a forcément  $\Delta \langle T_g \rangle^g \geq 0$ . Dans ce cas, à partir de (3.140), on doit avoir :

$$s_{gi}^g(y^*) \leq 1 \quad \Rightarrow \quad y^* \leq \frac{\varepsilon_g}{2} \quad (3.149)$$

La relation (3.149) montre alors que la contrainte  $T_g \geq T^{sat}$  est toujours vérifiée dans le cas de la configuration SLG car la fonction  $s_{gi}^g$  est définie sur la demi-cellule uniquement pour  $0 \leq y^* \leq \varepsilon_g/2$ .

Examinons désormais les représentations (3.141) et (3.142) pour  $\Delta T_\ell$  et  $\Delta T_s$  et la contrainte (3.135), c'est à dire  $\Delta T_\ell \leq 0$ . La fonction  $1 - s_{li}^\ell(y^*)$  étant toujours positive sur son intervalle de définition, la contrainte (3.135) s'écrit à partir de (3.141) sous la forme :

$$\Delta \langle T_\ell \rangle^\ell \leq f(y^*) \Delta \langle T_s \rangle^s, \quad f(y^*) = \frac{s_{si}^\ell(y^*)}{1 - s_{li}^\ell(y^*)} \quad (3.150)$$

En reprenant les mêmes arguments que pour  $\Delta \langle T_g \rangle^g$ , la contrainte  $\Delta T_\ell \leq 0$  devant être vérifiée en tout point, elle conduit à la condition  $\Delta \langle T_\ell \rangle^\ell \leq 0$ . En revanche, on ne connaît pas *a priori* le signe du déséquilibre  $\Delta \langle T_s \rangle^s$  et l'inégalité (3.150) doit être examinée dans les deux cas :  $\Delta \langle T_s \rangle^s \geq 0$  et  $\Delta \langle T_s \rangle^s \leq 0$ . On montre facilement que la fonction  $f(y^*)$  est strictement décroissante sur son intervalle de définition et, par conséquent, l'inégalité (3.150) devant être vérifiée pour tout  $y^*$ , tel que  $\varepsilon_g/2 \leq y^* \leq (\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)/2$ , elle s'écrit dans le cas où  $\Delta \langle T_s \rangle^s \geq 0$  :

$$\frac{\Delta \langle T_\ell \rangle^\ell}{\Delta \langle T_s \rangle^s} \leq \min_{y^*} f(y^*) = f\left(\frac{\varepsilon_g + \varepsilon_\ell}{2}\right) = -\frac{\varepsilon_\ell}{2\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.151)$$

Dans le cas contraire, c'est-à-dire lorsque  $\Delta \langle T_s \rangle^s \leq 0$ , on doit avoir :

$$\frac{\Delta \langle T_\ell \rangle^\ell}{\Delta \langle T_s \rangle^s} \geq \max_{y^*} f(y^*) = \lim_{y^* \rightarrow \frac{\varepsilon_g}{2}} f(y^*) = \frac{\varepsilon_\ell}{3\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.152)$$

Avant de discuter la signification des contraintes (3.151) et (3.152), il reste à examiner leur impact dans la représentation pour  $\Delta T_s$ . Pour cela, on écrit la représentation (3.142) sous la forme :

$$\frac{\Delta \langle T_\ell \rangle^\ell}{\Delta \langle T_s \rangle^s} = \frac{1}{s_{li}^s} \left( 1 - s_{si}^s - \frac{\Delta T_s}{\Delta \langle T_s \rangle^s} \right) \quad (3.153)$$

En particulier, à l'interface liquide-solide  $y^* = (\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)/2$ , la relation (3.153) s'écrit :

$$\frac{\Delta \langle T_\ell \rangle^\ell}{\Delta \langle T_s \rangle^s} = \frac{\Delta T_p}{\Delta \langle T_s \rangle^s} \left( \frac{2}{3} + \frac{\varepsilon_\ell}{2\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \right) - \frac{\varepsilon_\ell}{2\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \quad (3.154)$$

où  $T_p$  désigne la température de paroi (température à la surface du solide). En substituant (3.154) dans les contraintes (3.151) et (3.152), on obtient :

$$\frac{\Delta T_p}{\Delta \langle T_s \rangle^s} \leq 0, \quad \text{si } \Delta \langle T_s \rangle^s \geq 0 \quad (3.155)$$

$$\frac{\Delta T_p}{\Delta \langle T_s \rangle^s} \geq \frac{3\varepsilon_\ell}{3\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_s \kappa_{\ell s}}, \quad \text{si } \Delta \langle T_s \rangle^s \leq 0 \quad (3.156)$$

En résumé, pour la configuration SLG, la contrainte  $\Delta T_g \geq 0$  est toujours vérifiée et la contrainte  $\Delta T_\ell \leq 0$  est vérifiée sous les conditions :

$$\text{C1 : } \Delta \langle T_s \rangle^s \geq 0 \quad \begin{cases} \Delta \langle T_\ell \rangle^\ell \leq -\frac{\varepsilon_\ell}{2\varepsilon_s \kappa_{\ell s}} \Delta \langle T_s \rangle^s & \text{(C1-a)} \\ \Delta T_p \leq 0 & \text{(C1-b)} \end{cases} \quad (3.157)$$

$$\text{C2 : } \Delta \langle T_s \rangle^s \leq 0 \quad \begin{cases} \Delta \langle T_\ell \rangle^\ell \leq \frac{1}{3} \Delta \langle T_s \rangle^s & \text{(C2-a)} \\ \Delta T_p \leq \Delta \langle T_s \rangle^s & \text{(C2-b)} \end{cases} \quad (3.158)$$

Ces conditions ont été obtenues en supposant  $\kappa_{\ell s} \ll 1$ , hypothèse valable dans la plupart des cas. En examinant les conditions (3.157) et (3.158), on peut remarquer que la condition (C1-a) est assez contraignante dans le sens où elle impose au liquide un sous-refroidissement assez important. Ce sous-refroidissement est d'autant plus important que la température de paroi doit être inférieure à la température de saturation (condition (C1-b)). Une telle situation correspond à une injection de liquide sous-refroidi dans un milieu poreux *chaud* au cours des premiers instants, *i.e.* tant que (C1-b) reste vérifiée. D'un autre côté, les conditions (C2-a) et (C2-b) apparaissent moins contraignantes et correspondent à une situation *classique* de condensation lorsque le milieu n'est pas saturé en liquide. Cependant, la condition (C2-a) contient plus que cela. En effet, dans le cas où la phase liquide n'est pas *suffisamment* sous-refroidie, cette condition contient implicitement une condition sur la fraction volumique  $\varepsilon_\ell$ . Elle implique en particulier que  $\varepsilon_\ell$  soit supérieure à une valeur limite, qu'il est cependant difficile de préciser (épaisseur minimale d'un film liquide par exemple).

### 3.4.2 Configuration SGL : vapeur mouillante

Dans le cas de la configuration SGL et lorsque on utilise la décomposition de Gray (A.5) pour  $T_g$ ,  $T_\ell$  et  $T_s$ , les représentations (3.137), (3.138) et (3.139) s'écrivent :

$$\Delta T_g = \left(1 - s_{gi}^g\right) \Delta \langle T_g \rangle^g - s_{si}^g \Delta \langle T_s \rangle^s \quad (3.159)$$

$$\Delta T_\ell = \left(1 - s_{\ell i}^\ell\right) \Delta \langle T_\ell \rangle^\ell \quad (3.160)$$

$$\Delta T_s = -s_{gi}^s \Delta \langle T_g \rangle^g + (1 - s_{si}^s) \Delta \langle T_s \rangle^s \quad (3.161)$$

où les inconnues de fermeture, sur la demi-cellule  $y \geq 0$ , sont données par :

$$s_{\ell i}^\ell = \frac{12y^{*2} - \varepsilon_\ell^2}{2\varepsilon_\ell^2} \quad (3.162)$$

$$s_{gi}^g = \frac{1}{\varepsilon_g^2 (3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs})} \left[ 24(3\varepsilon_g + \varepsilon_s \kappa_{gs}) y^{*2} - 12(3\varepsilon_g (2\varepsilon_\ell + \varepsilon_g) + 2\varepsilon_s (1 - \varepsilon_s) \kappa_{gs}) y^* + 3\varepsilon_g (6\varepsilon_\ell (1 - \varepsilon_s) + \varepsilon_g^2) + 2\varepsilon_s \kappa_{gs} (3\varepsilon_\ell (\varepsilon_\ell + 2\varepsilon_g) + 2\varepsilon_g^2) \right] \quad (3.163)$$

$$s_{gi}^s = \frac{-3\kappa_{gs}}{\varepsilon_s (3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs})} \left[ 12y^{*2} - 12y^* + 3(\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)^2 + 2\varepsilon_s (3 - 2\varepsilon_s) \right] \quad (3.164)$$

$$s_{si}^g = \frac{-3}{\varepsilon_g (3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs})} \left[ 12y^{*2} - 4(\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell) y^* + \varepsilon_\ell (2\varepsilon_g + 3\varepsilon_\ell) \right] \quad (3.165)$$

$$s_{si}^s = \frac{2\kappa_{gs}}{\varepsilon_s (3\varepsilon_g + 4\varepsilon_s \kappa_{gs})} \left[ 12y^{*2} - 12y^* + 3(\varepsilon_g + \varepsilon_\ell)^2 + 2\varepsilon_s (3 - 2\varepsilon_s) \right] \quad (3.166)$$

Nous reprenons ici les mêmes développements que ceux menés pour la configuration SLG et nous commençons dans un premier temps par examiner la représentation (3.160) et la contrainte (3.135). Un développement tout à fait identique montre que la contrainte  $T_\ell \leq T^{sat}$  est toujours vérifiée dans le cas de la configuration SGL. Il reste alors à examiner les représentations (3.159) et (3.161) et la contrainte  $T_g \geq T^{sat}$ .

La fonction  $1 - s_{gi}^g$  étant toujours positive, la contrainte (3.136) s'écrit, à partir de la représentation (3.159), sous la forme :

$$\Delta \langle T_g \rangle^g \geq f(y^*) \Delta \langle T_s \rangle^s, \quad f(y^*) = \frac{s_{si}^g(y^*)}{1 - s_{gi}^g(y^*)} \quad (3.167)$$

Pour les mêmes raisons que celles évoquées pour la configuration SLG, la contrainte  $\Delta T_g \geq 0$  conduit à la condition  $\Delta \langle T_g \rangle^g \geq 0$  et l'inégalité (3.167) doit être examinée pour  $\Delta \langle T_s \rangle^s \geq 0$  et

$\Delta\langle T_s \rangle^s \leq 0$ . On montre également que la fonction  $f(y^*)$  est strictement décroissante sur son intervalle de définition et, par suite, lorsque  $\Delta\langle T_s \rangle^s \geq 0$ , l'inégalité (3.167) devient :

$$\frac{\Delta\langle T_g \rangle^g}{\Delta\langle T_s \rangle^s} \geq \max_{y^*} f(y^*) = \lim_{y^* \rightarrow \frac{\varepsilon_\ell}{2}} f(y^*) = \frac{\varepsilon_g}{3\varepsilon_g + 2\varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.168)$$

Dans le cas contraire, lorsque  $\Delta\langle T_s \rangle^s \leq 0$ , l'inégalité (3.167) devient :

$$\frac{\Delta\langle T_g \rangle^g}{\Delta\langle T_s \rangle^s} \leq \min_{y^*} f(y^*) = f\left(\frac{\varepsilon_g + \varepsilon_\ell}{2}\right) = -\frac{\varepsilon_g}{2\varepsilon_s \kappa_{gs}} \quad (3.169)$$

Etudions désormais l'impact des contraintes (3.168) et (3.169) dans la représentation (3.161) pour  $\Delta T_s$ . En reprenant la démarche menée pour la configuration SLG, on montre que l'on obtient les conditions :

$$\frac{\Delta T_p}{\Delta\langle T_s \rangle^s} \geq \frac{3\varepsilon_g}{3\varepsilon_g + 2\varepsilon_s \kappa_{gs}}, \quad \text{si } \Delta\langle T_s \rangle^s \geq 0 \quad (3.170)$$

$$\frac{\Delta T_p}{\Delta\langle T_s \rangle^s} \leq 0, \quad \text{si } \Delta\langle T_s \rangle^s \leq 0 \quad (3.171)$$

En résumé, pour la configuration SGL, la contrainte  $\Delta T_\ell \leq 0$  est toujours vérifiée et la contrainte  $\Delta T_g \geq 0$  est vérifiée sous les conditions :

$$\text{C3 : } \Delta\langle T_s \rangle^s \geq 0 \quad \begin{cases} \Delta\langle T_g \rangle^g \geq \frac{1}{3}\Delta\langle T_s \rangle^s & \text{(C3-a)} \\ \Delta T_p \geq \Delta\langle T_s \rangle^s & \text{(C3-b)} \end{cases} \quad (3.172)$$

$$\text{C4 : } \Delta\langle T_s \rangle^s \leq 0 \quad \begin{cases} \Delta\langle T_g \rangle^g \geq -\frac{\varepsilon_g}{2\varepsilon_s \kappa_{gs}}\Delta\langle T_s \rangle^s & \text{(C4-a)} \\ \Delta T_p \geq 0 & \text{(C4-b)} \end{cases} \quad (3.173)$$

Le résultat est symétrique comme on pouvait s'y attendre et on peut apporter le même type de remarques : les conditions (3.173) sont assez contraignantes et correspondent, aux premiers instants, à une situation d'injection de vapeur surchauffée dans une matrice solide *froide* tandis que les conditions (3.172) correspondent à des situations plus classiques d'évaporation.

Comme nous venons de le voir, il est possible dans le cas de la cellule stratifiée et sous certaines hypothèses simplificatrices d'apporter une discussion sur la signification des configurations SLG et SGL au regard des solutions physiquement admissibles. En première approximation, il apparaît que ces deux configurations correspondent bien à deux situations types : la configuration SLG est plutôt associée à des situations de condensation avec  $\langle T_s \rangle^s \leq T^{sat}$  tandis que la configuration SGL est plutôt associée à des situations d'évaporation avec  $\langle T_s \rangle^s \geq T^{sat}$ . Nous avons vu également que les configurations SLG et SGL n'étaient pas limitées à ces deux situations mais pouvaient rendre compte de situations plus complexes comme par exemple l'injection de liquide sous-refroidi dans un milieu poreux surchauffé. Ce type d'étude est instructif et permet d'illustrer le rôle important joué par la répartition des phases. Il faut cependant rappeler que les développements proposés ont été rendus possibles par la simplicité de la cellule stratifiée et pour un milieu infini afin de simplifier les représentations des déviations. Ces résultats doivent être vus comme une indication ou une base sur laquelle on peut s'appuyer pour distinguer quelle est la configuration pertinente dans le cadre de l'utilisation du modèle macroscopique.

### 3.5 Expériences numériques

Afin de tester la validité du modèle proposé, nous présentons dans ce paragraphe des expériences numériques qui consistent à comparer les températures macroscopiques du modèle à une solution

de référence. Nous nous limiterons dans ce travail à des problèmes purement diffusifs et on se propose, pour la cellule stratifiée et la cellule de Chang (version cylindrique), de mener une comparaison entre la solution prédite par le modèle macroscopique et la solution de référence obtenue par résolution directe du problème de conduction avec changement de phase à l'échelle du pore. Il est important de noter que les solutions de référence et théorique sont obtenues d'une manière complètement indépendante. Ces expériences vont ainsi nous permettre d'aborder la question de la validité des approximations qui ont été faites à l'échelle des fermetures, c'est-à-dire lors de l'approximation du problème mixte. Deux expériences seront présentées, l'une concernant un problème de chauffage et l'autre un problème de relaxation à partir d'un déséquilibre de température.

### 3.5.1 Simulation du problème à l'échelle locale

A l'échelle du pore, bien que le problème de conduction avec changement de phase soit monodimensionnel pour la cellule stratifiée (milieu infini selon  $x$ ) et la cellule de Chang (symétrie radiale), il n'existe pas de solution analytique pour les expériences considérées. Pour obtenir une solution de référence, les équations de transport du problème local sont résolues numériquement à partir d'une méthode enthalpique. Cette méthode permet de calculer les champs locaux de température et, *a posteriori*, la position du front liquide-vapeur. On peut alors calculer les températures moyennes à partir du champ de température local et les fractions volumiques à partir de la position du front. Ces solutions, issues du problème local, constitueront les solutions *expérimentales* de référence.

#### Position du problème - Méthode enthalpique

Soit  $\Omega$  le domaine représentant la cellule unitaire, le problème local de conduction thermique avec changement de phase s'écrit, dans le cadre d'une formulation enthalpique, sous la forme :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} h(T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \varpi_s, \quad \text{dans } \Omega \quad (3.174)$$

$$\mathbf{n} \cdot k \nabla T = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (3.175)$$

$$T(t=0) = T_0 \quad (3.176)$$

où  $\varpi_s$  est un terme source volumique de chaleur non nul dans la phase solide et où l'enthalpie, la température, la densité et la conductivité doivent être vues comme des distributions prenant des valeurs différentes dans chaque phase. La formulation (3.174)-(3.176) du problème local repose sur les trois hypothèses simplificatrices suivantes : (i) le problème est purement diffusif, (ii) la densité dépend de la phase considérée mais reste constante dans chaque phase, (iii) le milieu est infini dans toutes les directions. Les hypothèses (i) et (ii) permettent de découpler complètement le problème de l'écoulement du problème thermique et de résoudre uniquement le problème thermique. L'hypothèse (iii) permet de spécifier les conditions aux limites sur les bords des cellules par les conditions de symétrie (3.175).

Dans (3.174), la fonction  $h(T)$  s'écrit dans la phase solide :

$$h(T) = C_{ps}T \quad (3.177)$$

Dans les phases liquide et vapeur, le changement de phase liquide-vapeur s'effectuant à température constante à la température de saturation  $T^{sat}$ , la fonction  $h(T)$  s'écrit :

$$h(T) = \begin{cases} C_{pl}T, & T < T^{sat} \\ C_{pl}T^{sat} + \Delta h + C_{pg}(T - T^{sat}), & T \geq T^{sat} \end{cases} \quad (3.178)$$

### Résolution numérique - Méthode éléments finis

La méthode des éléments finis consiste à rechercher des fonctions tests  $\varphi$  qui annulent la forme intégrale de (3.174). Une intégration par parties conduit à la formulation faible suivante : trouver  $T$  tel que  $\forall \varphi$  :

$$\int_{\Omega} \varphi \rho \frac{\partial}{\partial t} h(T) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot k \nabla T d\Omega - \int_{\Omega} \varphi \varpi_s d\Omega = 0 \quad (3.179)$$

Dans le cadre de l'approximation de Galerkin, les fonctions d'essais sont choisies identiques aux fonctions tests, soit :

$$T(\mathbf{r}, t) = \sum_j \varphi_j(\mathbf{r}) T_j(t), \quad h(\mathbf{r}, t) = \sum_j \varphi_j(\mathbf{r}) h_j(t) \quad (3.180)$$

où  $h_j(\mathbf{r}) = h(T_j(\mathbf{r}))$  est donnée par (3.178). Soit  $\mathcal{I}_h$  une triangulation du domaine  $\Omega$  et  $K$  un élément de  $\mathcal{I}_h$ , la formulation faible (3.179) devient :

$$\sum_K \left( \int_K \varphi_i \rho \frac{\partial h_j}{\partial t} \varphi_j d\Omega + \int_K \nabla \varphi_i \cdot k \nabla \varphi_j T_j d\Omega - \int_K \varphi_i \varpi_s d\Omega \right) = 0 \quad (3.181)$$

On définit la matrice masse élémentaire  $\mathcal{M}$  sur un élément  $K$ , la matrice élémentaire de conduction  $\mathcal{B}$  et le vecteur élémentaire des sollicitations  $\mathcal{S}$  par :

$$\mathcal{M}_{ij} = \int_K \rho \varphi_i \varphi_j d\Omega, \quad \mathcal{B}_{ij} = \int_K \nabla \varphi_i \cdot k \nabla \varphi_j d\Omega, \quad \mathcal{S}_i = \int_K \varphi_i \varpi_s d\Omega \quad (3.182)$$

A partir de ces notations, le système discret élémentaire associé à la formulation faible (3.181) devient dans le cadre d'un schéma d'Euler totalement implicite :

$$\mathcal{M}_{ij}^{n+1} \left( \frac{h_j^{n+1} - h_j^n}{\Delta t} \right) + \mathcal{B}_{ij}^{n+1} T_j^{n+1} - \mathcal{S}_i = 0 \quad (3.183)$$

Le système élémentaire non linéaire (3.183) devient dans le cadre d'une méthode de Newton :

$$\left[ \frac{\mathcal{M}_{ij}^k}{\Delta t} \left( \frac{\partial h_j}{\partial T_j} \right)^k + \mathcal{B}_{ij}^k + \left( \frac{\partial \mathcal{B}_{ij}}{\partial T_j} \right)^k T_j^k \right] \Delta T_j^{k+1} = - \frac{\mathcal{M}_{ij}^k}{\Delta t} (h_j^k - h_j^n) - \mathcal{B}_{ij}^k T_j^k + \mathcal{S}_i \quad (3.184)$$

où  $\Delta T_j^{k+1} = T_j^{k+1} - T_j^k$ . Le système (3.184) est résolu par la méthode du gradient conjugué pour  $k = 0, 1, \dots, n+1$ , les itérations  $k$  de la méthode de Newton sont répétées jusqu'à ce que l'accroissement de température soit tel que :  $|\Delta T_j^{k+1}| \leq \epsilon$  avec  $\epsilon \sim 10^{-10}$ . Dans (3.184), on a supposé que la conductivité thermique pouvait dépendre de la température. La matrice jacobienne élémentaire associée s'écrit :

$$\left( \frac{\partial \mathcal{B}_{ij}}{\partial T_j} \right)^k T_j^k = \left[ \int_K \nabla \varphi_i \cdot \left( \frac{\partial k}{\partial T} \right)^k \varphi_j \nabla \varphi_j d\Omega \right] T_j^k \quad (3.185)$$

Pour des raisons de stabilité, la fonction  $h(T)$  ne peut pas être utilisée sous la forme (3.178) et doit être régularisée [35]. Une solution possible consiste à se donner une régularisation de la forme :

$$h(T) = \begin{cases} C_{p\ell} T, & T < T^- \\ C_{p\ell} T^- + \frac{\Delta h}{\Delta T} (T - T^-), & T^- \leq T \leq T^+ \\ C_{p\ell} T^- + \Delta h + C_{pg} (T - T^+), & T > T^+ \end{cases} \quad (3.186)$$

avec :

$$T^- = T^{sat} - \frac{\Delta T}{2}, \quad T^+ = T^{sat} + \frac{\Delta T}{2} \quad (3.187)$$

Cependant cette forme n'assure pas la continuité des dérivées premières et peut produire des instabilités pour la méthode de Newton. On peut trouver dans [17, 53] une régularisation de la relation enthalpie-température assurant la continuité des dérivées premières :

$$h(T) = \begin{cases} C_{p\ell}T + \frac{\Delta h}{2} \exp\left(-\frac{|T - T^{sat}|}{\Delta T^-}\right), & T < T^{sat} \\ C_{p\ell}T^{sat} + \Delta h + C_{pg}(T - T^{sat}) - \frac{\Delta h}{2} \exp\left(-\frac{|T - T^{sat}|}{\Delta T^+}\right), & T \geq T^{sat} \end{cases} \quad (3.188)$$

Les coefficients  $\Delta T^-$  et  $\Delta T^+$  déterminent les taux pour lesquels les asymptotes de (3.188) tendent vers la relation linéaire (3.178) loin de la température de changement de phase. Les coefficients  $\Delta T^-$  et  $\Delta T^+$  assurant la continuité des dérivées premières sont donnés par :

$$\begin{aligned} \Delta T^- &= \frac{\Delta T}{2\text{St}_{\Delta T}} \left( \text{St}_{\Delta T} + 1 - \sqrt{\text{St}_{\Delta T}^2 + 1} \right) \\ \Delta T^+ &= \frac{\Delta T}{2\text{St}_{\Delta T}} \left( \text{St}_{\Delta T} - 1 + \sqrt{\text{St}_{\Delta T}^2 + 1} \right) \end{aligned} \quad (3.189)$$

avec  $\Delta T = \Delta T^- + \Delta T^+$  et  $\text{St}_{\Delta T} = (C_{pg} - C_{p\ell}) \Delta T / \Delta h$ . La conductivité thermique peut également être représentée par une expression analogue :

$$k(T) = \begin{cases} k_\ell + \frac{k_g - k_\ell}{2} \exp\left(-\frac{|T - T^{sat}|}{\Delta T^-}\right) & T < T^{sat} \\ k_g - \frac{k_g - k_\ell}{2} \exp\left(-\frac{|T - T^{sat}|}{\Delta T^+}\right) & T \geq T^{sat} \end{cases} \quad (3.190)$$

Les expériences numériques ont été menées en coordonnées cartésiennes pour la cellule stratifiée et en coordonnées cylindriques pour la cellule de Chang. La solution directe obtenue à partir de ces calculs 1D est ensuite intégrée numériquement dans chaque phase par la méthode des trapèzes afin d'être comparée aux prédictions du modèle macroscopique. La saturation est obtenue indirectement en déterminant dans un premier temps la position du front à partir de la température de saturation. Par exemple, pour la phase solide, la température  $\langle T_s \rangle^s$  et la saturation sont calculées par :

$$\begin{aligned} \text{- Cellule stratifiée : } \quad \langle T_s \rangle^s &= \frac{1}{y_s} \int_0^{y_s} T(y) dy, \quad S_\ell = 1 - \frac{\varepsilon_g}{\varepsilon} = 1 - 2 \frac{y_f - y_s}{\varepsilon H} \\ \text{- Cellule de Chang : } \quad \langle T_s \rangle^s &= \frac{2}{r_s^2} \int_0^{r_s} r T(r) dr, \quad S_\ell = 1 - \frac{\varepsilon_g}{\varepsilon} = 1 - \frac{r_s^2 - r_f^2}{\varepsilon R^2} \end{aligned}$$

Dans ces expressions,  $y_f$ ,  $r_f$  et  $y_s$ ,  $r_s$  désignent respectivement la position du front et de la phase solide pour  $0 \leq y \leq H/2$  dans le cas la cellule stratifiée et pour  $0 \leq r \leq R$  dans le cas de la cellule de Chang. La figure (3.22) donne un exemple de calcul pour un cas de chauffage sur la cellule de Chang.

### 3.5.2 Modèle macroscopique

Pour un problème purement diffusif avec changement de phase, le problème reste assez complexe dans le sens où l'on doit résoudre le modèle macroscopique à trois températures couplé aux

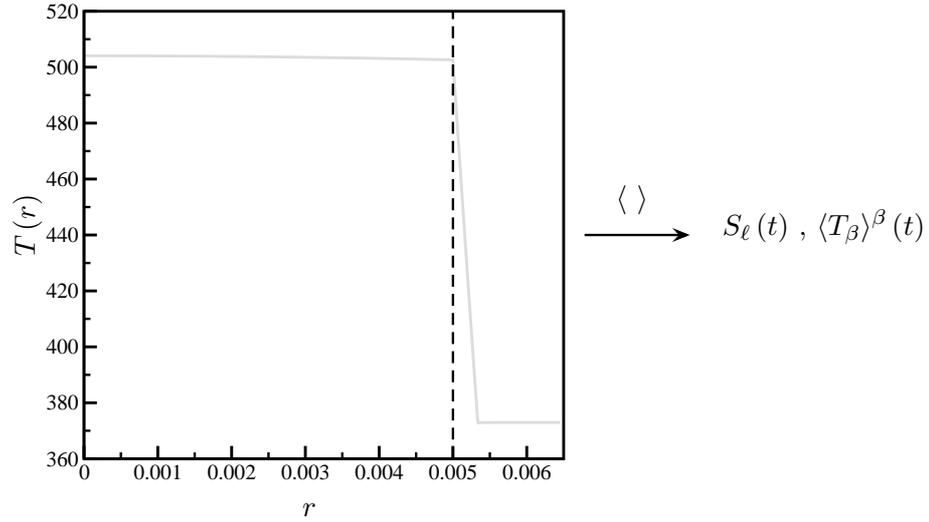


Figure 3.22: Cellule de Chang : solution directe du problème local

équations de transport macroscopiques de conservation de la masse et de quantité de mouvement pour les phases liquide et vapeur. Pour éviter de résoudre ce problème couplé de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, on suppose que le changement de phase n'entraîne pas de variation significative de pression. On fait donc l'hypothèse d'une pression constante dans la cellule, ce qui conduit à poser  $\rho_\ell = \rho_g = \rho$ . Dans ce cas, le modèle à trois températures est seulement couplé aux équations macroscopiques de conservation des masses liquide et vapeur. Sous l'hypothèse d'une pression constante dans la cellule, ces équations sont redondantes et en introduisant la saturation  $\varepsilon_\ell = \varepsilon S_\ell$ ,  $\varepsilon_g = \varepsilon(1 - S_\ell)$ , on obtient une seule équation d'évolution pour la saturation :

$$\varepsilon \frac{\partial S_\ell}{\partial t} = -\frac{\dot{m}}{\rho} \quad (3.191)$$

A l'échelle macroscopique, le transfert de chaleur est supposé unidirectionnel et le milieu infini dans toutes les directions. Dans ces conditions, les gradients de température moyenne sont nuls et le modèle macroscopique à trois températures se simplifie en un système d'équations aux dérivées ordinaires :

$$\varepsilon_g (\rho C_p)_g \frac{d\langle T_g \rangle^g}{dt} = - \left( h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs} + \dot{m} C_{pg}^* \right) (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) - \left( h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{gs} \right) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (3.192)$$

$$\varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \frac{d\langle T_\ell \rangle^\ell}{dt} = - \left( h_{li}^{g\ell} - \dot{m} C_{p\ell}^* \right) (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) \quad (3.193)$$

$$\varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{d\langle T_s \rangle^s}{dt} = h_{gi}^{gs} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + h_{si}^{gs} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) + \varepsilon_s \langle \varpi_s \rangle^s \quad (3.194)$$

avec :

$$\dot{m} \Delta h = h_{li}^{g\ell} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) + h_{gi}^{g\ell} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + h_{si}^{g\ell} (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (3.195)$$

Afin de conserver les inerties thermiques des phases liquide et vapeur, nous avons introduit les chaleurs spécifiques *fictives*  $C_{pg}^*$  et  $C_{p\ell}^*$  telles que :

$$C_{pg}^* = \frac{(\rho C_p)_g}{\rho}, \quad C_{p\ell}^* = \frac{(\rho C_p)_\ell}{\rho} \quad (3.196)$$

Il faut noter que les termes d'échange des équations (3.192), (3.193), (3.194) et (3.195) sont les termes d'échange non nuls pour la configuration SGL. En effet, les cas de chauffage et de

relaxation sont caractérisés par  $\langle T_s \rangle^s \geq T^{sat}$  et, dans ce cas, nous avons vu que la configuration *physiquement admissible* pour les cellules simples 1D était la configuration SGL.

Le système d'équations (3.191)-(3.195) permet de déterminer l'évolution au cours du temps des températures macroscopiques et de la saturation pour la cellule stratifié et la cellule de Chang pour lesquelles les coefficients effectifs ont été calculés de manière exacte. Notons que l'équation (3.193) pour  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  montre que  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  reste nécessairement égale à la température de saturation. Cette équation est donc triviale et n'a pas lieu d'être résolue.

### 3.5.3 Expériences numériques de chauffage et de relaxation vers l'équilibre

Deux expériences numériques ont été menées pour la cellule stratifiée et la cellule de Chang. Les paramètres utilisés pour ces deux expériences sont reportés dans le tableau (3.2). Il faut noter que si la porosité et la longueur caractéristique de la phase solide sont les mêmes pour les deux cellules, en revanche les longueurs caractéristiques des cellules unitaires sont différentes puisque dans le cas de la cellule stratifiée on a  $\ell_s = H\varepsilon_s$  alors que dans le cas de la cellule de Chang  $\ell_s = 2R\sqrt{\varepsilon_s}$ .

Cellules unitaires	$\varepsilon_s$	$\ell_s$ [m]	
	0.6	0.01	
$\rho$ [kg.m <sup>-3</sup> ]	$\rho_g$	$\rho_\ell$	$\rho_s$
	1000	1000	7000
$\rho C_p$ [J.m <sup>-3</sup> .K <sup>-1</sup> ]	$(\rho C_p)_g$	$(\rho C_p)_\ell$	$(\rho C_p)_s$
	$2 \cdot 10^3$	$4.2 \cdot 10^6$	$3.5 \cdot 10^6$
$k$ [W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]	$k_g$	$k_\ell$	$k_s$
	0.025	0.68	17

Tableau 3.2: Paramètres pour les expériences numériques,  $T^{sat} = 373$  K,  $\Delta h = 2.2 \cdot 10^6$  J.kg<sup>-1</sup>

La première expérience consiste à comparer la solution directe avec la solution théorique dans le cas d'un problème de chauffage. Les conditions initiales correspondent à un milieu poreux complètement saturé à la température de saturation, soit :

$$S_\ell = 0.99, \langle T_g \rangle^g = \langle T_\ell \rangle^\ell = \langle T_s \rangle^s = T^{sat} \quad (3.197)$$

La saturation à  $t = 0$  est mise volontairement à la valeur  $S_\ell = 0.99$  en raison du comportement singulier du coefficient macroscopique  $h_{gi}^{g\ell}$  lorsque la saturation tend vers sa borne physique supérieure. Un terme source de puissance volumique homogène est associé à la phase solide, tel que  $\langle \varpi_s \rangle^s = 10^7$  W.m<sup>-3</sup>.

Une deuxième comparaison du modèle macroscopique avec la solution issue du problème local a été menée sur un problème de relaxation des températures macroscopiques vers la température de saturation. Pour ce problème, la puissance volumique est nulle et les conditions initiales sont :

$$\langle T_\ell \rangle^\ell = T^{sat}, \langle T_g \rangle^g = \langle T_\ell \rangle^\ell + \frac{1}{2} \Delta \langle T \rangle, \langle T_s \rangle^s = \langle T_\ell \rangle^\ell + \Delta \langle T \rangle \text{ avec } \Delta \langle T \rangle = 60 \text{ K} \quad (3.198)$$

Pour le problème local, la température dans la phase gazeuse est initialisée à partir d'un profil linéaire pour les deux cellules unitaires. Pour la cellule stratifiée on fixe  $S_\ell = 0.9$  et pour la cellule de Chang on détermine la saturation initiale telle que  $\langle T_g \rangle^g$  soit donnée par (3.198). Notons qu'une solution alternative fixant  $S_\ell = 0.9$  à l'instant initial pour la cellule de Chang consisterait à se donner un profil parabolique de température.

Les comparaisons entre les solutions théoriques  $\langle T_g \rangle^g$  et  $\langle T_s \rangle^s$  obtenues à partir du modèle à trois équations et les solutions de référence "expérimentales"<sup>2</sup> obtenues par résolution directe du problème local sont présentées sur les figures (3.23) et (3.24) pour la première expérience et sur les figures (3.25) et (3.26) pour la deuxième. Pour les deux expériences, la température  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  reste à la température de saturation et n'est pas représentée. Nous avons présenté également sur les figures (3.27) et (3.28) les évolutions de la saturation pour les deux expériences.

Malgré le caractère fortement transitoire de ces deux expériences et les contrastes significatifs des propriétés thermiques entre les trois phases du système, ces résultats montrent que les valeurs théoriques sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales. Ce type d'expérience ne permet pas de valider l'hypothèse de quasi-staticité puisque le couplage avec la quantité de mouvement a été négligé et que l'interface liquide-vapeur est stable. En revanche, elles montrent que l'approximation quasi-stationnaire est capable de représenter correctement le comportement du milieu pour des problèmes diffusifs avec changement de phase relativement complexes. Si ces expériences constituent un résultat partiel dans le cas purement diffusif, elles permettent cependant d'illustrer le bon comportement de l'approximation quasi-stationnaire ainsi que la validité et l'intérêt du modèle macroscopique proposé et laissent entrevoir les potentialités du modèle pour les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris surchauffés.

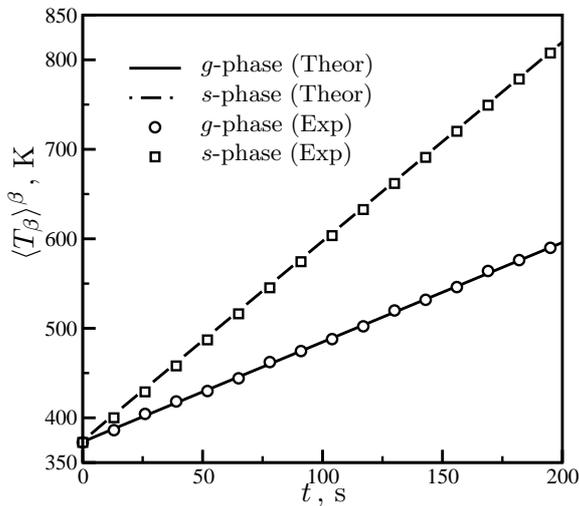


Figure 3.23: Cellule stratifiée : expérience de chauffage

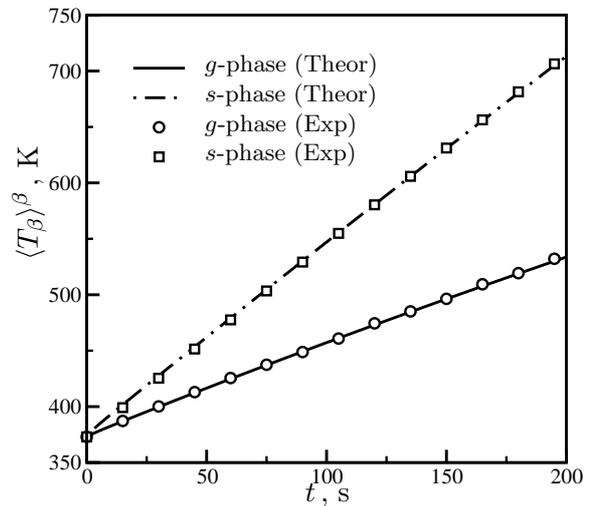


Figure 3.24: Cellule de Chang : expérience de chauffage

### 3.6 Simplification du modèle à trois températures

Dans ce paragraphe, nous revenons sur la forme générale des équations de transport du modèle macroscopique présentée au chapitre 2 et, au travers d'une discussion sur les termes de transport non classiques, nous apportons les premiers éléments de discussion sur les liens entre le modèle proposé et les modèles quasi-stationnaires à trois équations traditionnels. Plus précisément, nous examinons dans quelles mesures, le modèle proposé "tend" vers les modèles traditionnels.

Comme nous l'avons signalé, si le modèle proposé possède une structure similaire aux modèles à non équilibre traditionnels, il comprend en revanche des termes supplémentaires que nous avons qualifiés de non classiques et la forme complète du modèle est assez complexe. Si cette complexité traduit une description plus précise du transport macroscopique et des couplages entre chaque

<sup>2</sup>cette terminologie fait référence aux expériences numériques

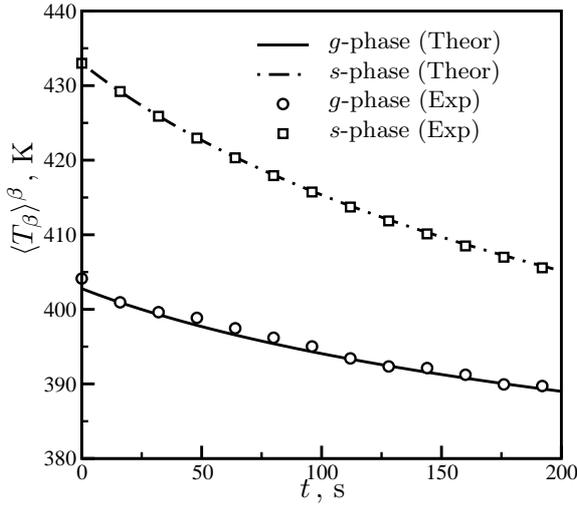


Figure 3.25: Cellule stratifiée : expérience de relaxation

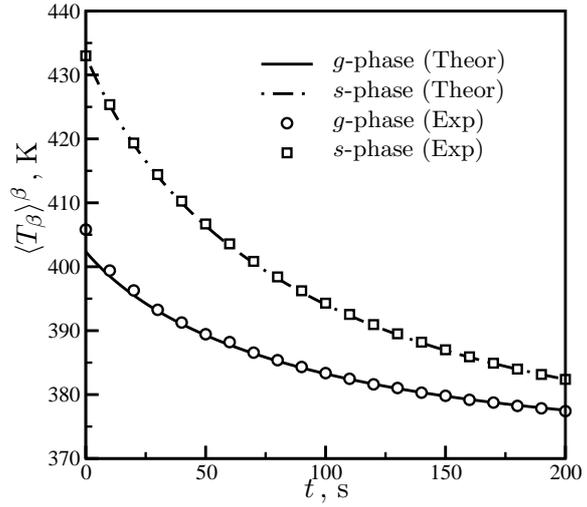


Figure 3.26: Cellule de Chang : expérience de relaxation

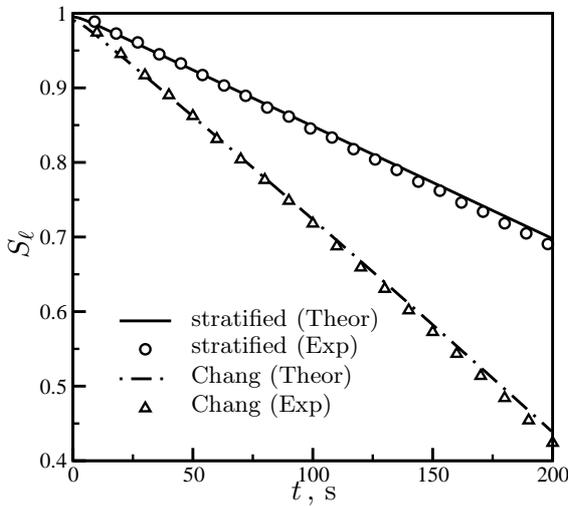


Figure 3.27: Evolution de la saturation en fonction du temps pour l'expérience de chauffage

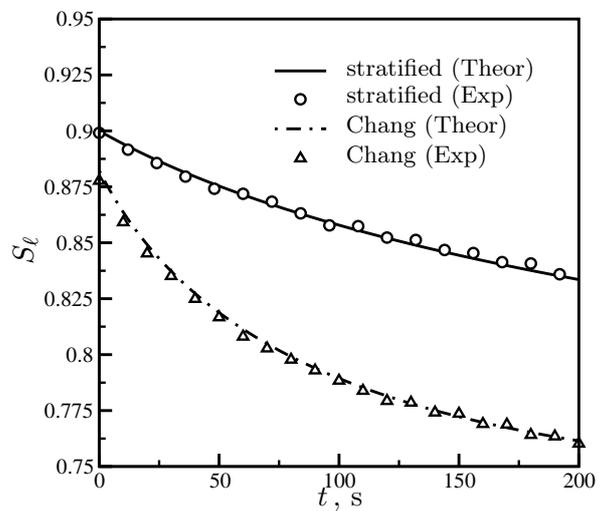


Figure 3.28: Evolution de la saturation en fonction du temps pour l'expérience de relaxation

continuum, la contrepartie est un nombre élevé de coefficients effectifs à déterminer. D'autre part, du point de vue de l'utilisation pratique du modèle pour les problèmes de sûreté, les termes de couplage supplémentaires rendent le traitement numérique des équations de transport relativement complexe.

L'objet de ce paragraphe est d'apporter des simplifications au modèle proposé en examinant dans quelles conditions certains termes de transport peuvent raisonnablement être négligés. Cette étude s'appuie sur les premiers résultats présentés dans ce chapitre et s'inspire également des résultats obtenus dans le cadre des systèmes à deux phases.

Les termes de transport pseudo-convectifs n'apparaissent jamais dans les modèles traditionnels et une simplification importante peut être apportée au modèle si ces termes peuvent être négligés. Nous avons montré que pour des problèmes purement diffusifs, les pseudo-vitesses  $\mathbf{u}_{gg}$ ,  $\mathbf{u}_{\ell g}$ , ..., étaient toutes identiquement nulles pour des cellules unitaires symétriques. On peut montrer également, toujours en régime diffusif, que les pseudo-vitesses supplémentaires  $\mathbf{d}_{\ell i}^g$ ,  $\mathbf{d}_{g i}^g$ , ..., sont toutes nulles pour des cellules symétriques. Nous avons indiqué que les cellules symétriques

pouvaient être extrêmement complexes et, par suite, il semble raisonnable de négliger ces termes dans le régime diffusif. Les résultats analytiques présentés pour la cellule stratifiée montrent que les termes non nuls ont une contribution négligeable, de l'ordre de 5%, en comparaison du transport convectif classique comme cela a été observé par Quintard et Whitaker [125]. Cependant, il peut être abusif de tirer dès maintenant une conclusion de ces premiers résultats et le rôle joué par ces pseudo-vitesses reste à éclaircir.

Dans le cadre des systèmes à deux phases, Zhang et Huang [158] ont calculés analytiquement ces pseudo-vitesses pour deux cellules unitaires de type Chang, représentatives d'un milieu consolidé et non consolidé, et ont étudié leur impact dans un modèle à deux équations. Ils ont montré que l'impact de ces termes convectifs additionnels peut être important ou insignifiant selon la cellule unitaire considérée et ces auteurs concluent que l'importance de ces termes reste à examiner pour d'autres cellules plus complexes. D'un autre côté, Quintard *et al.* [119] ont résolu numériquement les problèmes de fermeture associés au modèle à deux équations pour des cellules unitaires relativement complexes 2D et 3D. Les résultats présentés dans cette référence indiquent que les termes convectifs non traditionnels peuvent être importants pour une gamme limitée de valeurs du nombre de Péclet, dans le régime diffusif et dans la transition entre les régimes diffusif et convectif.

Les six problèmes de fermeture associés au modèle macroscopique fournissent un cadre pour déterminer les coefficients de transport convectifs additionnels, cependant, nous supposons dans ce travail que ces termes ne jouent pas un rôle important pour le problème de transport macroscopique et nous les négligerons. Si on adopte cette simplification, l'équation de transport macroscopique pour  $\langle T_g \rangle^g$  s'écrit sous la forme plus simple :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) \\
&= \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{g\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) \\
&\quad - \nabla \varepsilon_g \cdot k_g \nabla \langle T_g \rangle^g - \left( h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) \\
&\quad - \left( h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs} + \dot{m} C_{pg} \right) \left( \langle T_g \rangle^g - T^{sat} \right) - \left( h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{gs} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \quad (3.199)
\end{aligned}$$

Avant de présenter la forme simplifiée des équations de transport pour les températures moyennes des deux autres phases, nous apportons deux simplifications supplémentaires.

La première s'inspire des travaux de Bousquet-Mélou [24] et consiste à négliger dans (3.199) le terme comprenant le gradient de fraction volumique devant les termes d'échange proportionnels aux déséquilibres thermiques.

La deuxième s'inspire des résultats obtenus dans le cadre des écoulements annulaires pour la cellule stratifiée et la cellule de Chang et consiste à négliger le terme d'échange proportionnel à la différence entre  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  et la température de saturation. En effet, nous avons vu que la condition d'équilibre thermodynamique local introduisait un découplage entre les continus en termes d'échanges et nous pensons que les résultats obtenus dans le cas annulaire constituent une bonne estimation pour les situations où la phase solide n'est pas parfaitement mouillée. Plus généralement, nous pensons que les coefficients d'échange non nuls présentés dans le cas annulaire et pour la cellule stratifiée et la cellule de Chang (version cylindrique et sphérique) sont les coefficients qui ont la contribution la plus importante pour les termes d'échange dans d'autres configurations et dans le cas de cellules unitaires plus complexes. Nous reviendrons sur cette dernière simplification dans le chapitre 5 pour des géométries plus complexes.

Si on adopte ces deux simplifications supplémentaires, le modèle macroscopique s'écrit sous la

forme plus simple :

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_g (\rho C_p)_g \left( \frac{\partial \langle T_g \rangle^g}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_g \rangle^g \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \right) \\
&= \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{g\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) \\
&- \left( h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs} + \dot{m} C_{pg} \right) (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) - \left( h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{gs} \right) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (3.200)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \langle \mathbf{v}_\ell \rangle^\ell \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell \right) \\
&= \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{\ell g} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{\ell\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{\ell s} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) \\
&- \left( h_{li}^{\ell g} + h_{li}^{\ell s} - \dot{m} C_{p\ell} \right) (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) - \left( h_{si}^{\ell g} + h_{si}^{\ell s} \right) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (3.201)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon_s (\rho C_p)_s \frac{\partial \langle T_s \rangle^s}{\partial t} &= \nabla \cdot \left( \mathbf{K}_{sg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{s\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{ss} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \right) + \varepsilon_s \langle \varpi_s \rangle^s \\
&+ h_{li}^{\ell s} (\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat}) + h_{gi}^{gs} (\langle T_g \rangle^g - T^{sat}) + \left( h_{si}^{\ell s} + h_{si}^{gs} \right) (\langle T_s \rangle^s - T^{sat}) \quad (3.202)
\end{aligned}$$

Sous cette forme, la principale différence entre les équations (3.200)-(3.202) et les équations de transport des modèles heuristiques provient des termes de couplage représentés par les tenseurs de conductivité thermique effective couplés. Nous avons vu que dans le cas de la cellule stratifiée et selon la répartition des phases, les tenseurs couplés n'étaient pas nécessairement négligeables devant leurs homologues dominants. Il faut cependant noter les limites de ce type de cellule au regard de la dispersion. Par exemple, si on s'inspire des résultats obtenus pour les systèmes à deux phases, les coefficients de dispersion longitudinaux qui correspondent ici à une dispersion de type Taylor varient en  $Pe^2$ , alors que la dépendance est quasi-linéaire pour les milieux poreux plus désordonnés [154]. Dans ce sens, bien que les résultats obtenus pour la cellule stratifiée fournissent un ordre de grandeur, ils ne permettent pas de conclure définitivement sur l'importance des tenseurs couplés. Dans le cas des systèmes à deux phases et pour des cellules unitaires relativement complexes 2D et 3D, Quintard *et al.* [119] indiquent également que les tenseurs couplés ne sont pas nécessairement négligeables devant les tenseurs dominants. D'un point de vue pratique, on suppose souvent que les tenseurs de conductivité thermique effective couplés et dominants peuvent être regroupés sous la forme d'un terme unique pour chaque équation, par exemple pour la phase gazeuse :

$$\begin{aligned}
& \mathbf{K}_{gg} \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g + \mathbf{K}_{g\ell} \cdot \nabla \langle T_\ell \rangle^\ell + \mathbf{K}_{gs} \cdot \nabla \langle T_s \rangle^s \\
&\simeq (\mathbf{K}_{gg} + \mathbf{K}_{g\ell} + \mathbf{K}_{gs}) \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g = \mathbf{K}_g^* \cdot \nabla \langle T_g \rangle^g \quad (3.203)
\end{aligned}$$

Ce type d'hypothèse apporte une simplification importante pour le traitement numérique des équations de transport macroscopiques couplées et est largement utilisé dans le cadre général des modèles à non équilibre local. La simplification représentée par l'équation (3.203) est évidemment complètement justifiée si les gradients des températures macroscopiques sont suffisamment proches les uns des autres. La validité d'une telle condition, appelée équilibre local du gradient [126], est cependant très difficile à estimer. D'un autre côté, dans le cadre des modèles à deux équations, il a été contesté [123] que la *condensation* des tenseurs couplés et dominants en un tenseur unique constituait une bonne approximation pour des problèmes macroscopiques 1D. Nous ne répéterons pas ce type d'analyse dans ce travail et nous noterons seulement que si l'approximation (3.203) permet de simplifier le traitement numérique des équations, sa validité reste encore à examiner.

### 3.7 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons abordé la résolution des problèmes de fermeture et la détermination des coefficients de transport effectifs ainsi que la question de la validité du modèle macroscopique proposé. Nous avons pour cela considéré deux cellules unitaires relativement simples : la cellule stratifiée et la cellule de Chang, ainsi que deux configurations types : l'une classique où la phase liquide est mouillante et l'autre, plus spécifique aux problèmes d'ébullition, où la phase vapeur est "mouillante".

Si ces cellules sont simples, **elles permettent de résoudre analytiquement les problèmes de fermeture et conduisent à une première estimation des coefficients paramétrant le modèle à trois températures.** Pour la cellule stratifiée et dans le cas d'un écoulement diphasique co-courant dans les strates, nous avons déterminé l'ensemble des coefficients effectifs. Pour cette cellule, nous avons montré que les termes convectifs additionnels pouvaient être négligés en comparaison du transport convectif classique mais que les tenseurs de conductivité thermique effective couplés n'étaient pas nécessairement négligeables devant leurs homologues dominants. En particulier, nous avons montré que si les coefficients longitudinaux des tenseurs dominants ont un comportement classique de type dispersion de Taylor, en revanche la valeur de ces coefficients dépend fortement de la répartition des phases et peut être dans certains cas du même ordre de grandeur que la valeur des coefficients transverses et des coefficients des tenseurs couplés. L'influence de la répartition des phases sur les coefficients effectifs a également été mise en évidence pour les coefficients d'échange entre phases et ce, pour la cellule stratifiée mais aussi pour les cellules plus complexes que sont les versions 2D (cylindrique) et 3D (sphérique) de la cellule de Chang. **Ces cellules montrent clairement que pour une même saturation les propriétés effectives peuvent être très différentes et illustrent ainsi que, pour parvenir à une théorie complètement fermée, la détermination de la configuration locale des phases est essentielle.**

Ainsi, dans le cadre de l'application du modèle aux problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris, les expressions analytiques des coefficients effectifs ne peuvent être utilisées telles quelles puisque il est *a priori* difficile de connaître la répartition locale des phases à partir de la seule donnée de la saturation. Il est donc nécessaire d'introduire un critère supplémentaire qui permettrait de déterminer, à l'échelle macroscopique, la configuration pertinente ou, tout du moins, la plus réaliste. Nous avons examiné pour cela l'influence de la répartition des phases sur les températures pour les deux configurations types et, en particulier, nous avons étudié dans quels cas les températures locales étaient *physiquement admissibles*. Cette étude a montré que **la configuration liquide mouillant est plutôt associée à des situations de condensation tandis que la configuration vapeur mouillante est plutôt associée à des situations de vaporisation.** Nous avons montré qu'un critère possible était le signe de l'écart entre la température macroscopique de la phase solide et la température de saturation mais nous avons vu également qu'un tel critère ne permettait pas de couvrir toutes les situations possibles, par exemple pour les premiers instants de l'injection de liquide sous-refroidi dans une matrice surchauffée. Bien que cette étude ait été menée pour une cellule simple avec des hypothèses simplificatrices, elle permet d'apporter des indications sur la pertinence d'une configuration pour un problème macroscopique donné et peut servir de base pour *construire des corrélations* pour les propriétés effectives passant continûment d'une configuration à l'autre (pondération à partir de la saturation, température moyenne du solide, ...).

Les cellules stratifiée et de Chang ayant permis de déterminer les coefficients paramétrant le modèle, nous avons ensuite cherché à estimer la validité du modèle proposé. En particulier, **nous avons cherché à savoir si la représentation quasi-stationnaire des échanges était**

suffisante pour décrire correctement un problème de conduction thermique avec changement de phase. Pour cela, nous avons mené des expériences numériques en comparant la solution théorique prédite par le modèle à une solution de référence obtenue par résolution directe du problème à l'échelle locale. Ces expériences, menées pour un problème de chauffage et de relaxation vers l'équilibre, montrent que **le modèle produit d'excellents résultats malgré le caractère fortement transitoire des situations calculées et le fort contraste des propriétés thermiques**. Bien sûr, ces expériences numériques sont limitées à des problèmes purement diffusifs mais elles permettent d'illustrer la validité du modèle et son intérêt pratique pour les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris.

En dernier lieu, nous avons présenté les premiers éléments de comparaison entre le modèle proposé et les modèles à trois températures actuels. Nous avons montré que si les termes convectifs additionnels pouvaient être négligés et si les tenseurs de conductivité thermique effective pouvaient être regroupés sous un seul tenseur, le modèle proposé se présentait sous une forme similaire aux modèles actuels. S'il est encore trop tôt pour conclure sur la validité des simplifications qui ont été apportées au modèle, cette première comparaison est instructive et montre que le modèle simplifié proposé semble inclure tous les processus d'échanges importants identifiés par d'autres auteurs. L'originalité et l'apport de notre démarche réside dans la possibilité d'estimer tous les coefficients du modèle global à partir d'une résolution des problèmes de fermeture sur des cellules représentatives du milieu poreux étudié.

## Chapitre 4

# Simulation numérique directe

Nous avons vu au chapitre 2 que, dans le cadre de la méthode de prise de moyenne volumique, les coefficients de transport macroscopiques du modèle étaient reliés d'une manière explicite à la physique à l'échelle du pore au travers de six problèmes de fermeture. Dès lors, la résolution de ces problèmes sur des cellules unitaires représentatives du milieu permet de déterminer l'ensemble des propriétés effectives. Au chapitre 3, nous avons montré que pour des cellules unitaires simples, ces problèmes pouvaient être résolus analytiquement. Même si ces cellules correspondent à une représentation très simplifiée du milieu, la possibilité d'obtenir des expressions analytiques pour les propriétés effectives et, à partir d'expériences numériques, de revenir sur la validité des approximations utilisées pour établir le modèle les rend particulièrement intéressantes. Dans ce sens, ces cellules sont instructives et permettent d'illustrer assez rapidement la validité et les potentialités du modèle macroscopique mais, comme nous l'avons signalé, elles ne peuvent évidemment pas rendre compte de toutes les caractéristiques d'un milieu réel. Pour cela, des cellules plus complexes doivent être considérées et il faut dans ce cas résoudre numériquement les problèmes de fermeture pour des configurations locales de l'écoulement diphasique données. Ainsi, la détermination des propriétés effectives passe par deux étapes successives : la première consiste à connaître d'une manière fine l'écoulement diphasique à l'échelle de la cellule unitaire et, à partir de la donnée de la topologie des interfaces, des champs de vitesse locaux et des fractions volumiques, la deuxième étape consiste à résoudre numériquement les problèmes de fermeture.

Ce chapitre concerne la réalisation de la première étape et est consacré à la présentation d'une méthode de simulation numérique directe des écoulements diphasiques. Ce chapitre concerne exclusivement les développements d'une méthode et d'un schéma numérique qui constitueront l'outil de simulation numérique directe pour le prochain chapitre. Par conséquent, le lecteur intéressé uniquement par les applications de la simulation numérique directe pour l'estimation des propriétés effectives pourra passer directement au chapitre suivant.

Dans le chapitre introductif, nous avons vu qu'il existait de nombreuses méthodes permettant d'effectuer ce type de simulation et il faut donc se poser la question : existe-t-il une méthode adaptée aux situations considérées dans ce travail ? Pour répondre à cette question, nous avons fait le choix dans un premier temps de nous intéresser aux méthodes qui s'inscrivaient dans le cadre de la mécanique des milieux continus puis, dans un deuxième temps, aux méthodes qui suivaient implicitement les interfaces, c'est-à-dire les méthodes utilisant une grille Eulérienne. Parmi ces méthodes, nous avons vu que l'on pouvait distinguer les méthodes basées sur une modélisation *classique* des interfaces, comme les méthodes VOF ou Level Set, des méthodes basées sur une "modélisation diffuse" des interfaces, appelées méthodes à interfaces diffuses. Si ces deux types de méthodes ont leurs propres avantages et leurs propres inconvénients, il nous a semblé

que le potentiel des méthodes à interfaces diffuses et les perspectives qu'elles laissent entrevoir dans le cadre de nos applications étaient deux points importants qui nous encourageaient à aller dans le sens de ce type d'approche. Deux points nous ont semblé particulièrement importants. D'une part, ces méthodes présentent l'avantage d'être construites sur la base d'une modélisation thermodynamique des couches capillaires, elles sont donc intrinsèquement plus riches et plus réalistes d'un point de vue physique. De plus, les échelles de longueur pour lesquelles ces méthodes peuvent être utilisées sont voisines des longueurs caractéristiques du milieu à l'échelle du pore que nous souhaitons étudier. D'autre part, sur la base de cette modélisation, ces méthodes offrent un cadre séduisant pour la construction de schémas numériques stables et consistants au regard des propriétés thermodynamiques du fluide.

Ainsi, nous nous intéressons dans ce chapitre à une méthode de simulation numérique directe basée sur une modélisation diffuse des interfaces. Le premier paragraphe de ce chapitre donne un aperçu des différentes méthodes : méthode issue de la théorie du second gradient et modèles de Cahn-Hilliard. Ce paragraphe peut être vu comme une introduction de ce chapitre qui permettra de préciser le cadre dans lequel s'inscrivent nos développements.

## 4.1 Méthodes à interfaces diffuses

L'objet de ce paragraphe est de revenir et de discuter sur les différentes méthodes à interfaces diffuses, selon qu'elles mettent en jeu un fluide pur, on parle dans ce cas de théorie du second gradient, ou un fluide binaire et on parle pour ces dernières de modèles de Cahn-Hilliard. On ne prétend pas ici être exhaustif et faire une présentation détaillée de ces méthodes. Le lecteur intéressé par une revue de ces méthodes pourra se reporter à Anderson *et al.* [4].

### Notion de paramètre d'ordre

Avant de présenter les deux grandes classes de méthodes à interfaces diffuses, il est utile d'introduire la notion de *paramètre d'ordre*. Cette notion trouve son origine dans les problèmes de transition de phase pour lesquels un paramètre d'ordre est associé à la transition. L'interprétation statistique que l'on donne à la notion d'entropie conduit à associer un état du système (*i.e.* une phase) à désordre moléculaire élevé à une entropie élevée : un gaz présente un plus grand désordre moléculaire qu'un liquide. On peut également citer l'exemple des transitions de phase dans les solides où les différents arrangements correspondent à un certain désordre du système. On comprend ainsi que l'on peut caractériser la transition de phase par une variable thermodynamique appelée paramètre d'ordre. Plus généralement, ce paramètre permet de distinguer les différentes phases du système.

Nous allons voir que la différence essentielle entre les deux grandes classes de méthodes à interfaces diffuses provient du paramètre d'ordre. Dans le cas d'un fluide pur, se présentant sous deux phases différentes liquide et vapeur, c'est la densité qui joue le rôle de paramètre d'ordre, plus faible dans la phase vapeur que dans la phase liquide. Dans le cas d'un fluide binaire, le paramètre d'ordre est associé à la fraction massique de l'un des constituants.

#### 4.1.1 Méthode mettant en jeu un fluide pur : théorie du second gradient

Contrairement au traitement classique de Gibbs de la thermodynamique des interfaces où celles-ci sont représentées par des surfaces de discontinuité porteuses de grandeurs en excès telle que la tension de surface, les méthodes à interfaces diffuses représentent les interfaces comme des zones de transition volumique dans lesquelles le paramètre d'ordre varie brusquement mais continûment. En d'autres termes, ces méthodes sont construites sur la base d'une modélisation thermo-

dynamique prenant en compte explicitement la présence d'interfaces. Cela signifie également que dans le cadre d'une modélisation diffuse, l'énergie interne ne s'écrit pas sous sa forme classique. Pour illustrer cette distinction, on s'intéresse à la méthode mettant en jeu un fluide pur appelée méthode du second gradient. Dans le cas d'un fluide pur du second gradient, l'énergie interne spécifique s'écrit sous la forme :

$$e(\rho, s, \nabla\rho) = e^o(\rho, s) + \frac{\lambda}{2\rho} (\nabla\rho)^2 \quad (4.1)$$

où  $e^o$  désigne la partie *classique* de l'énergie interne (*i.e.* celle habituellement utilisée en théorie du premier gradient et fermée par une équation d'état) caractérisant les propriétés de compressibilité du fluide,  $s$  est l'entropie spécifique et  $\lambda$  est un coefficient appelé coefficient de capillarité interne. L'expression (4.1) montre qu'en théorie du second gradient, l'énergie interne dépend non seulement de la densité et de l'entropie mais également du gradient du paramètre d'ordre, traité en tant que variable indépendante. Cette dernière dépendance constitue une modélisation thermodynamique de la capillarité et l'expression (4.1) correspond à l'énergie interne d'un fluide *doué de capillarité interne*, fluide pour lequel la tension de surface et l'épaisseur de l'interface sont des propriétés intrinsèques et non des paramètres ajustables comme c'est le cas pour les méthodes basées sur une modélisation classique (au sens où la tension de surface intervient directement de la condition de saut et l'épaisseur résulte de l'épaississement numérique).

Les équations du mouvement d'un tel fluide peuvent être dérivées comme pour la mécanique des milieux continus classique à partir de différentes techniques : principe des puissances virtuelles [81, 134], thermodynamique des processus irréversibles [4] ou principe de moindre action de Hamilton [62], et s'écrivent dans le cas non dissipatif sous la forme :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (4.2)$$

$$\frac{d\rho\mathbf{v}}{dt} = -\nabla(p^o - \lambda\rho\nabla^2\rho) - \nabla \cdot \left( \lambda\nabla\rho \otimes \nabla\rho - \frac{\lambda}{2} (\nabla\rho)^2 \mathbf{I} \right) \quad (4.3)$$

où la notation  $d/dt$  désigne la dérivée particulaire et où  $p^o$  désigne la pression thermodynamique, c'est-à-dire la pression déterminée à partir de la partie classique de l'énergie interne. La densité jouant le rôle de paramètre d'ordre, *l'équation d'évolution des interfaces* est tout simplement l'équation de conservation de la masse.

La forme (4.3) est appelée forme conservative, ou *stress form*, des équations du mouvement pour laquelle toutes les contributions sont regroupées sous un opérateur divergence. Cette forme montre clairement que le tenseur de pression n'est plus sphérique en théorie du second gradient. Ce tenseur est généralement appelé tenseur des contraintes de Korteweg [90] ou plus simplement tenseur capillaire [4]. La signification des différentes contributions de ce tenseur est bien connue [81, 90, 108], le premier terme du second membre de (4.3) représente un terme de pseudo-pression<sup>1</sup> tendant à régulariser<sup>2</sup> le profil de densité dans la zone de transition tandis que le deuxième représente les effets de tension de surface.

Si une telle modélisation apparaît évidemment plus riche pour décrire la présence d'interfaces, en revanche l'épaisseur de l'interface a une signification physique et cela implique qu'elle ne peut être choisie en fonction des longueurs caractéristiques du problème considéré et du nombre de points de discrétisation contrairement aux méthodes basées sur une modélisation classique. En particulier, cette épaisseur devient infiniment faible lorsque le fluide ne se situe plus au voisinage de son point critique. Les travaux de Jamet [81] montrent cependant qu'il est possible d'élargir

<sup>1</sup>en d'autres termes, on peut assimiler cette régularisation à une propagation d'ondes

<sup>2</sup>on peut montrer [81] que  $p^o$  tend à raidir l'interface tandis que  $\lambda\rho\nabla^2\rho$  tend à rendre l'interface infiniment épaisse et la compétition entre ces deux contribution conduit à une interface d'épaisseur finie

artificiellement la zone interfaciale, sans toutefois perdre la cohérence thermodynamique du modèle. Ces travaux constituent une avancée importante puisqu'ils permettent, dans le cadre de la simulation numérique directe, d'étendre le modèle à des situations où le fluide peut se trouver éloigné de son point critique, situations que l'on souhaite traiter dans le cadre de nos travaux.

#### 4.1.2 Méthodes mettant en jeu un fluide binaire : modèles de Cahn-Hilliard

Dans le cadre des modèles de Cahn-Hilliard, c'est-à-dire les méthodes à interfaces diffuses mettant en jeu un fluide binaire, nous avons indiqué que c'était la fraction massique de l'un des constituants qui jouait le rôle de paramètre d'ordre. Cependant, si le paramètre d'ordre est différent, nous allons voir que ces méthodes s'appuient sur le même type de modélisation thermodynamique que celle mettant en jeu un fluide pur. Plaçons nous pour simplifier dans le cas d'un mélange à densité constante, l'énergie spécifique interne du mélange s'écrit généralement sous la forme initialement proposée par Cahn et Hilliard [31] :

$$e(c, s, \nabla c) = e^o(c, s) + \frac{\lambda}{2\rho} (\nabla c)^2 \quad (4.4)$$

Ici encore,  $e^o$  désigne la partie classique de l'énergie interne qui ici caractérise l'immiscibilité des constituants. On remarque que la principale différence entre (4.4) et (4.3) provient du paramètre d'ordre utilisé pour la partie non classique de l'énergie interne, c'est-à-dire le terme de capillarité. L'expression (4.4) a été adoptée par de nombreux auteurs, *e.g.* [40, 79, 85]. On peut trouver également une deuxième forme, *e.g.* dans Lowengrub et Truskinovsky [99], pour laquelle la densité n'apparaît pas explicitement dans le terme de capillarité.

Les équations du mouvement du mélange peuvent également être dérivées à partir des différentes techniques classiques et s'écrivent, en substituant la densité par la fraction massique, sous une forme quasi-identique aux équations du mouvement d'un fluide pur (4.3), la différence provenant du terme en dérivée seconde qui n'apparaît pas ici dans l'expression du tenseur capillaire.

En revanche l'équation d'évolution des interfaces n'est plus la même puisque le paramètre d'ordre est différent. L'équation de transport du paramètre d'ordre, qui ici est la fraction massique  $c$  de l'un des constituants, appelée équation de Cahn-Hilliard s'écrit :

$$\frac{dc}{dt} = \kappa \nabla^2 \tilde{\mu} \quad (4.5)$$

où  $\tilde{\mu}$  est le potentiel chimique du mélange, appelé potentiel chimique généralisé pour le distinguer de son homologue classique, et  $\kappa$  est un coefficient de diffusion appelé mobilité. Dans la littérature, ces modèles sont généralement appelés modèles de Cahn-Hilliard, en référence à l'équation d'évolution du paramètre d'ordre, et nous emploierons dans ce travail cette terminologie pour les distinguer de la méthode fluide pur.

A ce stade, on peut remarquer une différence relativement importante entre la méthode mettant en jeu un fluide pur et les modèles de type Cahn-Hilliard en ce qui concerne la nature des phénomènes d'anti-diffusion de l'interface. En effet, dans le cas d'un fluide pur les variations continues du paramètre d'ordre dans la zone de transition sont contrôlées par des phénomènes de propagation d'ondes alors que pour les modèles de Cahn-Hilliard, ces variations sont contrôlées par des phénomènes de diffusion.

Avant de finir ce paragraphe, il faut noter que l'on peut distinguer une troisième grande classe de méthodes à interfaces diffuses : les méthodes Phase-Field. Dans la littérature, ces méthodes sont également appelées méthodes de Cahn-Hilliard (et inversement) car elles mettent également en jeu un fluide binaire, il convient cependant de bien les distinguer. Dans ces méthodes, on suppose l'existence d'une variable "thermodynamique" supplémentaire appelée variable champ de

phase  $\phi$ , valant 0 dans une phase et 1 dans l'autre, jouant le rôle de paramètre d'ordre et variant continûment dans la zone de transition. Ces méthodes s'appuient ensuite sur le même type de modélisation thermodynamique que celle décrite précédemment. Si les équations du mouvement s'écrivent encore sous une forme similaire, la principale différence provient de l'équation d'évolution du paramètre d'ordre qui s'écrit :

$$\frac{d\phi}{dt} = -\kappa\tilde{\mu} \quad (4.6)$$

Bien que la variable  $\phi$  ait la signification d'une indicatrice de phase, et qu'à ce titre sa signification thermodynamique ne soit pas très claire, les méthodes Phase-Field ont été utilisées avec succès pour de nombreux problèmes de transition de phase solide-liquide, en particulier pour les problèmes de création et d'évolution de dendrites d'origine thermique ou solutale, *e.g.* voir [5, 148]. Si ces méthodes font également partie de la famille des méthodes à interfaces diffuses, elles ne seront pas abordées dans la suite de ce paragraphe.

### 4.1.3 Discussion sur ces méthodes

Comme nous l'avons signalé, les méthodes à interfaces diffuses présentent l'avantage, comme les méthodes basées sur une modélisation classique de type Level Set, de pouvoir suivre implicitement les interfaces sur une grille fixe à partir d'un seul et même jeu d'équations pour les deux phases. En effet, si les équations de transport des méthodes à interfaces diffuses sont initialement dédiées aux couches capillaires, elles dégènèrent cependant naturellement vers les équations de transport de la mécanique des milieux continus classique dans les phases homogènes où les gradients du paramètre d'ordre n'apportent plus aucune contribution. Si les interfaces sont représentées comme des zones volumiques de transition dans les deux types de méthodes, l'intérêt majeur des méthodes à interfaces diffuses est d'introduire cette représentation dès le départ dans la modélisation thermodynamique et non pour des raisons purement numériques. Cela signifie que ces méthodes sont non seulement plus riches mais aussi que l'épaisseur interfaciale a une signification physique. En particulier, cela signifie qu'il n'est pas nécessaire comme dans la méthode Level Set d'introduire un algorithme de renormalisation de l'interface puisque les mécanismes d'anti-diffusion des interfaces sont une propriété intrinsèque de la modélisation thermodynamique.

Dans le cadre de la simulation numérique directe, les potentialités de la méthode à interfaces diffuses mettant en jeu un fluide pur ont été illustrées par Nadiga et Zaleski [108] pour des problèmes isothermes puis par Jamet *et al.* [83] pour des problèmes isothermes et anisothermes. En particulier, les applications présentées par Jamet illustrent clairement la richesse de cette méthode : coalescence, angle de contact ou encore mouvements de lignes triples avec hystérésis. Dans ces deux dernières références, les équations sont résolues dans le cadre d'une méthode de volumes finis structurés sur un maillage décalé de type MAC, avec des approximations de type différences finies pour les termes de dérivée spatiale d'ordre élevé du tenseur capillaire. Dans le cadre des situations que l'on souhaite traiter dans ce travail, ce type de discrétisation spatiale n'est cependant pas approprié puisque si l'on veut pouvoir considérer des cellules unitaires complexes il est généralement nécessaire d'utiliser une grille non structurée.

Une solution possible consisterait alors à utiliser un solveur de Riemann approché sur une grille non structurée de type éléments finis, par exemple à partir de la méthode Finite Volume Galerkin [52]. Cependant, une telle voie représente une tâche extrêmement complexe. La première difficulté est associée au caractère quasi-incompressible de l'écoulement. L'écoulement peut en effet être considéré comme incompressible dans chaque phase dans beaucoup de situations pratiques

et pour ces écoulements, il est reconnu que les solveurs de Riemann sont trop diffusifs et produisent une solution médiocre [71]. Pour ces écoulements à faible nombre de Mach, des solveurs préconditionnés ont été proposés dans un contexte non structuré, comme par exemple le schéma de Roe-Turkel [147], mais il semble difficile d'étendre ces solveurs à des fermetures thermodynamiques complexes qui, dans le cadre d'un problème de transition de phase, doivent nécessairement être caractérisées par une équation d'état non convexe comme par exemple l'équation d'état de van der Waals. La deuxième difficulté est associée à la discrétisation spatiale sur une grille non structurée des termes de dérivée spatiale d'ordre élevé du tenseur capillaire. En effet, si dans un contexte structuré il est possible d'utiliser des approximations de type différences finies centrées ou décentrées selon les termes, en revanche il apparaît très difficile de s'inspirer de ces approximations dans un contexte non structuré. De plus, notons que dans un contexte éléments finis, l'ordre de dérivée de ces termes suggérerait l'utilisation d'éléments finis non conformes<sup>3</sup>.

D'un autre côté, les méthodes à interfaces diffuses mettant en jeu un fluide binaire, c'est-à-dire les modèles de type Cahn-Hilliard, apparaissent plus attractives du point de vue numérique dans le sens où elles peuvent être résolues relativement facilement par des schémas et des méthodes numériques "classiques". De plus, puisqu'il s'agit d'un fluide incompressible, ces méthodes bénéficient de l'efficacité des solveurs elliptiques. Du point de vue des applications de ces méthodes, on distingue essentiellement deux types de situations : les écoulements incompressibles à masse volumique constante et les écoulements incompressibles à masse volumique variable. On ne prétend pas ici être exhaustif mais, de notre point de vue, les applications les plus intéressantes au regard des situations que nous souhaitons traiter sont celles de Jacqmin [79, 80] qui, s'inscrivant dans le cadre d'une approximation de type Boussinesq, peuvent être classées dans la catégorie des écoulements à masse volumique constante et celles de Boyer [27] dans le cadre des écoulements à masse volumique variable. Signalons dès à présent que, contrairement aux méthodes mettant en jeu un fluide pur, ces méthodes ne prennent pas en compte le changement de phase.

Les travaux proposés dans ces deux références sont intéressants pour plusieurs raisons, non seulement du point de vue des applications : phénomènes multiples de rupture et de coalescence, mouvement de ligne de contact, . . . , mais également d'un point de vue numérique. En effet, ces deux auteurs utilisent une forme dite *potentielle* des équations du mouvement, forme équivalente à la forme conservative mais ne faisant intervenir que des dérivées du premier ordre au travers de *potentiels chimiques généralisés*. Les travaux de Jacqmin sur la forme potentielle sont particulièrement intéressants : d'une part le lien entre les formes conservative et potentielle est clair [78] et, d'autre part, un schéma de discrétisation spatiale conservatif au regard de l'énergie est proposé [79] pour la forme potentielle. En plus de l'avantage incontestable du contexte incompressible, si les deux schémas de discrétisation spatiale proposés s'inscrivent dans le cadre d'une méthode de volumes finis structurés, il semble que leur extension aux maillages non structurés, en particulier dans un contexte éléments finis, ne pose pas de difficulté majeure.

#### 4.1.4 Choix d'une méthode

Potentiellement, la méthode fluide pur est celle qui nous intéresse le plus car elle prend naturellement en compte le changement de phase mais, dans une première approche, nous avons rencontré de nombreuses difficultés (mentionnées précédemment) pour l'utiliser dans un contexte non structuré. D'un autre côté, les modèles de type Cahn-Hilliard ne prennent pas en compte le changement de phase mais sont numériquement plus attractives, en particulier dans le cadre d'une formulation incompressible. On voit donc que la méthode mettant en jeu un fluide pur et les modèles de type Cahn-Hilliard constituent deux voies parallèles présentant chacune leurs

---

<sup>3</sup>continuité des dérivées premières sur les faces de l'élément

propres avantages et leurs propres inconvénients.

Dans ce travail, nous avons cherché à établir un lien entre ces deux types de méthodes. Plus précisément, nous avons cherché à savoir s'il était possible de prendre en compte le changement de phase dans le cadre d'une méthode à interface diffuse qui puisse être résolue relativement facilement par des schémas et des méthodes numériques "classiques".

Dans ce chapitre, nous établissons dans un premier temps le modèle compressible présenté par Anderson *et al.* [4] qui a été obtenu dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles. Nous avons préféré reprendre complètement l'établissement du modèle dans le cadre du principe de moindre action de Hamilton. Si les développements présentés conduisent au même modèle, nous pensons cependant que l'approche proposée dans ce travail apporte deux contributions intéressantes.

D'une part, cette approche s'inscrit dans le cadre d'un modèle obtenu par Gouin [63] et Chevalier [42] pour les mélanges de deux fluides du second gradient qui constitue une généralisation aux cas des mélanges de la théorie du second gradient pour un fluide pur. L'approche proposée montre dans un cadre thermodynamique clair et rigoureux que les modèles de type Cahn-Hilliard ne sont qu'une conséquence du modèle obtenu pour les mélanges de deux fluides du second gradient.

D'autre part, nous proposons plusieurs formes potentielles pour les équations du mouvement qui sont discutées sur la base des conditions d'équilibre pour le mélange. En particulier, nous retrouvons une forme potentielle présentée par Lowengrub et Truskinovsky [99] d'une part, et une autre forme présentée par Jacqmin [79] d'autre part.

L'approche proposée peut également être vue comme une approche complémentaire permettant de se familiariser avec la théorie du second gradient et les modèles de type Cahn-Hilliard.

Dans un deuxième temps, nous développons à partir du modèle compressible un modèle dit *quasi-incompressible* à partir d'une définition thermodynamique de l'incompressibilité. Nous nous appuyons pour cela principalement sur les développements proposés par Lowengrub et Truskinovsky [99] pour un modèle quasi-incompressible de type Cahn-Hilliard. En comparaison du modèle présenté dans cette dernière référence, le modèle proposé ici présente plusieurs différences mais nous montrons au travers de la relation de Gibbs qu'il est légitime de reprendre les mêmes arguments.

Enfin, nous présentons une approximation de type Boussinesq pour le modèle quasi-incompressible et nous montrons que le modèle obtenu est équivalent au modèle proposé par Jacqmin [79]. Si les deux modèles précédents, *i.e.* compressible et quasi-incompressible, ne sont pas utilisés dans les applications dans ce travail, ils permettent en revanche d'établir le modèle Boussinesq d'une manière claire et offrent un cadre pour de futures investigations, en particulier pour la prise en compte du changement de phase.

En ce qui concerne la résolution numérique du modèle Boussinesq, le schéma en temps s'inspire des méthodes de type Level Set et du schéma proposé par Boyer. Il est constitué au cours d'un pas de temps des deux étapes suivantes : la première consiste à résoudre l'équation du paramètre d'ordre par une méthode de Newton, et la deuxième consiste à résoudre les équations du mouvement à partir d'une méthode de projection. Le schéma de discrétisation spatiale s'inscrit dans le cadre d'une méthode éléments finis et apporte de notre point de vue une contribution originale. En effet, si l'équation de Cahn-Hilliard a reçu une attention particulière du point de vue de sa résolution numérique (*e.g.* dans [15]), la résolution numérique du modèle de Cahn-Hilliard complet, *i.e.* incluant la partie hydrodynamique, n'a à notre connaissance jamais été abordée dans un contexte éléments finis. La dernière partie de ce chapitre est consacrée à quelques applications du modèle Boussinesq et du schéma numérique développés.

Si les applications présentées dans ce travail ne prennent pas en compte le changement de phase et s'inscrivent dans le cadre d'une approximation de type Boussinesq, nous pensons que les

développements présentés dans ce chapitre constituent un point de départ à partir duquel il sera possible d'étendre le modèle et le schéma numérique aux problèmes quasi-incompressibles avec changement de phase. Enfin, signalons également que très récemment, Jamet [84] a proposé, en s'inspirant des développements de Jacqmin, une discrétisation spatiale conservative au regard de l'énergie, toujours en volumes finis structurés à mailles décalées, de la forme potentielle dans le cas fluide pur et qu'il serait intéressant de reprendre ces développements dans un contexte non structuré.

## 4.2 Mélange de deux fluides du second gradient

Pour un mélange de deux fluides du second gradient, les densités des deux fluides en présence jouent le rôle du paramètre d'ordre. Dans ce cas, l'énergie interne dépend non seulement des densités et des entropies de chaque constituant mais également des gradients de densité. Nous présentons en annexe E les équations de transport d'un tel mélange dans le cadre d'un formalisme Hamiltonien. Nous montrons également en annexe E que lorsque seule la fraction massique  $c$  de l'un des constituants joue le rôle de paramètre d'ordre, alors les équations de transport du mélange dégénèrent naturellement vers les modèles dits de Cahn-Hilliard.

A ce stade, pour poursuivre les développements, il reste à préciser une forme particulière pour l'énergie interne du mélange. On suppose ici que l'énergie interne spécifique du mélange doué de capillarité interne s'écrit sous la forme proposée par Cahn et Hilliard [31] :

$$e(\rho, c, s, \nabla c) = e^o(\rho, c, s) + \frac{\lambda}{2\rho} (\nabla c)^2 \quad (4.7)$$

où on rappelle que  $e^o$  est définie comme la partie classique de l'énergie interne et  $\lambda$  désigne le coefficient de capillarité interne du mélange. Ce coefficient sera supposé constant dans la suite des développements. Comme c'est le cas pour un fluide pur du second gradient, la donnée de la partie classique de l'énergie interne (*i.e.* équation d'état) permet de fermer complètement le système.

### Relation de Gibbs

Dans le cas général, la relation de Gibbs pour un mélange dont l'énergie interne dépend de  $\rho$ ,  $c$ ,  $s$  et  $\nabla c$  est donnée par la relation (E.86) (*cf.* annexe). Dans le cas où l'énergie interne du mélange est donnée par (4.7), on peut particulariser les expressions (E.84) et (E.85) pour  $\phi_1$  et  $\phi_2$  :

$$\phi_1 = -\frac{\lambda c}{\rho} \nabla c, \quad \phi_2 = \frac{\lambda(1-c)}{\rho} \nabla c \quad (4.8)$$

On peut également particulariser l'identité de Gibbs (E.86) pour l'énergie interne du mélange :

$$de = \left( \frac{p}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho^2} (\nabla c)^2 \right) d\rho + T ds + \left( \mu + \frac{\lambda}{\rho^2} \nabla c \cdot \nabla \rho \right) dc + \frac{\lambda}{\rho} \nabla c \cdot d(\nabla c) \quad (4.9)$$

On obtient ainsi à partir de (4.9) les relations :

$$\left( \frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_{c,s,\nabla c} = \frac{p}{\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho^2} (\nabla c)^2 \quad (4.10)$$

$$\left( \frac{\partial e}{\partial s} \right)_{\rho,c,\nabla c} = T \quad (4.11)$$

$$\left( \frac{\partial e}{\partial c} \right)_{\rho,s,\nabla c} = \mu + \frac{\lambda}{\rho^2} \nabla c \cdot \nabla \rho \quad (4.12)$$

$$\left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right)_{\rho,c,s} = \frac{\lambda}{\rho} \nabla c \quad (4.13)$$

A partir de (4.10), la forme (4.7) permet de déterminer la relation entre la pression  $p$  et la pression thermodynamique  $p^o$ . En effet, à partir de la définition de la pression thermodynamique, de l'énergie interne du mélange (4.7) et de la relation (4.10), on a :

$$p^o = \rho^2 \left( \frac{\partial e^o}{\partial \rho} \right) = \rho^2 \left( \frac{\partial e}{\partial \rho} \right) - \rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \frac{\lambda}{2\rho} (\nabla c)^2 \right), \quad p = p^o - \frac{3\lambda}{2} (\nabla c)^2 \quad (4.14)$$

De la même manière, à partir de la définition du potentiel chimique thermodynamique, dans le cas où il n'existe qu'une seule entropie pour le mélange, de l'énergie interne (4.7) et de la relation (4.12), on peut écrire la relation suivante entre le potentiel chimique  $\mu$  et le potentiel chimique thermodynamique  $\mu^o$  :

$$\mu^o = \left( \frac{\partial e^o}{\partial c} \right) = \left( \frac{\partial e}{\partial c} \right), \quad \mu = \mu^o - \frac{\lambda}{\rho^2} \nabla c \cdot \nabla \rho \quad (4.15)$$

A partir des relations (4.14) et (4.15), la relation de Gibbs (4.9) devient :

$$de = \left( \frac{p^o}{\rho^2} - \frac{\lambda}{2\rho^2} (\nabla c)^2 \right) d\rho + T ds + \mu^o dc + \frac{\lambda}{\rho} \nabla c \cdot d(\nabla c) \quad (4.16)$$

### 4.2.1 Equations de transport du mélange

Dans le cas où l'énergie interne est donnée par (4.7), les équations de transport du mélange (E.87), (E.88) et (E.89) s'écrivent sous la forme :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (4.17)$$

$$\rho \frac{dc}{dt} = \nabla \cdot (\kappa \nabla \tilde{\mu}), \quad \kappa = \varsigma^{-1} \rho^2 c^2 (1-c)^2 \quad (4.18)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \left( p + \lambda (\nabla c)^2 \right) - \nabla \cdot (\lambda \nabla c \otimes \nabla c) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (4.19)$$

où  $\mathbf{g}$  désigne l'accélération de la pesanteur et  $\boldsymbol{\tau}$  le tenseur des contraintes visqueuses pour le mélange :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^t) - \frac{2}{3} \eta (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} \quad (4.20)$$

L'équation (4.17) est l'équation classique de conservation de la masse du mélange et l'équation (4.18) est l'équation d'évolution de la fraction massique  $c$ , c'est-à-dire ici pour la forme (4.7), l'équation d'évolution du paramètre d'ordre. Dans le contexte des modèles de type Cahn-Hilliard [40, 79], le paramètre  $\kappa$  est appelé mobilité. On rappelle que  $\varsigma$  correspond à l'intensité de la force de frottement entre les deux fluides et  $\tilde{\mu}$  désigne le potentiel chimique généralisé du mélange défini par (E.90). A partir des relations (4.8) et (4.15), l'expression de  $\tilde{\mu}$  se particularise et devient :

$$\tilde{\mu} = \mu - \nabla \cdot \left( \frac{\lambda}{\rho} \nabla c \right) = \mu^o - \frac{\lambda}{\rho} \nabla^2 c \quad (4.21)$$

La relation (4.14) permet d'écrire les équations du mouvement (4.19) sous une forme où la pression thermodynamique  $p^o$  intervient explicitement :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \left( p^o - \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \right) - \nabla \cdot (\lambda \nabla c \otimes \nabla c) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (4.22)$$

Le système d'équations (4.17)-(4.22) correspond aux équations de transport d'un mélange compressible de deux fluides du second gradient pour lequel l'énergie interne du mélange est donnée par (4.7). Notons que ce système correspond au modèle de Cahn-Hilliard compressible proposé par Anderson *et al.* [4] dérivé dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles.

On rappelle que ce système a été obtenu dans le cadre du principe de Hamilton en supposant qu'il n'existait qu'une seule entropie pour le mélange. La dissipation a été modélisée par un tenseur des contraintes visqueuses pour chaque constituant et par une force de frottement de type Stokes entre les deux constituants. Il convient également de rappeler que, pour simplifier le système, les effets de masse ajoutée ont été négligés, les tenseurs des contraintes visqueuses ont été regroupés sous la forme d'un tenseur unique pour le mélange et que les accélérations des deux constituants ont été supposées être suffisamment proches pour pouvoir être confondues.

### 4.2.2 Conditions d'équilibre

Dans le cas où le coefficient de capillarité interne  $\lambda$  est constant, l'énergie libre spécifique  $f$  étant définie comme la transformée de Legendre de l'énergie interne  $e$  par rapport à l'entropie  $s$ , on montre facilement que la forme (4.7) conduit à la forme suivante pour l'énergie libre spécifique :

$$f(\rho, c, T, \nabla c) = f^o(\rho, c, T) + \frac{\lambda}{2\rho} (\nabla c)^2 \quad (4.23)$$

Dans le cas isotherme, les conditions d'équilibre pour le mélange peuvent être obtenues en minimisant l'énergie libre totale du système. Les calculs sont présentés en annexe pour une énergie libre dépendant de  $\rho$ ,  $c$  et  $\nabla c$ . Pour la forme particulière (4.23), les conditions d'équilibre (E.98)-(E.99) sur  $\Omega$  se particularisent à partir de (4.16) en :

$$\frac{p^o}{\rho} + f^o - c\mu^o + \frac{\lambda c}{\rho} \nabla^2 c = C_1 \quad (4.24)$$

$$\frac{p^o}{\rho} + f^o + (1-c)\mu^o - \frac{\lambda(1-c)}{\rho} \nabla^2 c = C_2 \quad (4.25)$$

où  $C_1$  et  $C_2$  sont deux constantes d'intégration. A partir de la définition du potentiel chimique généralisé  $\tilde{\mu}$ , la différence des conditions (4.25) et (4.24) conduit à la relation :

$$\tilde{\mu} = \mu^o - \frac{\lambda}{\rho} \nabla^2 c = C_2 - C_1 \quad (4.26)$$

La relation (4.26) montre que le potentiel chimique généralisé  $\tilde{\mu}$  est uniforme à l'équilibre sur  $\Omega$ . La constante  $C_2 - C_1$  peut être déterminée par la valeur particulière de  $\tilde{\mu}$  dans l'une des deux phases ou par le potentiel chimique classique du mélange  $\mu^o$  si l'on se place suffisamment loin de l'interface. La valeur de  $\tilde{\mu}$  à l'équilibre est donc connue dès que l'on se donne une fermeture thermodynamique, c'est-à-dire dès que l'on se donne l'énergie libre classique  $f^o(\rho, c)$ .

Si on introduit le potentiel chimique classique  $\mu_1^o$ , donné par la relation thermodynamique  $\rho\mu_1^o = p^o + \rho f^o - \rho c\mu^o$ , dans la condition d'équilibre (4.24), on obtient :

$$\tilde{\mu}_1 = \mu_1^o + \frac{\lambda c}{\rho} \nabla^2 c = C_1 \quad (4.27)$$

où, par analogie avec  $\tilde{\mu}$ ,  $\tilde{\mu}_1$  désigne le potentiel chimique généralisé du constituant 1. La relation (4.27) montre que le potentiel chimique généralisé  $\tilde{\mu}_1$  est lui aussi uniforme à l'équilibre. Ici encore, la constante d'intégration  $C_1$  peut être déterminée par la valeur du potentiel chimique classique  $\mu_1^o$  dans l'une des deux phases.

Enfin, si la frontière  $\partial\Omega$  est porteuse d'une énergie de surface  $F_s$  telle que  $F_s = F_s(c)$ , alors les conditions d'équilibre (E.100) et (E.101) sont redondantes et s'écrivent :

$$\mathbf{n} \cdot \lambda \nabla c = -F_s'(c), \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (4.28)$$

Cette dernière relation caractérise les interactions capillaires entre l'interface et la paroi et elle précise, dans le cas statique, l'angle de contact de la couche capillaire à la paroi.

### 4.2.3 Formes conservative et potentielle des équations du mouvement

#### Forme conservative des équations du mouvement

Les équations (4.22) correspondent à la forme dite conservative des équations du mouvement dans le sens où les termes de pression et de capillarité peuvent tous être regroupés sous un opérateur divergence. Il faut noter qu'à partir de (4.22), on peut écrire la forme conservative équivalente :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \left( p^o + \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \right) + \nabla \cdot \left( \lambda (\nabla c)^2 \mathbf{I} - \lambda \nabla c \otimes \nabla c \right) \quad (4.29)$$

Dans (4.29), on a négligé pour alléger les développements la contribution visqueuse et la force de pesanteur. A partir de (4.29), on peut introduire la pression  $\mathcal{P}$  dite pression mécanique définie par :

$$\mathcal{P} = p^o + \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \quad (4.30)$$

L'intérêt d'une telle forme sera justifiée au paragraphe concernant l'interprétation de la tension de surface en théorie du second gradient.

#### Forme potentielle des équations du mouvement

Pour dériver la forme dite potentielle des équations du mouvement, on considère la forme conservative (4.22), sans les termes visqueux et la force de pesanteur, et on note les identités :

$$\nabla \cdot (\lambda \nabla c \otimes \nabla c) = \lambda \nabla c \cdot \nabla \nabla c + \lambda \nabla^2 c \nabla c \quad (4.31)$$

$$\nabla \left( \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \right) = \lambda \nabla c \cdot \nabla \nabla c \quad (4.32)$$

A partir de ces identités et de la définition (4.21) du potentiel chimique généralisé  $\tilde{\mu}$ , on peut écrire les équations du mouvement sous la forme équivalente :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla p^o - \rho \mu^o \nabla c + \rho \tilde{\mu} \nabla c \quad (4.33)$$

A partir des relations thermodynamiques classiques (D.14) et (D.15) données en annexe D, les équations du mouvement (4.33) s'écrivent dans le cas isotherme sous la forme :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\rho \nabla (\mu_1^o + c\mu^o) + \rho \tilde{\mu} \nabla c \quad (4.34)$$

A partir de (4.23) et de la transformée de Legendre (D.17), on reconnaît dans (4.34) la définition de l'enthalpie libre classique  $g^o$  du mélange :

$$g^o = \mu_1^o + c\mu^o \quad (4.35)$$

Les équations (4.34) correspondent à une forme potentielle particulière des équations du mouvement dérivée par Lowengrub et Truskinovsky [99]. Il faut cependant noter que l'étude des conditions d'équilibre montre que  $g^o$  n'est généralement pas uniforme à l'équilibre. En effet, à partir des relations (4.26) et (4.27), on a :

$$g^o = \mu_1^o + c\mu^o = \tilde{\mu}_1 + c\tilde{\mu} = C_1 + c(C_2 - C_1) \quad (4.36)$$

A partir de (4.26), la relation (4.36) montre que le potentiel thermodynamique  $g^o$  est uniforme à l'équilibre dans le cas où la valeur à l'équilibre du potentiel chimique généralisé  $\tilde{\mu}$  est  $\tilde{\mu}_{eq} = 0$ . Dans ce cas, l'équilibre mécanique est clairement illustré par la forme potentielle (4.34).

On peut aussi obtenir une deuxième forme potentielle en réarrangeant les termes de (4.34) :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\rho \nabla \tilde{\mu}_1 - \rho c \nabla \tilde{\mu} \quad (4.37)$$

A partir de la relation classique  $\rho \mu_1^o = p^o + \rho f^o - \rho c \mu^o$ , le potentiel chimique généralisé  $\tilde{\mu}_1$  défini par (4.27) peut être relié à la pression mécanique  $\mathcal{P}$  définie par (4.30) par la relation :

$$\rho \tilde{\mu}_1 = \mathcal{P} + F^o - \rho c \tilde{\mu} - \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \quad (4.38)$$

Les équations du mouvement (4.37) avec la relation (4.38) correspondent à une généralisation pour un mélange compressible de la forme potentielle proposée par Jacqmin [79], dérivée pour un mélange incompressible dans le cadre d'une approximation de Boussinesq. Les potentiels chimiques généralisés  $\tilde{\mu}_1$  et  $\tilde{\mu}$  étant uniformes à l'équilibre, la forme potentielle (4.37) illustre clairement l'équilibre mécanique quelles que soient les valeurs d'équilibre  $\tilde{\mu}_{1eq}$  et  $\tilde{\mu}_{eq}$ .

#### 4.2.4 Tension interfaciale

Dans ce paragraphe, nous montrons que lorsque la zone de transition est vue comme une surface de discontinuité, on retrouve les interprétations énergétique (*i.e.* énergie en excès) et mécanique (*i.e.* force par unité longueur) de la tension de surface. On s'appuie ici sur les développements de Jamet [81], pour un fluide pur du second gradient, et ceux de Fouillet [55], pour un mélange de deux fluides du second gradient. Ces développements sont repris à titre pédagogique et pour bien montrer que l'on retrouve des résultats analogues lorsque la fraction massique joue le rôle de paramètre d'ordre.

##### Approche énergétique

Considérons une interface plane à l'équilibre thermique séparant les deux phases  $\alpha$  et  $\beta$  d'un mélange et notons  $x$  la direction normale à l'interface. Soit  $F^{ex}$  l'énergie libre en excès de l'interface vue comme une surface de discontinuité. Cette grandeur surfacique est définie par :

$$F^{ex} = \int_{x_\alpha}^{x_i} (F - F_\alpha) dx + \int_{x_i}^{x_\beta} (F - F_\beta) dx \quad (4.39)$$

où  $x_i$  désigne la position de l'interface modélisée comme une surface de discontinuité. A partir de l'expression (4.23) de l'énergie libre spécifique  $f$  et de la différentielle (D.16) de l'énergie libre volumique classique  $F^o$ , on peut montrer que la différentielle de l'énergie libre volumique  $F$  s'écrit dans le cas isotherme :

$$dF = \mu_1^o d\rho + \mu^o d\rho c + d \left( \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \right) \quad (4.40)$$

On peut montrer que la différentielle (4.40) intégrée dans les phases  $\alpha$  et  $\beta$  conduit aux relations :

$$F - F_\alpha = \mu_{1\alpha}^o (\rho - \rho_\alpha) + \mu_\alpha^o (\rho c - \rho_\alpha c_\alpha) + \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \quad (4.41)$$

$$F - F_\beta = \mu_{1\beta}^o (\rho - \rho_\beta) + \mu_\beta^o (\rho c - \rho_\beta c_\beta) + \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \quad (4.42)$$

où dans (4.41) et (4.42), on a supposé que  $\nabla c$  s'annulait dans les phases. Pour une interface modélisée comme une surface de discontinuité, les conditions d'équilibre sont données par  $\mu_{1\alpha}^o = \mu_{1\beta}^o = \mu_{1eq}^o$  et  $\mu_\alpha^o = \mu_\beta^o = \mu_{eq}^o$ , et l'énergie libre surfacique en excès (4.39) s'écrit :

$$F^{ex} = \mu_{1eq}^o \rho^{ex} + \mu_{eq}^o \rho c^{ex} + \int_{x_\alpha}^{x_\beta} \lambda (\nabla c)^2 dx \quad (4.43)$$

où  $\rho^{ex}$  et  $\rho c^{ex}$  désignent la densité du mélange et la densité du deuxième constituant en excès. Si on fixe la position de l'interface  $x_i$  telle que  $\mu_{1eq}^o \rho^{ex} + \mu_{2eq}^o \rho c^{ex} = 0$  [55, 112], l'énergie libre surfacique en excès, c'est-à-dire la tension de surface, est donnée par :

$$\sigma = F^{ex} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda (\nabla c)^2 dx \quad (4.44)$$

Les bornes d'intégration de (4.44) sont choisies pour bien distinguer la différence entre une interface modélisée comme une zone de transition, on parle généralement dans ce cas de description dite *mesoscopique* ou encore *coarse grained description* [85], d'une interface vue comme une surface de discontinuité et on peut parler dans ce cas d'une description dite *macroscopique*. La relation (4.44) montre que pour une interface diffuse, la tension de surface est une propriété intrinsèque correspondant à un excès d'énergie dans la zone capillaire dû au fort gradient du paramètre d'ordre.

### Approche mécanique

Pour une interface plane à l'équilibre mécanique séparant les deux phases d'un mélange isotherme, le potentiel chimique généralisé du mélange  $\tilde{\mu}$  est uniforme et la seule équation du système (4.17)-(4.19) demeurant non triviale est l'équation de quantité de mouvement qui se simplifie, en l'absence de gravité et de dissipation visqueuse, en :

$$\nabla \cdot \mathbf{T} = 0, \quad \mathbf{T} = -\mathcal{P}\mathbf{I} + \lambda (\nabla c)^2 \mathbf{I} - \lambda \nabla c \otimes \nabla c \quad (4.45)$$

Dans (4.45),  $\mathbf{T}$  est appelé tenseur des contraintes capillaires [4, 50]. Pour une interface plane, ce tenseur est sphérique dans le repère lié à l'interface et si on note  $\mathbf{x}$  le vecteur unitaire dirigé selon la normale à l'interface, le vecteur contrainte  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{T}$ , agissant selon les trois directions  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  et  $\mathbf{z}$ , est donné par :

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{T} = -\mathcal{P}\mathbf{x}, \quad \mathbf{y} \cdot \mathbf{T} = \left( -\mathcal{P} + \lambda \left( \frac{dc}{dx} \right)^2 \right) \mathbf{y}, \quad \mathbf{z} \cdot \mathbf{T} = \left( -\mathcal{P} + \lambda \left( \frac{dc}{dx} \right)^2 \right) \mathbf{z} \quad (4.46)$$

Les relations (4.46) montrent qu'à l'intérieur de la couche capillaire, le mélange est soumis à des contraintes plus importantes<sup>4</sup> dans les directions tangentielles à l'interface. On remarque également que la pression mécanique permet de retrouver, dans le cadre d'une approche mécanique, la tension de surface déterminée à partir d'une approche énergétique.

## 4.3 Cas des mélanges incompressibles

On distingue essentiellement trois définitions caractérisant un fluide incompressible [147]. La première associe un fluide incompressible à un fluide dont la densité est constante dans tout l'écoulement. La deuxième associe un fluide incompressible à un fluide pour lequel le champ de vitesse est à divergence nulle. Enfin, la troisième associe un fluide incompressible à un fluide dont la densité ne varie pas avec la pression. On retient dans ce travail la troisième définition en notant que la densité du mélange peut cependant varier avec la fraction massique et éventuellement avec la température pour des problèmes anisothermes.

---

<sup>4</sup>en valeur absolue

### 4.3.1 Modèle quasi-incompressible

Nous présentons dans ce paragraphe les conséquences de la condition d'incompressibilité dans le cadre de sa définition thermodynamique. Nous suivons ici les arguments de Lowengrub et Truskinovsky [99] pour introduire cette définition dans le cadre d'une thermodynamique classique et nous montrons qu'elle est thermodynamiquement cohérente pour la relation de Gibbs (4.16) dans le cadre de la théorie du second gradient. Nous présentons ensuite le système d'équations résultant en précisant quel peut être son intérêt pour la prise en compte du changement de phase et enfin, nous apportons quelques remarques sur la fermeture thermodynamique du modèle.

#### Condition d'incompressibilité

Avant d'introduire la condition d'incompressibilité, il est utile de revenir sur la relation (4.36) qui indique que l'on peut confondre l'enthalpie libre  $g$  à son homologue classique  $g^o$ . Pour s'en convaincre définitivement, il suffit d'utiliser la relation (4.23) et la transformation de Legendre (D.17) reliant l'énergie libre à l'enthalpie libre :

$$g = f + \rho \left( \frac{\partial f}{\partial \rho} \right)_{c,T} = f^o + \rho \left( \frac{\partial f^o}{\partial \rho} \right)_{c,T} \quad (4.47)$$

Par conséquent, lorsque l'énergie interne du mélange est donnée par (4.7), l'enthalpie libre  $g$  correspond à l'enthalpie libre classique  $g^o$ .

A présent, introduisons la condition d'incompressibilité pour le mélange. Pour un mélange incompressible, la relation  $\rho = \rho(c, T)$  joue le rôle d'équation d'état. Dans ce cas, la pression  $p^o$  a plutôt la signification d'une pression dynamique puisqu'elle ne peut plus être déterminée à partir de sa définition thermodynamique mais est solution des équations de transport. En reprenant les arguments de Lowengrub et Truskinovsky [99], la transformation de Legendre (D.17) reliant l'énergie libre à l'enthalpie libre devient dégénérée pour un mélange incompressible ; en revanche, une description thermodynamique à partir de l'enthalpie libre reste valable et, à partir de (D.20), on peut encore écrire les relations :

$$\rho^{-1} = \left( \frac{\partial g^o}{\partial p^o} \right)_{c,T}, \quad \mu^o = \left( \frac{\partial g^o}{\partial c} \right)_{p^o,T}, \quad s^o = - \left( \frac{\partial g^o}{\partial T} \right)_{p^o,c} \quad (4.48)$$

De même, pour un mélange incompressible, on peut encore définir l'énergie libre à partir de l'enthalpie libre par la transformée de Legendre :

$$f^o(p^o, c, T) = g^o(p^o, c, T) - p^o \left( \frac{\partial g^o}{\partial p^o} \right)_{c,T} \quad (4.49)$$

Pour un mélange incompressible, la densité ne dépend pas de la pression et, à partir de la définition (4.48) de  $\rho$ , on peut écrire la définition équivalente :

$$\left( \frac{\partial^2 g^o}{\partial p^{o2}} \right)_{c,T} = 0 \quad (4.50)$$

Les relations (4.49) et (4.50) montrent que l'enthalpie libre classique d'un mélange incompressible est une fonction linéaire de la pression  $p^o$  et peut s'écrire sous la forme :

$$g^o(p^o, c, T) = f^o(c, T) + \frac{p^o}{\rho(c, T)} \quad (4.51)$$

A partir de (4.48) et (4.51), on obtient ainsi :

$$\mu^o = \left( \frac{\partial f^o}{\partial c} \right)_T + p^o \left( \frac{\partial \rho^{-1}}{\partial c} \right)_T \quad (4.52)$$

La relation (4.52) montre que pour un mélange incompressible, le potentiel chimique classique du mélange  $\mu^o$  dépend explicitement de la pression dynamique  $p^o$ .

Ce résultat reste valable en théorie du second gradient puisqu'on a montré que les enthalpies libres  $g$  et  $g^o$  étaient les mêmes. Pour s'en convaincre, on peut montrer facilement que ces développements sont complètement cohérents avec l'identité de Gibbs (4.16). Dans un premier temps, il est intéressant de remarquer que la relation (4.51) avec (4.23) peut s'écrire sous la forme équivalente :

$$f(p^o, c, T, \nabla c) = g(p^o, c, T) - \left( p^o - \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \right) \left( \frac{\partial g}{\partial p^o} \right)_{c,T} \quad (4.53)$$

D'autre part, si on se place pour simplifier dans le cas isotherme et que l'on écrit l'identité de Gibbs (4.16) pour la différentielle  $df$  en posant directement  $\rho = \rho(c)$ , on obtient :

$$df = \left( \mu^o - \left( p^o - \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \right) \left( \frac{\partial \rho^{-1}}{\partial c} \right) \right) dc + \frac{\lambda}{\rho} \nabla c \cdot d(\nabla c) \quad (4.54)$$

enfin, en remarquant que :

$$\left( \frac{\partial f}{\partial c} \right)_{\nabla c} = \left( \frac{\partial f^o}{\partial c} \right) + \frac{\partial}{\partial c} \left( \frac{\lambda}{2\rho} (\nabla c)^2 \right)_{\nabla c} \quad (4.55)$$

alors, les relations (4.54) et (4.55) conduisent directement à la relation (4.52).

### Système d'équations

On montre que les équations de transport d'un mélange incompressible sont les mêmes que celles d'un mélange compressible, en revanche la pression  $p^o$  a désormais la signification d'une pression dynamique, l'équation d'état du mélange est donnée par la relation  $\rho = \rho(c, T)$  et les potentiels chimiques classiques et généralisés dépendent explicitement de la pression dynamique. Dans le cas isotherme, les équations de transport (4.17)-(4.19) deviennent :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho(c)} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{\rho'(c)}{\rho(c)} \frac{dc}{dt} \quad (4.56)$$

$$\rho(c) \frac{dc}{dt} = \nabla \cdot (\kappa \nabla \tilde{\mu}) \quad (4.57)$$

$$\rho(c) \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \mathcal{P} + \nabla \cdot \left( \lambda (\nabla c)^2 \mathbf{I} - \lambda \nabla c \otimes \nabla c \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho(c) \mathbf{g} \quad (4.58)$$

où la mobilité  $\kappa$  est toujours définie par (4.18) et où les relations entre les pressions  $p^o$  et  $\mathcal{P}$  et les potentiels chimiques généralisés  $\tilde{\mu}_1$  et  $\tilde{\mu}$  sont les mêmes que pour un mélange compressible. L'équation (4.56) montre que la vitesse du mélange n'est pas nécessairement à divergence nulle, en particulier à l'intérieur de la couche capillaire. Un tel mélange est appelé mélange quasi-incompressible [86, 99] pour le distinguer d'un mélange incompressible pour lequel  $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ . Cette quasi-incompressibilité du mélange n'exclut pas la possibilité de contraction-expansion et, dès lors, cela signifie qu'un tel modèle serait *a priori* capable de prendre en compte le changement de phase.

### Fermeture thermodynamique

A ce stade, si l'on souhaite pouvoir utiliser le modèle, il est nécessaire de se donner une fermeture thermodynamique. En d'autres termes, il faut se donner une expression pour l'enthalpie libre du mélange et en particulier préciser la relation  $\rho = \rho(c, T)$ . Nous rappelons que du point de vue des applications, le modèle quasi-incompressible ne sera pas utilisé dans ce travail. Nous présentons

cependant dans ce paragraphe une fermeture thermodynamique possible pour illustrer un peu plus le modèle quasi-incompressible. De plus, nous nous appuyerons sur cette fermeture dans le cadre du modèle Boussinesq. Signalons que le contenu de ce paragraphe est issu d'un début de réflexion mené avec Jamet et Fouillet [82] sur la prise en compte du changement de phase dans le cadre des modèles de type Cahn-Hilliard.

Pour des solutions dites régulières, l'enthalpie libre spécifique du mélange peut s'écrire [31, 112] :

$$g^o(p^o, c, T) = (1 - c) g_1^o(p^o, T) + c g_2^o(p^o, T) + \frac{RT}{v_m} ((1 - c) \ln(1 - c) + c \ln c) + \chi c(1 - c) \quad (4.59)$$

où  $g_1^o$  et  $g_2^o$  sont les enthalpies libres des corps purs dans le mélange,  $v_m$  est le volume molaire du mélange,  $R$  est la constante de Boltzmann et  $\chi$  est un paramètre d'interaction. Le volume molaire du mélange dépend *a priori* de la composition et de la pression [30] mais on supposera ici pour simplifier que  $v_m$  est une constante et on posera  $r = R/v_m$ . A pression et température constantes, la variation d'enthalpie libre  $\Delta g^o(c)$  s'écrit à partir de (4.59) :

$$\Delta g^o(c) = rT ((1 - c) \ln(1 - c) + c \ln c) + \chi c(1 - c) \quad (4.60)$$

Notons que le fait d'avoir considéré le volume molaire du mélange comme constant conduit à une variation d'enthalpie libre  $\Delta g^o$  indépendante de la pression. La limite de métastabilité du mélange est donnée par la condition :

$$\frac{\partial^2 \Delta g^o}{\partial c^2} = 0 \Rightarrow c(1 - c) = \frac{rT}{2\chi} \quad (4.61)$$

Si  $c_c$  et  $T_c$  désignent les coordonnées du point critique, la condition (4.61) conduit à l'existence d'un point critique  $c_c = 1/2$  pour  $\chi = 2rT_c$ . En posant  $\Delta c = (c - c_c)/c_c$ , on peut obtenir une forme polynômiale de  $\Delta g^{o'}$  au voisinage du point critique pour  $T \leq T_c$  à partir d'un développement en séries de Taylor autour de  $\Delta c$  :

$$\Delta g^{o'}(c) = \frac{16rT}{3} \left( c - \frac{c_\alpha + c_\beta}{2} \right) (c - c_\alpha) (c - c_\beta) \quad (4.62)$$

où on a posé :

$$c_\alpha = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{3 \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)}, \quad c_\beta = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{3 \left( \frac{T_c}{T} - 1 \right)} \quad (4.63)$$

A partir de (4.62), l'expression (4.59) peut s'écrire au voisinage du point critique :

$$g^o(p^o, c, T) = (1 - c) g_1^o(p^o, T) + c g_2^o(p^o, T) + \frac{4rT}{3} (c - c_\alpha)^2 (c - c_\beta)^2 + C \quad (4.64)$$

où  $C$  est une constante d'intégration pouvant être choisie telle que  $\Delta g^o(c_\alpha) = \Delta g^o(c_\beta) = 0$ . A ce stade, si on retourne à l'expression (4.51) de l'enthalpie libre et à la définition (4.48) de la densité du mélange, on peut identifier :

$$f^o(c, T) = \frac{4rT}{3} (c - c_\alpha)^2 (c - c_\beta)^2 + C \quad (4.65)$$

$$\rho^{-1}(c, T) = \left( \frac{\partial g_1^o}{\partial p^o} \right)_T + c \left( \frac{\partial g_2^o - g_1^o}{\partial p^o} \right)_T \equiv a(T) c + b(T) \quad (4.66)$$

Ainsi, comme l'on pouvait s'y attendre, le fait d'avoir considéré le volume molaire du mélange indépendant de la composition et de la pression conduit à la loi de mélange (4.66) dite simple pour laquelle le volume spécifique reste constant au cours du mélange.

### 4.3.2 Modèle Boussinesq

Dans ce paragraphe, on montre que dans le cadre d'une approximation de Boussinesq, les équations de transport du mélange quasi-incompressible dégèrent naturellement vers le modèle isotherme Boussinesq de type Cahn-Hilliard proposé par Jacqmin [79].

Dans le cas isotherme et dans le cadre d'une approximation de Boussinesq, c'est-à-dire lorsque les variations de  $\rho$  en fonction de  $c$  sont négligées sauf dans la contribution du terme de pesanteur, les équations de transport (4.56)-(4.58) du modèle quasi-incompressible deviennent :

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (4.67)$$

$$\frac{dc}{dt} = \nabla \cdot (\kappa \nabla \rho \tilde{\mu}) \quad (4.68)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \mathcal{P} + \nabla \cdot \left( \lambda (\nabla c)^2 \mathbf{I} - \lambda \nabla c \otimes \nabla c \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \tilde{\rho}(c) \mathbf{g} \quad (4.69)$$

avec :

$$\boldsymbol{\tau} = \eta (\nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^t) \quad (4.70)$$

où dans (4.69)  $\tilde{\rho}$  désigne la déviation par rapport à la densité moyenne du mélange  $\rho$  (*i.e.*  $\mathcal{P}$  contient la contribution hydrostatique). Ainsi, dans le cadre d'une approximation de Boussinesq, l'équation de conservation de la masse se réduit à la condition d'isovolume classique (4.67). Dans l'équation de Cahn-Hilliard (4.68), la mobilité  $\kappa$  a été redéfinie telle que  $\kappa = \varsigma^{-1} c^2 (1-c)^2$  et le potentiel chimique généralisé  $\rho \tilde{\mu}$  est donné par :

$$\rho \tilde{\mu} = \rho \mu^o - \lambda \nabla^2 c = F^{ol}(c) - \lambda \nabla^2 c \quad (4.71)$$

où l'énergie libre volumique classique caractérise l'immiscibilité partielle (interface diffuse) des deux constituants et dépend uniquement de la composition du mélange. Nous adopterons dans ce travail la forme (4.65) pour l'énergie libre volumique.

Le système (4.67)-(4.71) correspond au modèle Boussinesq de type Cahn-Hilliard présenté par Jacqmin et la forme (4.69) correspond à la forme conservative des équations du mouvement. Dans le cas Boussinesq, les formes potentielles peuvent s'écrire sous la forme :

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \rho \tilde{\mu}_1 - c \nabla \rho \tilde{\mu} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \tilde{\rho}(c) \mathbf{g} \quad (4.72)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \rho g + \rho \tilde{\mu} \nabla c + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \tilde{\rho}(c) \mathbf{g} \quad (4.73)$$

avec :

$$\rho \tilde{\mu}_1 = \mathcal{P} + F^o - c \rho \tilde{\mu} - \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \quad (4.74)$$

$$\rho g = \rho \tilde{\mu}_1 + c \rho \tilde{\mu} \quad (4.75)$$

La forme potentielle (4.72) correspond également à la forme potentielle présentée par Jacqmin et nous retrouvons également la relation entre la pression  $\mathcal{P}$  dite vraie et la pression  $\rho \tilde{\mu}_1$  *soutenant* la condition d'isovolume (4.67). Dans un contexte incompressible et dans le cadre d'une approximation de Boussinesq, il est possible de redéfinir la pression et les formes (4.69), (4.74) et (4.75) illustrent que pour une pression dynamique donnée,  $\mathcal{P}$ ,  $\rho \tilde{\mu}_1$  ou  $\rho g$ , la contribution capillaire s'écrit sous une forme conservative, potentielle en  $c \nabla \rho \tilde{\mu}$  ou potentielle en  $\rho \tilde{\mu} \nabla c$ .

Enfin, dans le cas Boussinesq, les conditions d'équilibre (4.26) et (4.27) peuvent s'écrire sous la forme :

$$\rho \tilde{\mu} = \rho \mu^o - \lambda \nabla^2 c = \rho \tilde{\mu}_{eq} \quad (4.76)$$

$$\rho \tilde{\mu}_1 = \rho \mu_1^o + \lambda c \nabla^2 c = \rho \tilde{\mu}_{1eq} \quad (4.77)$$

En reprenant la terminologie de Jacqmin, nous appellerons désormais  $\rho g$ ,  $\rho \tilde{\mu}$  et  $\rho \tilde{\mu}_1$  les potentiels chimiques généralisés ou pseudo-pressions ou encore pressions.

### 4.3.3 Interfaces planes en équilibre

On détermine dans ce paragraphe le profil du paramètre d'ordre dans la couche capillaire pour une interface plane séparant les deux phases  $\alpha$  et  $\beta$  d'un mélange isotherme à l'équilibre mécanique. L'étude des interfaces planes en équilibre est une étude classique en théorie du second gradient, elle permet non seulement de déterminer le profil du paramètre d'ordre mais également les propriétés intrinsèques que sont l'épaisseur de l'interface et la tension de surface. Nous reprenons ici principalement les développements présentés par Jamet [81] dans le cas fluide pur et ceux de Jacqmin [79] dans le cas fluide binaire.

#### Profil du paramètre d'ordre

Dans le cas isotherme, l'énergie libre volumique du mélange s'écrit sous la forme :

$$F(\rho, c, \nabla c) = F^o(\rho, c) + \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \quad (4.78)$$

La donnée de la partie classique de l'énergie libre constitue la fermeture thermodynamique du modèle. Dans le cas incompressible et dans le cadre d'une approximation de Boussinesq, l'énergie libre classique ne dépend pas de la densité du mélange et on peut écrire la forme générale :

$$F^o(\rho, c) = \beta \Psi(c) \quad (4.79)$$

La donnée du coefficient  $\beta$  et de la fonction  $\Psi$  constitue alors la fermeture thermodynamique. A partir de (4.79) et de l'expression (4.65) de l'énergie libre classique du mélange au voisinage du point critique, on a :

$$F^o(c) = \beta (c - c_\alpha)^2 (c - c_\beta)^2 \quad (4.80)$$

Pour une interface plane à l'équilibre, la seule variable d'espace à considérer est la coordonnée d'espace  $x$  normale à l'interface notée et on peut écrire à partir de la condition d'équilibre (4.76) :

$$\rho \tilde{\mu} = \beta \frac{d\Psi}{dc} - \lambda \frac{d^2c}{dx^2} = \rho \tilde{\mu}_{eq} \quad (4.81)$$

où on rappelle que  $\rho \tilde{\mu}_{eq}$  est la valeur à l'équilibre de  $\rho \tilde{\mu}$  qui ici, pour la forme (4.80), correspond à  $\rho \tilde{\mu}_{eq} = 0$ . On obtient ainsi en multipliant par  $dc/dx$  les deux membres de l'égalité précédente :

$$\lambda \frac{d^2c}{dx^2} \frac{dc}{dx} = \beta \frac{d\Psi}{dx} \quad (4.82)$$

A partir d'une intégration par parties du premier membre, on a :

$$\int_{x_\alpha}^{x_\beta} \lambda \frac{d^2c}{dx^2} \frac{dc}{dx} dx = \frac{\lambda}{2} \left[ \left( \frac{dc}{dx} \right)^2 \right]_{x_\alpha}^{x_\beta} \quad (4.83)$$

Soit, si on suppose que le paramètre d'ordre ne subit pas de variations dans les phases :

$$\int_{x_\alpha}^{x_\beta} \lambda \frac{d^2c}{dx^2} \frac{dc}{dx} dx = 0 \quad (4.84)$$

On en déduit ainsi la contrainte que doit vérifier la fonction  $\Psi$  :

$$\Psi(c_\alpha) = \Psi(c_\beta) \quad (4.85)$$

Cette contrainte est automatiquement vérifiée par la forme (4.80).

Afin de déterminer le profil du paramètre d'ordre, la démarche précédente est reprise en intégrant cette fois de  $x_\alpha$  à  $x$ . L'intégration conduit à la relation :

$$\int_{x_\alpha}^x \lambda \frac{d^2c}{dx^2} \frac{dc}{dx} dx = \frac{\lambda}{2} \left( \frac{dc}{dx} \right)^2 \quad (4.86)$$

Soit, à partir de (4.82)

$$\frac{\lambda}{2} \left( \frac{dc}{dx} \right)^2 = \beta \Psi(c) - \beta \Psi(c_\alpha) = \beta \Psi(c) \quad (4.87)$$

c'est-à-dire :

$$\frac{dc}{\sqrt{\Psi(c)}} = \sqrt{\frac{2\beta}{\lambda}} dx \quad (4.88)$$

A partir de la forme particulière de la fonction  $\Psi$ , on obtient en intégrant les deux membres de l'équation précédente le profil analytique du paramètre d'ordre

$$c(x) = \frac{c_\beta + c_\alpha}{2} + \frac{c_\beta - c_\alpha}{2} \tanh \left( \frac{c_\beta - c_\alpha}{2} \sqrt{\frac{2\beta}{\lambda}} x \right) \quad (4.89)$$

A ce stade, on introduit les nombres sans dimension  $\beta^*$  et  $\lambda^*$  définis par [80] :

$$\beta = \frac{\sigma \beta^*}{\epsilon}, \quad \lambda = \epsilon \sigma \lambda^* \quad (4.90)$$

où, nous allons le voir,  $\epsilon$  représente l'épaisseur de l'interface. A partir des relations donnant  $\beta$  et  $\lambda$  en fonction des grandeurs sans dimensions  $\beta^*$  et  $\lambda^*$ , le profil du paramètre d'ordre s'écrit sous la forme équivalente :

$$c(x) = \frac{c_\beta + c_\alpha}{2} + \frac{c_\beta - c_\alpha}{2} \tanh \left( \frac{c_\beta - c_\alpha}{2} \sqrt{\frac{2\beta^*}{\lambda^*}} \frac{x}{\epsilon} \right) \quad (4.91)$$

### Epaisseur de l'interface et tension de surface

La donnée du profil, ou de manière équivalente la donnée de l'énergie libre, conduit à deux propriétés intrinsèques du modèle : l'épaisseur de l'interface et sa tension de surface. Dans le cadre d'un traitement classique des interfaces (*i.e.* épaisseur nulle), nous avons vu que la tension de surface correspondait à un excès d'énergie concentré à l'interface, c'est-à-dire ici :

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda (\nabla c)^2 dx = \int_{c_\alpha}^{c_\beta} \lambda \left( \frac{dc}{dx} \right) dc = \lambda \sqrt{\frac{2\beta}{\lambda}} \int_{c_\alpha}^{c_\beta} \sqrt{\Psi(c)} dc = (c_\beta - c_\alpha)^3 \sqrt{\frac{\beta \lambda}{18}} \quad (4.92)$$

En suivant la démarche proposée par Jacqmin [80], on introduit les nombres adimensionnés  $\lambda^*$  et  $\beta^*$  dans la relation précédente afin d'obtenir une relation simple entre  $\lambda^*$  et  $\beta^*$  :

$$(c_\beta - c_\alpha)^3 \sqrt{\frac{\lambda^* \beta^*}{18}} = 1 \quad (4.93)$$

D'autre part, à partir du profil du paramètre d'ordre, on peut définir l'épaisseur  $\epsilon$  de l'interface à partir de l'approximation :

$$\epsilon = \frac{c_\beta - c_\alpha}{\max(c'(x))} \quad (4.94)$$

Le maximum de la dérivée du paramètre d'ordre dans la couche capillaire étant donné par :

$$\max(c'(x)) = \sqrt{\frac{2\beta}{\lambda}} \max_{c_\alpha \leq c \leq c_\beta} (\sqrt{\Psi(c)}) = \frac{(c_\beta - c_\alpha)^2}{4} \sqrt{\frac{2\beta}{\lambda}} \quad (4.95)$$

Soit :

$$\epsilon = \frac{1}{c_\beta - c_\alpha} \sqrt{\frac{8\lambda}{\beta}} \quad (4.96)$$

En introduisant les nombres  $\beta^*$  et  $\lambda^*$  dans la relation précédente, on obtient une deuxième relation entre  $\beta^*$  et  $\lambda^*$  :

$$\frac{1}{c_\beta - c_\alpha} \sqrt{\frac{8\lambda^*}{\beta^*}} = 1 \quad (4.97)$$

Les relations (4.93) et (4.97) permettent ainsi de déterminer complètement le couple  $(\lambda^*, \beta^*)$  pour  $c_\alpha$  et  $c_\beta$  données :

$$\lambda^* = \frac{3}{2(c_\beta - c_\alpha)^2}, \quad \beta^* = \frac{12}{(c_\beta - c_\alpha)^4} \quad (4.98)$$

## 4.4 Résolution numérique du modèle Boussinesq

Dans cette partie, nous présentons la résolution numérique du modèle Boussinesq décrit précédemment. Nous commençons dans un premier temps par décrire le schéma en temps du système d'équations couplées du modèle puis, dans un deuxième temps, nous présentons la discrétisation spatiale qui, rappelons-le, pour les problèmes considérés dans ce travail, doit permettre de traiter des géométries complexes (*e.g.* présence d'obstacles).

Le schéma en temps s'inspire des schémas utilisés pour les méthodes de type Level Set et du schéma proposé par Boyer [27] et consiste à résoudre le système à partir d'une méthode à pas fractionnaires. La première étape consiste à résoudre l'équation d'évolution du paramètre d'ordre, c'est-à-dire l'équation de Cahn-Hilliard, et la deuxième à résoudre le problème vitesse-pression des équations du mouvement. Nous verrons que pour ces deux étapes, les potentiels chimiques généralisés jouent un rôle essentiel.

Comme nous l'avons signalé, la discrétisation spatiale ne doit pas être limitée à des domaines rectangulaires et doit permettre d'effectuer des simulations numériques pour des géométries assez complexes. Dans ce contexte, on peut envisager trois types de méthodes : une méthode volumes finis en maillage structuré et à mailles décalées, une méthode de type volumes finis en maillage non structuré et enfin une méthode éléments finis. Dans la première méthode, il est possible de prendre en compte la présence d'obstacles dans le domaine de calcul à partir d'une méthode de pénalisation (*i.e.* domaine fictif), le lecteur intéressé pourra se reporter à Angot *et al.* [7] pour une présentation de la méthode de pénalisation et à Boyer [26] pour une application de la méthode dans le cadre d'un modèle de type Cahn-Hilliard. Si cette approche bénéficie des avantages du maillage structuré de type MAC (simplicité, robustesse, ...), elle nécessite cependant une discrétisation spécifique sur les bords du domaine fictif [26] et il semblerait qu'elle pose certaines difficultés pour les conditions d'angle de contact. Ce type de méthode n'apparaît donc pas pleinement satisfaisant et nous nous sommes dirigés vers des méthodes permettant d'utiliser un maillage non structuré. Dans ce travail, le schéma de discrétisation spatiale s'inscrit dans le cadre d'une méthode éléments finis. À notre connaissance, le schéma proposé constitue une contribution originale pour la résolution complète (*i.e.* transport du paramètre d'ordre et hydrodynamique) des modèles de type Cahn-Hilliard.

### 4.4.1 Discrétisation temporelle

La résolution numérique en temps du modèle Boussinesq s'appuie sur une méthode à pas fractionnaires en deux temps. Au cours d'un pas de temps  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ , la première étape consiste

à résoudre l'équation de transport du paramètre d'ordre pour un champ de vitesse connu à l'instant  $t_n$ . La deuxième étape consiste ensuite à résoudre les équations du mouvement où les termes capillaires sont connus par la première étape. Ainsi, le principe du découpage en temps revient à traiter explicitement la vitesse dans l'équation de Cahn-Hilliard et à expliciter les termes de couplage capillaire dans les équations du mouvement. Nous présentons dans les deux paragraphes suivants les détails de la discrétisation temporelle.

### Equation de Cahn-Hilliard

La première étape de l'algorithme en temps consiste à résoudre l'équation d'évolution de la fraction massique. Pour  $c^n$  et  $\mathbf{v}^n$  connus à l'instant  $t_n$ , l'équation de Cahn-Hilliard est discrétisée en temps de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{c^{n+1} - c^n}{\Delta t} + \mathbf{v}^n \cdot \nabla c^{n+1} = \nabla \cdot (\kappa \nabla \rho \tilde{\mu}^{n+1}) \\ \rho \tilde{\mu}^{n+1} = \rho \mu^o(c^{n+1}) - \lambda \nabla^2 c^{n+1} \\ \text{BC : } \mathbf{n} \cdot \nabla \rho \tilde{\mu}^{n+1} = 0 \quad , \quad \mathbf{n} \cdot \lambda \nabla c^{n+1} = -F_s'(c^{n+1}) \end{array} \right. \quad (4.99)$$

Le terme instationnaire est ainsi discrétisé à partir d'un schéma d'Euler implicite d'ordre 1, le terme convectif est semi-implicite dans le sens où la vitesse est explicite et la fraction massique est implicite et enfin le flux diffusif est implicite.

Sous cette forme, le calcul des dérivées en espace d'ordre élevé dans le terme de diffusion est évité et la résolution de l'équation de Cahn-Hilliard à une inconnue  $c^{n+1}$  est remplacée par la résolution du système (4.99) à deux équations et deux inconnues  $c^{n+1}$  et  $\rho \tilde{\mu}^{n+1}$ . Dans ce travail, nous considérons des conditions aux limites de Neumann pour le potentiel chimique généralisé et la fraction massique. La première est une condition de flux de diffusion nul au travers des parois (système fermé) et la deuxième caractérise l'angle de contact de la couche capillaire à la paroi.

### Equations du mouvement : méthode de projection

La deuxième étape de l'algorithme en temps consiste à résoudre les équations de quantité de mouvement du mélange sous la contrainte d'incompressibilité. Dans ce travail, le problème vitesse-pression est résolu à partir d'une méthode de projection qui, rappelons-le, s'inscrit dans le cadre d'une approche par éléments finis.

Les méthodes de projection, ou méthodes de correction de pression, pour résoudre les équations du mouvement sont des méthodes de marche en temps à pas fractionnaires qui consistent à découpler le calcul de la vitesse et de la pression. Ces méthodes, initialement proposées par Chorin [43] pour les écoulements incompressibles sans variation de densité, sont largement utilisées dans le cadre de la simulation numérique directe des écoulements diphasiques dans un contexte incompressible, *e.g.* méthode Level Set [139] ou Front-Tracking [87], et ont été étendues aux écoulements faiblement compressibles, *e.g.* dans [46] pour les modèles de type faible nombre de Mach.

On se propose dans un premier temps d'exposer brièvement la méthode de projection dite non-incrémentale pour résoudre la forme conservative (4.69) avec pression mécanique  $\mathcal{P}$  des équations du mouvement.

Nous adoptons pour les équations du mouvement un schéma d'Euler implicite d'ordre 1 pour le terme instationnaire, un schéma semi-implicite pour le terme convectif, explicite pour les termes de couplage capillaire et de gravité (*i.e.* solutions de la première étape), et implicite pour le

terme diffusif. Ainsi, la deuxième étape consiste, pour  $c^{n+1}$  et  $\mathbf{v}^n$  connus, à calculer  $\mathbf{v}^{n+1}$  et  $\mathcal{P}^{n+1}$  solutions de :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} + \rho \mathbf{v}^n \cdot \nabla \mathbf{v}^{n+1} = -\nabla \mathcal{P}^{n+1} + \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^{n+1} + \tilde{\rho}^{n+1} \mathbf{g} \\ \nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \\ \text{BC1 : } \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2 : } \mathbf{t} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0, \quad \mathcal{P}^{n+1} = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{t} \cdot \mathbf{v}^{n+1}) = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mathcal{P}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.100)$$

Dans ce travail, nous considérons des conditions aux limites de Dirichlet BC1 (entraînement ou non glissement), de sortie BC2 et de symétrie BC3.

Le principe de la méthode de projection dite non-incrémentale pour résoudre (4.100) consiste à découpler les effets d'advection-diffusion de la contrainte d'incompressibilité : pour chaque pas de temps  $\Delta t$ , le problème (4.100) est décomposé et est résolu en deux sous-étapes de la manière suivante :

(i) **Etape d'advection-diffusion du champ de vitesse**

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\hat{\mathbf{v}}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} + \rho \mathbf{v}^n \cdot \nabla \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}^{n+1} + \tilde{\rho}^{n+1} \mathbf{g} \\ \text{BC1 : } \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2 : } \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1}) = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.101)$$

(ii) **Etape de projection**

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \hat{\mathbf{v}}^{n+1}}{\Delta t} + \nabla \mathcal{P}^{n+1} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \\ \text{BC1 : } \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2 : } \mathbf{t} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0, \quad \mathcal{P}^{n+1} = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mathcal{P}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.102)$$

On peut vérifier qu'en sommant (4.101) et (4.102), on retrouve bien le problème de départ (4.100). L'étape (4.101) correspond à l'étape de transport-diffusion de la vitesse qui conduit à une vitesse estimée  $\hat{\mathbf{v}}$  tandis que le problème de type Darcy (4.102) correspond à l'étape de projection de la vitesse estimée sur le sous-espace des vitesses à divergence nulle. Cette dernière étape permet de déterminer le couple  $\mathbf{v}^{n+1}$ ,  $\mathcal{P}^{n+1}$  sous la contrainte  $\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0$ .

La version incrémentale améliore la précision en temps de l'algorithme (4.101)-(4.102) et consiste à prédire dans l'étape d'advection-diffusion une meilleure estimation de la vitesse intermédiaire  $\hat{\mathbf{v}}^{n+1}$  en recouvrant la consistance avec l'équation de départ avec un gradient de pression estimé à l'instant  $t_n$ . Dans le cas de la version incrémentale, les deux sous-pas (i) et (ii) deviennent :

(i) **Etape d'advection-diffusion du champ de vitesse**

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\hat{\mathbf{v}}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} + \rho \mathbf{v}^n \cdot \nabla \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = -\nabla \mathcal{P}^n + \nabla \cdot \mathbf{T}^{n+1} + \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}^{n+1} + \tilde{\rho}^{n+1} \mathbf{g} \\ \text{BC1 : } \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2 : } \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = 0, \quad \mathcal{P}^n = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1}) = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.103)$$

**(ii) Etape de projection**

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \hat{\mathbf{v}}^{n+1}}{\Delta t} + \nabla (\mathcal{P}^{n+1} - \mathcal{P}^n) = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \\ \text{BC1 : } \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2 : } \mathbf{t} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0, \quad \mathcal{P}^{n+1} = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mathcal{P}^n = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mathcal{P}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.104)$$

Ici encore, on peut vérifier qu'en sommant (4.103) et (4.104), on retrouve bien le problème de départ (4.100).

Une solution possible pour résoudre l'étape (ii) consiste à déterminer  $\mathcal{P}^{n+1}$  solution d'un problème de Poisson en prenant la divergence de la première équation du problème de Darcy sous la contrainte  $\nabla \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0$ . Une fois  $\mathcal{P}^{n+1}$  connue, la vitesse estimée  $\hat{\mathbf{v}}^{n+1}$  est ensuite projetée à partir de la première équation du problème de Darcy. L'étape de projection se décompose ainsi en deux sous-étapes que nous notons (ii-a) et (ii-b). Dans le cas de la version incrémentale, ces deux sous-étapes sont :

Pour  $\mathcal{P}^n$  et  $\hat{\mathbf{v}}^{n+1}$  connus, résoudre une équation de Poisson pour la pression complétée par une condition de Neumann homogène pour la correction de pression :

**(ii-a) Problème de Poisson pour la pression**

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \mathcal{P}^{n+1} = \nabla^2 \mathcal{P}^n + \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} \\ \text{BC : } \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathcal{P}^{n+1} - \mathcal{P}^n) = 0 \\ \text{BC2 : } \mathcal{P}^{n+1} = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \nabla \mathcal{P}^n = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \mathcal{P}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.105)$$

Une fois que  $\mathcal{P}^{n+1}$  est connue, la vitesse  $\mathbf{v}^{n+1}$  est donnée explicitement par le problème :

**(ii-b) Correction du champ de vitesse estimé**

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \hat{\mathbf{v}}^{n+1}}{\Delta t} = -\nabla (\mathcal{P}^{n+1} - \mathcal{P}^n) \\ \text{BC1 : } \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2 : } \mathbf{t} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.106)$$

D'autres solutions sont possibles pour résoudre l'étape de projection. On peut par exemple reprendre la démarche précédente conduisant aux deux-sous étapes (ii-a) et (ii-b) dans un cadre discret. Dans ce cas, il n'est pas nécessaire d'introduire la condition aux limites supplémentaire de Neumann homogène pour la correction de pression, souvent appelée condition aux limites *non physique* dans le sens où elle n'apparaît pas dans le problème mixte vitesse-pression initial. En revanche, le coût de la résolution de l'équation de Poisson est généralement beaucoup plus élevé puisque, dans le cadre discret, l'opérateur laplacien est un produit de matrices et met en jeu l'inverse de la matrice masse associée au champ de vitesse. Une autre possibilité consiste à résoudre directement le problème mixte de Darcy (4.104) à partir, par exemple, d'un algorithme d'Uzawa. Le lecteur intéressé pourra se reporter à Guermond [70] pour une présentation et une discussion détaillée de ces *trois types d'approximations* dans un contexte éléments finis.

A ce stade, nous avons présenté une méthode de projection incrémentale pour la forme conservative des équations du mouvement avec pression mécanique  $\mathcal{P}$ . Nous avons vu qu'il existait

d'autres formes équivalentes des équations du mouvement : la forme potentielle en enthalpie libre  $\rho g$  et la forme potentielle en potentiel chimique généralisé  $\rho\tilde{\mu}_1$ . Pour ces deux dernières formes,  $\rho g$  et  $\rho\tilde{\mu}_1$  jouent également le rôle d'une pression et on peut reprendre la méthode de projection décrite précédemment en utilisant  $\rho g$  ou  $\rho\tilde{\mu}_1$  au lieu de  $\mathcal{P}$ . Pour s'en convaincre, il faut revenir au concept de la méthode de projection qui se base sur la décomposition de Hodge séparant un champ de vecteur arbitraire en deux composantes orthogonales : l'une à divergence nulle et l'autre s'écrivant comme le gradient d'un champ scalaire. Le lecteur intéressé par une présentation détaillée du concept de projection pourra se reporter à Coré [45]. Nous reprenons ici quelques uns de ces développements à titre pédagogique et aussi afin d'illustrer le rôle de  $\rho g$  et  $\rho\tilde{\mu}_1$  pour le modèle Boussinesq.

Pour un champ de vecteur  $\mathbf{w}$ , la décomposition de Hodge s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{w} = \mathbf{w}_d + \nabla\phi \quad (4.107)$$

où  $\mathbf{w}_d$  et  $\phi$  sont solutions respectivement du problème aux limites (I) et du problème elliptique (II) suivants :

$$(I) \begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{w}_d = 0, & \text{sur } \Omega \\ \mathbf{n} \cdot \mathbf{w}_d = 0, & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (II) \begin{cases} \nabla^2\phi = \nabla \cdot \mathbf{w}, & \text{sur } \Omega \\ \mathbf{n} \cdot \nabla\phi = \mathbf{n} \cdot \mathbf{w}, & \text{sur } \partial\Omega \end{cases}$$

Si  $\mathbf{P}$  est l'opérateur de projection orthogonal qui projette un champ de vecteur  $\mathbf{w}$  sur l'espace des vecteurs à divergence nulle, *i.e.*  $\mathbf{P}(\mathbf{w}) = \mathbf{w}_d$ , la composante gradient de (4.107) est donnée par :  $\nabla\phi = (\mathbf{I} - \mathbf{P})(\mathbf{w})$  et l'opérateur  $\mathbf{P}$  possède les propriétés :  $\mathbf{P}(\nabla\phi) = 0$  et  $\mathbf{P}(\mathbf{w}_d) = \mathbf{w}_d$ .

L'opérateur de projection  $\mathbf{P}$  appliqué à la forme conservative des équations du mouvement permet d'écrire le problème sous la forme d'une seule équation d'évolution pour la vitesse en posant  $\mathbf{w} = -\rho\mathbf{v} \cdot \nabla\mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \tilde{\rho}\mathbf{g}$  et  $\phi = \mathcal{P}$  :

$$\rho \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{P}(-\rho\mathbf{v} \cdot \nabla\mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \tilde{\rho}\mathbf{g}) \quad (4.108)$$

où ici  $\mathcal{P}$  vérifie l'équation :

$$\nabla\mathcal{P} = (\mathbf{I} - \mathbf{P})(-\rho\mathbf{v} \cdot \nabla\mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{T} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \tilde{\rho}\mathbf{g}) \quad (4.109)$$

Ainsi, le problème de Darcy de la méthode de projection correspond bien à une étape de projection puisqu'il est équivalent à :

$$\mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{P}(\hat{\mathbf{v}}^{n+1}) \quad (4.110)$$

avec  $\phi = \mathcal{P}^{n+1}$  pour la version non incrémentale et  $\phi = \mathcal{P}^{n+1} - \mathcal{P}^n$  pour la version incrémentale. On comprend ainsi facilement que l'on peut choisir  $\phi = \rho g$  ou  $\phi = \rho\tilde{\mu}_1$  pour une forme potentielle puisque  $\rho g$  ou  $\rho\tilde{\mu}_1$  interviennent par leur gradient dans les équations du mouvement.

Contrairement à Jacqmin [79] qui utilise la pseudo-pression  $\rho\tilde{\mu}_1$  dans un contexte volumes finis à mailles décalées, nous pensons que dans un contexte différent, ici les éléments finis, la pseudo-pression  $\rho g$  doit être préférée à  $\rho\tilde{\mu}_1$ . Nous en verrons les raisons un peu plus loin. Ainsi, nous travaillons avec  $\rho g$  et l'algorithme de la méthode de projection incrémentale s'écrit finalement :

(i) **Etape d'advection-diffusion du champ de vitesse**

$$\begin{cases} \rho \frac{\hat{\mathbf{v}}^{n+1} - \mathbf{v}^n}{\Delta t} + \rho\mathbf{v}^n \cdot \nabla\hat{\mathbf{v}}^{n+1} = -\nabla\rho g^n + \rho\tilde{\mu}^{n+1}\nabla c^{n+1} + \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}^{n+1} + \tilde{\rho}^{n+1}\mathbf{g} \\ \text{BC1 : } \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2 : } \mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = 0, \quad \rho g^n = 0 \\ \text{BC3 : } \mathbf{n} \cdot \nabla(\mathbf{t} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1}) = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} = 0 \end{cases} \quad (4.111)$$

**(ii-a) Problème de Poisson pour la pression**

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \rho g^{n+1} = \nabla^2 \rho g^n + \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}^{n+1} \\ \text{BC} : \mathbf{n} \cdot \nabla (\rho g^{n+1} - \rho g^n) = 0 \\ \text{BC2} : \rho g^{n+1} = 0 \\ \text{BC3} : \mathbf{n} \cdot \nabla \rho g^n = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \rho g^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.112)$$

**(ii-b) Correction du champ de vitesse estimé**

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\mathbf{v}^{n+1} - \hat{\mathbf{v}}^{n+1}}{\Delta t} = -\nabla (\rho g^{n+1} - \rho g^n) \\ \text{BC1} : \mathbf{v}^{n+1} = \mathbf{v}_D, \quad \text{BC2} : \mathbf{t} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \\ \text{BC3} : \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}^{n+1} = 0 \end{array} \right. \quad (4.113)$$

**4.4.2 Discrétisation spatiale : méthode éléments finis**

Cette partie est consacrée à la discrétisation spatiale des équations de transport du modèle Boussinesq par une méthode éléments finis dans le cadre de l'approximation de Galerkin. Nous présentons dans un premier temps la discrétisation de l'équation de Cahn-Hilliard puis les trois étapes de la méthode de projection incrémentale décrite précédemment.

Nous noterons  $\mathcal{I}_h$  la triangulation du domaine<sup>5</sup>  $\Omega$  et  $K$  les éléments finis de  $\mathcal{I}_h$ . Nous associerons à  $\mathcal{I}_h$  les espaces d'approximation<sup>6</sup>  $\mathcal{S}_h, \mathcal{V}_h(\Omega) \subset H^1(\Omega)$  définis comme les espaces engendrés par les fonctions continues et polynômiales respectivement d'ordre  $k = 1$  et  $k = 2$  par morceaux sur  $\mathcal{I}_h$  :

$$\mathcal{S}_h = \{s_h \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega}) ; \forall K \in \mathcal{I}_h, s_h|_K \in \mathbb{P}_1\} \quad (4.114)$$

$$\mathcal{V}_h = \{v_h \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega}) ; \forall K \in \mathcal{I}_h, v_h|_K \in \mathbb{P}_2\} \quad (4.115)$$

où  $\mathbb{P}_k$  désigne l'élément fini de Lagrange triangulaire d'ordre  $k$ .

Nous utiliserons dans ce travail une approximation  $\mathbb{P}_1$  pour la fraction massique, le potentiel chimique généralisé et la pression et une approximation  $\mathbb{P}_2$  pour la vitesse. Nous noterons  $c_h, \rho\tilde{\mu}_h, \rho g_h$  et  $\mathbf{v}_h$  les approximations de la fraction massique, du potentiel chimique généralisé, de la pression et de la vitesse.

Afin de ne pas alourdir les notations et de ne pas introduire d'espace d'approximation supplémentaire, nous noterons simplement que les fonctions d'essais  $c_h, \rho\tilde{\mu}_h$  et  $\rho g_h$  appartiennent à  $\mathcal{S}_h$  et que  $\mathbf{v}_h$  appartient à  $\mathcal{V}_h$ . Ces fonctions d'essais vérifieront les conditions aux limites des solutions. De la même manière, nous noterons  $\varphi_h$  et  $\psi_h$  les fonctions tests appartenant respectivement aux espaces d'approximations  $\mathcal{S}_h$  et  $\mathcal{V}_h$  et ces fonctions tests vérifieront<sup>7</sup> des conditions de Dirichlet homogènes là où les fonctions d'essais vérifient des conditions de Dirichlet.

Enfin, signalons que nous ne rentrerons pas dans les détails de l'établissement des systèmes algébriques et des intégrations numériques, cela serait inutile dans le sens où nous utilisons des approximations classiques et cela alourdirait inutilement la lecture de cette partie.

<sup>5</sup>Pour simplifier, le domaine  $\Omega$  est supposé être de forme polyédrique

<sup>6</sup> $H^1(\Omega)$  est l'espace de Hilbert : espace des fonctions  $w$  appartenant à  $L^2(\Omega)$ , *i.e.* l'espace des fonctions à carré intégrable sur  $\Omega$ , et possédant des dérivées premières  $w^{(1)}$  au sens des distributions appartenant également à  $L^2(\Omega)$ ,  $H^1(\Omega) = \{w \in L^2(\Omega), w^{(1)} \in L^2(\Omega)\}$

<sup>7</sup>selon l'équation testée, *i.e.* l'équation de la fonction d'essai

### Equation de Cahn-Hilliard

Dans le cadre d'une approximation de Galerkin, les formulations faibles associées à la première étape s'écrivent après deux intégrations par parties : pour  $n \geq 0$ , trouver  $c_h^{n+1} \in \mathcal{S}_h$  et  $\rho\tilde{\mu}_h^{n+1} \in \mathcal{S}_h$  tel que  $\forall \varphi_h \in \mathcal{S}_h$  :

$$\int_{\Omega} \varphi_h \left( \frac{c_h^{n+1} - c_h^n}{\Delta t} + \mathbf{v}_h^n \cdot \nabla c_h^{n+1} \right) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \varphi_h \cdot \kappa \nabla \rho\tilde{\mu}_h^{n+1} d\Omega = 0 \quad (4.116)$$

$$\int_{\Omega} \varphi_h (\rho\tilde{\mu}_h^{n+1} - \rho\mu^o(c_h^{n+1})) d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \varphi_h \cdot \lambda \nabla c_h^{n+1} d\Omega - \oint_{\partial\Omega} \varphi_h F_s'(c_h^{n+1}) d\sigma = 0 \quad (4.117)$$

Notons ici que la formulation faible (4.116) contient implicitement la condition aux limites  $\mathbf{n} \cdot \nabla \rho\tilde{\mu}_h = 0$  et (4.117) fait apparaître naturellement la condition d'angle de contact de la couche capillaire à la paroi.

En développant  $c_h$  et  $\rho\tilde{\mu}_h$  à partir des fonctions de base  $\varphi_h \mathbb{P}_1$  :

$$c_h(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}) c_j^{n+1}, \quad \rho\tilde{\mu}_h(\mathbf{x}, t_{n+1}) = \sum_j \varphi_j(\mathbf{x}) \rho\tilde{\mu}_j^{n+1} \quad (4.118)$$

où  $c_j$  et  $\rho\tilde{\mu}_j$  sont les valeurs nodales de  $c_h$  et  $\rho\tilde{\mu}_h$ , les formulations faibles précédentes conduisent à un système non linéaire. Ce système est alors linéarisé à partir d'une méthode de Newton avec une jacobienne exacte. Le système linéaire est ensuite résolu avec une méthode GMRES avec un préconditionnement SSOR. En pratique 1 à 5 itérations sont nécessaires pour atteindre une convergence en  $10^{-6}$  sur les incréments  $\Delta c_j$  et  $\Delta \rho\tilde{\mu}_j$ .

Contrairement à Boyer [27] qui utilise un schéma décentré TVD pour la partie transport de l'équation de Cahn-Hilliard, nous n'avons pas jugé utile d'introduire une stabilisation et nous avons conservé, comme Jacqmin [79], une discrétisation centrée du terme convectif. Pour les calculs présentés plus loin, nous n'avons pas observé de différences significatives lorsqu'une technique de stabilisation était utilisée.

### Equations du mouvement - Méthode de projection

Dans le cadre de l'approximation de Galerkin, la méthode des éléments finis pose deux difficultés pour résoudre le problème vitesse-pression. La première difficulté provient de la formulation mixte associée au problème de Stokes limitant le choix des espaces d'approximation pour la vitesse et la pression en raison de la condition de Basbuska-Brezzi ou condition "inf-sup". En effet, la méthode de projection ne permet généralement pas de s'affranchir de cette condition. La deuxième difficulté provient de l'opérateur de transport qui, dans le cadre de l'approximation de Galerkin, conduit à un schéma centré inconditionnellement instable dans les zones où la solution n'est pas suffisamment régulière. Signalons que ce dernier problème était évidemment également présent pour l'équation de Cahn-Hilliard mais le terme d'anti-diffusion est suffisant pour stabiliser le paramètre d'ordre dans la couche capillaire.

Ces difficultés sont bien connues, la première peut être levée en choisissant l'espace d'approximation  $\mathbb{P}_2\text{-}\mathbb{P}_1$  pour le couple vitesse-pression et nous nous plaçons dans ce cadre.

En ce qui concerne la deuxième difficulté, plusieurs techniques ont été proposées pour réaliser une stabilisation de l'opérateur de transport. On peut citer entre autre la méthode des caractéristiques, les méthodes mixtes éléments/volumes finis avec schémas décentrés comme Galerkin discontinu et enfin les méthodes éléments finis stabilisées comme GLS (Galerkin-Least-Squares) et SUPG (Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin). Les méthodes GLS permettent d'une part de pouvoir utiliser des espaces d'approximation qui ne satisfont pas la condition inf-sup, et qui

d'autre part assurent une stabilisation suffisante à l'approximation de Galerkin pour l'opérateur de transport sans compromettre la consistance. D'un autre côté, les méthodes SUPG ne permettent généralement pas de résoudre les problèmes associés à la condition inf-sup, en revanche elles conduisent à une stabilisation consistante de l'opérateur de transport et sont bien adaptées dans le cas où le problème du couplage vitesse-pression est traité à partir d'une méthode à pas fractionnaires telle que la méthode de projection.

On présente ici les formulations faibles associées aux trois étapes (4.111), (4.112) et (4.113) de la méthode de projection incrémentale. Dans un premier temps, l'étape (i) d'advection-diffusion est décrite dans le cadre de l'approximation de Galerkin puis, on décrit à partir de cette approximation la formulation SUPG conduisant à une stabilisation de la partie transport.

### Etape (i) - Advection-diffusion

La formulation faible associée à l'étape (4.111) s'écrit : pour  $n \geq 0$ , trouver  $\hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h$  tel que  $\forall \boldsymbol{\psi}_h \in \mathcal{V}_h$  avec  $\boldsymbol{\psi}_h|_{\partial\Omega} = 0$  là où les fonctions d'essais  $\hat{\mathbf{v}}_h$  vérifient des conditions de Dirichlet :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi}_h \cdot \left( \rho \frac{\hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} - \mathbf{v}_h^n}{\Delta t} + \rho \mathbf{v}_h^n \cdot \nabla \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} - \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_h^{n+1} \right) d\Omega \\ &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi}_h \cdot \left( -\nabla \rho g_h^n + \rho \tilde{\mu}_h^{n+1} \nabla c_h^{n+1} + \tilde{\rho} (c_h)^{n+1} \mathbf{g} \right) d\Omega \end{aligned} \quad (4.119)$$

où on a noté :

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_h^{n+1} = \eta \left( \nabla \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} + \nabla \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1t} \right) \quad (4.120)$$

A partir d'une intégration par parties et du théorème de Green, (4.119) devient :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi}_h \cdot \left( \rho \frac{\hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} - \mathbf{v}_h^n}{\Delta t} + \rho \mathbf{v}_h^n \cdot \nabla \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} \right) d\Omega - \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\psi}_h \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_h^{n+1} \cdot \mathbf{n} d\sigma \\ &+ \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\tau}}_h^{n+1} : \nabla \boldsymbol{\psi}_h d\Omega = \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi}_h \cdot \left( -\nabla \rho g_h^n + \rho \tilde{\mu}_h^{n+1} \nabla c_h^{n+1} + \tilde{\rho} (c_h)^{n+1} \mathbf{g} \right) d\Omega \end{aligned} \quad (4.121)$$

Examinons le dernier terme du premier membre de (4.121) en 2D. En notant  $\mathbf{v}_h = (u_h, v_h)^t$ , et  $\boldsymbol{\psi}_h = (\psi_{uh}, \psi_{vh})^t$  pour les fonctions tests  $\mathbb{P}_2$ , le produit doublement contracté de (4.121) s'écrit à partir de (4.120) :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_h : \nabla \boldsymbol{\psi}_h &= \eta \begin{bmatrix} 2\frac{\partial u_h}{\partial x} & \frac{\partial u_h}{\partial y} + \frac{\partial v_h}{\partial x} \\ \frac{\partial u_h}{\partial y} + \frac{\partial v_h}{\partial x} & 2\frac{\partial v_h}{\partial y} \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} \frac{\partial \psi_{uh}}{\partial x} & \frac{\partial \psi_{vh}}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi_{uh}}{\partial y} & \frac{\partial \psi_{vh}}{\partial y} \end{bmatrix} \\ &= \eta \left( 2\frac{\partial u_h}{\partial x} \frac{\partial \psi_{uh}}{\partial x} + \left( \frac{\partial u_h}{\partial y} + \frac{\partial v_h}{\partial x} \right) \left( \frac{\partial \psi_{uh}}{\partial y} + \frac{\partial \psi_{vh}}{\partial x} \right) + 2\frac{\partial v_h}{\partial y} \frac{\partial \psi_{vh}}{\partial y} \right) \end{aligned} \quad (4.122)$$

Pour stabiliser la partie transport de (4.119), on se place dans le cadre de la formulation SUPG. Par rapport à la méthode de Galerkin classique, la méthode stabilisée SUPG consiste dans son principe à choisir des espaces d'approximation des fonctions tests et des fonctions d'essais *différents* : les fonctions d'essais sont les fonctions d'essais de l'approximation de Galerkin tandis que les fonctions tests notées  $\tilde{\boldsymbol{\psi}}_h$  peuvent être vues comme les fonctions tests perturbées de l'approximation de Galerkin classique, c'est-à-dire :

$$\tilde{\boldsymbol{\psi}}_h = \boldsymbol{\psi}_h + \tau_K \mathbf{v}_h \cdot \nabla \boldsymbol{\psi}_h \quad (4.123)$$

où  $\tau_K$  est le paramètre de stabilisation défini localement sur un élément  $K$  de la triangulation  $\mathcal{I}_h$  par :

$$\tau_K = \frac{h_K}{2 \|\mathbf{v}_K\|} \zeta(\text{Re}_K), \quad \text{Re}_K = \frac{\rho_K \|\mathbf{v}_K\| h_K}{\eta_K} \quad (4.124)$$

où les grandeurs indicées par  $K$  font référence à des grandeurs moyennes sur l'élément  $K$  et où  $h_K$  est une longueur caractéristique de l'élément généralement assimilée au diamètre du cercle équivalent pour des éléments triangulaires. Plusieurs choix sont possibles pour la fonction  $\zeta$ , elles sont reportées dans [76, 107]. Quelques unes de ces formes sont regroupées dans le tableau (4.1).

---

optimal	$\zeta(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}$
doubly asymptotic	$\zeta(x) = \max\left(0, \min\left(\frac{x}{3}, 1\right)\right)$
critical	$\zeta(x) = \max\left(0, \left(1 - \frac{1}{x}\right)\right)$
Mizukami	$\zeta(x) = \frac{x}{x+1}$

---

Tableau 4.1: Fonction  $\zeta$  pour la formulation SUPG

Dans le cadre de la formulation SUPG, la formulation faible (4.121) devient : trouver  $\hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h$  tel que  $\forall \psi_h \in \mathcal{V}_h$  :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \psi_h \cdot \left( \rho \frac{\hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} - \mathbf{v}_h^n}{\Delta t} + \rho \mathbf{v}_h^n \cdot \nabla \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} \right) d\Omega - \oint_{\partial\Omega} \psi_h \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_h^{n+1} \cdot \mathbf{n} d\sigma + \int_{\Omega} \hat{\boldsymbol{\tau}}_h^{n+1} : \nabla \psi_h d\Omega \\ & + \sum_K \int_K (\tau_K \mathbf{v}_h^n \cdot \nabla \psi_h) \cdot \left( \rho \frac{\hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} - \mathbf{v}_h^n}{\Delta t} + \rho \mathbf{v}_h^n \cdot \nabla \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} - \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\tau}}_h^{n+1} \right) dK \\ & = \int_{\Omega} \psi_h \cdot \left( -\nabla \rho g_h^n + \rho \tilde{\mu}_h^{n+1} \nabla c_h^{n+1} + \tilde{\rho}(c_h)^{n+1} \mathbf{g} \right) d\Omega \\ & + \sum_K \int_K (\tau_K \mathbf{v}_h^n \cdot \nabla \psi_h) \cdot \left( -\nabla \rho g_h^n + \rho \tilde{\mu}_h^{n+1} \nabla c_h^{n+1} + \tilde{\rho}(c_h)^{n+1} \mathbf{g} \right) dK \end{aligned} \quad (4.125)$$

Dans (4.125), la contribution visqueuse au terme de stabilisation est nulle dans le cas des éléments de Lagrange d'ordre un. Dans le cas d'une approximation  $\mathbb{P}_2$ , cette contribution est non nulle et est donnée en 2D par :

$$(\tau_K \mathbf{v}_h \cdot \nabla \psi_h) \cdot (\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_h) = \tau_K \begin{pmatrix} u_h \frac{\partial \psi_{uh}}{\partial x} + v_h \frac{\partial \psi_{uh}}{\partial y} \\ u_h \frac{\partial \psi_{vh}}{\partial x} + v_h \frac{\partial \psi_{vh}}{\partial y} \end{pmatrix}^t \cdot \eta \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial^2 u_h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_h}{\partial y \partial x} \\ 2 \frac{\partial^2 v_h}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_h}{\partial y \partial x} \end{pmatrix} \quad (4.126)$$

Le système linéaire résultant de la discrétisation de l'étape de transport-diffusion est résolu comme pour l'équation de Cahn-Hilliard par la méthode GMRES avec un préconditionnement SSOR.

**Étapes (ii-a) et (ii-b) - Projection**

Les deux autres étapes de la méthode de projection, c'est-à-dire l'équation de Poisson pour la pression  $\rho g$  et la correction de vitesse, sont discrétisées dans le cadre d'une approximation de Galerkin classique. La formulation faible associée au problème de Poisson (4.112) s'écrit : trouver  $\rho g_h^{n+1} \in \mathcal{S}_h$  tel que  $\forall \varphi_h \in \mathcal{S}_h$  s'annulant sur  $\partial\Omega$  là où  $\rho g_h$  vérifie des conditions de Dirichlet :

$$\int_{\Omega} \nabla \varphi_h \cdot \nabla \rho g_h^{n+1} d\Omega = \int_{\Omega} \nabla \varphi_h \cdot \nabla \rho g_h^n d\Omega - \int_{\Omega} \varphi_h \cdot \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} d\Omega \quad (4.127)$$

La formulation faible (4.127) contient implicitement les conditions aux limites de Neumann homogènes pour la correction de pression  $\rho g_h^{n+1} - \rho g_h^n$ .

Enfin, la formulation faible associée à l'étape de correction de vitesse (4.113) s'écrit : trouver  $\mathbf{v}_h^{n+1} \in \mathcal{V}_h$  tel que  $\forall \psi_h \in \mathcal{V}_h$  s'annulant sur  $\partial\Omega$  là où  $\mathbf{v}_h$  vérifie des conditions de Dirichlet :

$$\int_{\Omega} \psi_h \cdot \frac{\rho}{\Delta t} \mathbf{v}_h^{n+1} d\Omega = \int_{\Omega} \psi_h \cdot \frac{\rho}{\Delta t} \hat{\mathbf{v}}_h^{n+1} d\Omega - \int_{\Omega} \psi_h \cdot \nabla (\rho g_h^{n+1} - \rho g_h^n) d\Omega \quad (4.128)$$

Pour ces deux étapes, le système linéaire résultant de la discrétisation est résolu à partir de la méthode du gradient conjugué avec un préconditionnement ILU0 pour l'équation de Poisson et diagonal pour l'étape de projection.

## 4.5 Applications

Cette partie est consacrée à la validation du schéma numérique proposé pour le modèle Bousinesq. Pour cela, nous considérons quatre types d'application : une bulle en équilibre, une instabilité de Rayleigh-Taylor, le mouvement de lignes de contact et enfin la coalescence de deux bulles.

Si le problème de la bulle en équilibre est très simple, il constitue une étape importante dans le cadre d'une validation puisqu'il permet non seulement de vérifier la relation de Laplace mais il permet également d'estimer l'importance des courants parasites qui sont un problème commun aux méthodes représentant la contribution de la tension de surface par une force de volume (méthodes CSF<sup>8</sup>).

Le problème des instabilités de Rayleigh-Taylor a été traité par différentes méthodes de simulation numérique directe (VOF, Level Set, Front-Tracking, ...) et est déjà beaucoup plus complexe. Nous reprendrons ici la démarche habituellement menée en illustrant la capacité de la méthode à prendre en compte des changements topologiques importants et en comparant, au cours des premiers instants du développement de l'instabilité, l'amplitude de la perturbation avec la solution analytique issue de l'analyse linéaire de l'instabilité.

Les deux dernières applications, mouvements de lignes triples et coalescence, mettent l'accent sur les potentialités de la méthode.

Deux applications sont présentées pour le mouvement de lignes triples. La première est une application présentée par Jacqmin [80] du mouvement d'une interface dans une cavité entraînée faisant un angle de contact de  $90^\circ$  avec les parois. Cette application permet en particulier de se comparer avec les résultats obtenus dans [80]. La deuxième est une application présentée récemment par Jamet *et al.* [83] dans le cas fluide pur de la montée d'une bulle vers une paroi sous l'effet de la gravité. La simulation de ce problème est présentée pour deux angles de contact, l'un de  $90^\circ$  et l'autre de  $45^\circ$ .

---

<sup>8</sup>Continuum Surface Force

Enfin, la dernière application reprend également une application présentée dans [83] et traite du problème de la coalescence de deux bulles dans un liquide initialement au repos. Nous retrouvons ici, dans un contexte incompressible, le même type de comportement que celui observé dans le cas fluide pur dans un contexte compressible.

Pour ces applications, les concentrations dans les phases ont été fixées à  $c_\alpha = 0.1$  et  $c_\beta = 0.9$ . L'épaisseur de l'interface  $\epsilon$  dépend du domaine d'étude ainsi que du pas de discrétisation et est fixée de manière à ce que la couche capillaire comprenne au minimum trois mailles de calcul. Pour une tension de surface donnée, les valeurs du coefficient de capillarité interne  $\lambda$  et du coefficient  $\beta$  sont ensuite déterminées à partir des relations (4.90). Enfin, la mobilité  $\kappa$  dépend principalement de la dynamique du problème considéré ainsi que de l'épaisseur de l'interface. En pratique, on essaye généralement de prendre la plus petite valeur possible assurant une cohérence de l'interface. Nous invitons le lecteur intéressé à se reporter aux travaux de Jacqmin [79] pour une discussion plus détaillée sur les différents ordres de grandeur de la mobilité. Pour les applications considérées, la mobilité  $\kappa$  a été choisie constante de l'ordre de  $10^{-8} \text{ m}^5 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{J}^{-1}$ .

#### 4.5.1 Bulle en équilibre

Nous nous intéressons ici au problème de l'état d'équilibre d'une bulle dans une phase homogène. Dans le cadre de la théorie de Gibbs des interfaces pour laquelle l'interface est vue comme une surface de discontinuité porteuse d'une énergie surfacique en excès  $\sigma$ , la différence entre la pression au centre d'une inclusion  $\mathcal{P}_0$  et la pression extérieure  $\mathcal{P}_\infty$  est donnée, à l'équilibre, par la relation de Laplace :

$$\Delta\mathcal{P} = \mathcal{P}_0 - \mathcal{P}_\infty = \sigma \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \frac{2\sigma}{R_m} \quad (4.129)$$

où  $R_1$  et  $R_2$  sont les rayons de courbure de l'interface et  $R_m$  la courbure moyenne. D'un autre côté, pour une situation d'équilibre, la forme conservative avec pression mécanique des équations du mouvement du mélange de Cahn-Hilliard se simplifie et s'écrit, pour un problème à symétrie sphérique, le long de la direction  $r$  normale à l'interface :

$$\frac{d\mathcal{P}}{dr} = -\frac{2\lambda}{r} \left( \frac{dc}{dr} \right)^2 \quad (4.130)$$

On obtient ainsi après intégration :

$$\mathcal{P}_\infty - \mathcal{P}_0 = -2 \int_0^\infty \frac{\lambda}{r} \left( \frac{dc}{dr} \right)^2 dr \quad (4.131)$$

Par analogie avec la relation de Laplace (4.129) et la définition de la tension de surface pour une interface plane en équilibre, on peut définir un rayon moyen  $R_m$  [51, 81] afin d'identifier la différence de pression (4.131) à celle donnée par la relation de Laplace :

$$\int_0^\infty \frac{\lambda}{r} \left( \frac{dc}{dr} \right)^2 dr = \frac{\sigma}{R_m} \quad (4.132)$$

Dans (4.132), la tension de surface  $\sigma$  est donnée approximativement par sa définition correspondant à une interface plane à condition que le rayon moyen de l'inclusion  $R_m$  soit suffisamment grand devant l'épaisseur de l'interface [78]. Dans [77], le rayon minimal acceptable dans le sens de (4.132) est donné par  $R_m \simeq 3\epsilon$ .

On considère ici un problème bidimensionnel, c'est-à-dire une "bulle cylindrique" de rayon  $R$  placée au centre d'un domaine carré  $\Omega$ . Dans ce cas, un des deux rayons de courbure est infini et la relation de Laplace s'écrit :

$$\Delta \mathcal{P} = \frac{\sigma}{R} \quad (4.133)$$

Les dimensions du domaine sont choisies de telle manière que les fortes variations du paramètre d'ordre soient suffisamment éloignées du centre de la bulle et des frontières du domaine. Le calcul est effectué sur un domaine  $\Omega$  de longueur  $L = 2 \cdot 10^{-2}$  m,  $\Omega = [-L/2, L/2] \times [-L/2, L/2]$ , le rayon  $R$  de l'inclusion est donné par  $R = 4 \cdot 10^{-3}$  m et l'épaisseur de l'interface vaut  $\epsilon = 10^{-3}$  m. Les viscosités des deux phases sont identiques  $\eta = 10^{-3}$  Pa.s et la tension de surface est donnée par  $\sigma = 10^{-3}$  N.m<sup>-1</sup>. Les conditions aux limites sur les bords du domaine sont des conditions de non glissement.

Un problème commun aux méthodes de simulation numérique directe de type CSF est la présence de courants parasites, ou faux courants, dans les simulations d'interfaces courbes proches de l'équilibre. Pour le problème d'une inclusion en équilibre, ces courants se présentent sous la forme de vortex et sont situés au voisinage de l'interface du côté extérieur de l'inclusion. L'intensité des courants parasites est généralement mesurée à partir du nombre capillaire  $Ca$  défini par  $Ca = \eta u_{max} / \sigma$  où  $u_{max}$  est une mesure de l'amplitude maximale des tourbillons. Il a été observé que ce nombre capillaire était approximativement constant et variait selon la méthode entre  $10^{-4} \leq Ca \leq 10^{-2}$ . Pour les valeurs considérées ici, le nombre capillaire définit directement l'intensité des courants parasites. Dans le cadre des méthodes à interfaces diffuses, Jacqmin [79] puis Jamet *et al.* [84] ont proposé des discrétisations spatiales en maillage MAC qui assurent une conservation de l'énergie totale dans le cas non dissipatif, *i.e.* une décroissance dans le cas dissipatif. En d'autres termes, ces schémas permettent de réduire considérablement l'intensité des courants parasites et, dans [84], ils se réduisent à la précision machine. Avant de présenter les résultats, nous étudions dans le paragraphe suivant la variation de l'énergie totale du système dans le cas continu. Nous allons voir que cette étude est instructive et qu'elle vient justifier l'utilisation de la forme potentielle en enthalpie libre des équations du mouvement.

### Conservation de l'énergie totale du système

On définit l'énergie totale du système  $\mathcal{E}$  comme la somme des énergies libre  $\mathcal{F}$  et cinétique  $\mathcal{E}_c$  :

$$\mathcal{E} = \mathcal{F} + \mathcal{E}_c = \int_{\Omega} \left( F(c, \nabla c) + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v}^2 \right) d\Omega \quad (4.134)$$

Le volume  $\Omega$  désignant un volume matériel en description Eulérienne, la dérivée en temps de l'énergie totale (4.134) s'écrit :

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \int_{\Omega} \left( \frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (F \mathbf{v}) + \frac{1}{2} \frac{\partial \rho \mathbf{v}^2}{\partial t} + \frac{1}{2} \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}^2 \mathbf{v}) \right) d\Omega \quad (4.135)$$

A partir de la relation entre l'énergie libre  $F$  et l'énergie libre classique  $F^o$ , on obtient à partir d'une intégration par parties :

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial F^o}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\lambda}{2} (\nabla c)^2 \right) = \left( \frac{\partial F^o}{\partial c} - \lambda \nabla^2 c \right) \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \lambda \nabla c \frac{\partial c}{\partial t} \right) \quad (4.136)$$

A partir de la définition du potentiel chimique généralisé  $\rho \tilde{\mu}$ , de l'équation de Cahn-Hilliard et de l'intégration par partie :  $\rho \tilde{\mu} \nabla^2 \rho \tilde{\mu} = \nabla \cdot (\rho \tilde{\mu} \nabla \rho \tilde{\mu}) - (\nabla \rho \tilde{\mu})^2$ , la relation (4.136) devient :

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\rho \tilde{\mu} \mathbf{v} \cdot \nabla c - \kappa (\nabla \rho \tilde{\mu})^2 + \nabla \cdot \left( \kappa \rho \tilde{\mu} \nabla \rho \tilde{\mu} + \lambda \nabla c \frac{\partial c}{\partial t} \right) \quad (4.137)$$

D'autre part, après plusieurs intégrations par parties, on peut écrire l'identité :

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial \rho \mathbf{v}^2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}^2 \mathbf{v}) \right) = \mathbf{v} \cdot \left( \frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) \right) \quad (4.138)$$

Ainsi, à partir de la forme potentielle des équations du mouvement en  $\rho \tilde{\mu}_1$  et  $\rho \tilde{\mu}$ , il vient :

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial \rho \mathbf{v}^2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}^2 \mathbf{v}) \right) = -\mathbf{v} \cdot \nabla \rho \tilde{\mu}_1 - c \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \tilde{\mu} + \mathbf{v} \cdot \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4.139)$$

On a négligé ici pour simplifier la force de pesanteur. Le deuxième terme du second membre de (4.139) peut encore s'écrire, à partir d'une intégration par partie :

$$c \mathbf{v} \cdot \nabla \rho \tilde{\mu} = \nabla \cdot (\rho \tilde{\mu} c \mathbf{v}) - \rho \tilde{\mu} \nabla \cdot (c \mathbf{v}) \quad (4.140)$$

Le premier et dernier terme du second membre de (4.139) peuvent également être intégrés par partie et en substituant (4.137) et (4.139) dans (4.135), la variation de l'énergie totale du système s'écrit à partir de l'équation de conservation de la masse et du théorème de Green :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{E}}{dt} &= - \int_{\Omega} \left( \kappa (\nabla \rho \tilde{\mu})^2 + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v} \right) d\Omega \\ &\quad + \oint_{\partial\Omega} \mathbf{n} \cdot \left( (F - \rho \tilde{\mu}_1 - \rho \tilde{\mu} c) \mathbf{v} + \kappa \rho \tilde{\mu} \nabla \rho \tilde{\mu} + \lambda \nabla c \frac{\partial c}{\partial t} + \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{v} \right) d\sigma \end{aligned} \quad (4.141)$$

La relation (4.141) montre que lorsque  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 0$ ,  $\mathbf{n} \cdot \nabla \rho \tilde{\mu} = 0$ , et  $\mathbf{n} \cdot \nabla c = 0$ , l'énergie totale  $\mathcal{E}$  est toujours dissipée puisque  $\kappa$  et  $\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{v}$  sont toujours positifs.

Nous ne prétendons pas ici étendre cette analyse au cas discret, une telle étude déborde du cadre de ce travail, cependant nous pouvons apporter quelques remarques. Dans le cas discret, les équations résolues sont l'équation de Cahn-Hilliard et les équations du mouvement. On remarque alors à partir des relations (4.137) et (4.139) que l'énergie libre discrète peut être obtenue en substituant par  $\rho \tilde{\mu}$  les fonctions tests  $\varphi$  pour l'équation de Cahn-Hilliard et l'énergie cinétique discrète peut être obtenue en substituant par  $\mathbf{v}$  les fonctions tests  $\boldsymbol{\psi}$  pour les équations du mouvement. Dans le cas discret, si on reprend les développements menés dans le cas continu à partir de la forme potentielle en  $\rho \tilde{\mu}_1$  et  $\rho \tilde{\mu}$ , on doit avoir  $\rho \tilde{\mu}_1 \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  et il faut non seulement que l'intégration par parties (4.140) reste valable mais également que l'identité  $\rho \tilde{\mu} c \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$  soit vérifiée. D'après l'analyse de Jacqmin [79], ces deux dernières conditions sont vérifiées pour une discrétisation volumes finis à mailles décalées. En fait, pour une telle discrétisation, la situation est très différente car la forme discrète du terme convectif de l'équation de Cahn-Hilliard est la même pour  $\mathbf{v} \cdot \nabla c$  et  $\nabla \cdot (c \mathbf{v})$ . Nous ne sommes pas en mesure d'estimer la validité de ces conditions dans le cadre d'une méthode éléments finis mais il semblerait à partir d'expériences numériques qu'elles ne le soient pas pour notre discrétisation. En revanche, si on utilise la forme potentielle en enthalpie libre, on s'aperçoit que ces deux conditions ne sont plus nécessaires et l'on doit seulement avoir  $\rho g \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ . C'est la raison pour laquelle nous utilisons la forme potentielle en enthalpie libre.

## Résultats

Nous avons estimé l'intensité de ces courants pour deux grilles  $44 \times 44$  et  $60 \times 60$  et pour deux versions de la méthode de projection : l'une où l'on résout un problème de Poisson continu pour la pression et l'autre où l'on résout directement le problème de Darcy à partir d'un algorithme d'Uzawa. Si cette version est plus coûteuse, elle permet cependant d'assurer au sens faible que

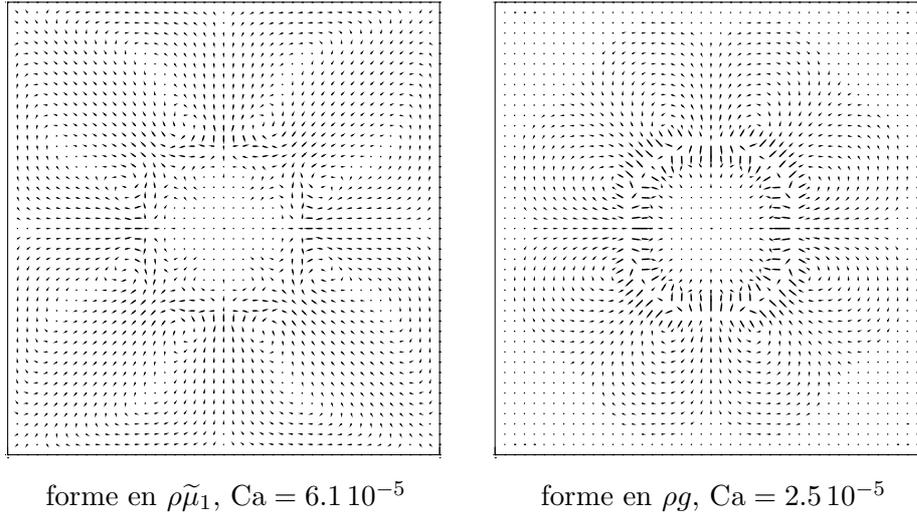


Figure 4.1: Courants parasites associés aux deux formes potentielles - Grille  $44 \times 44$

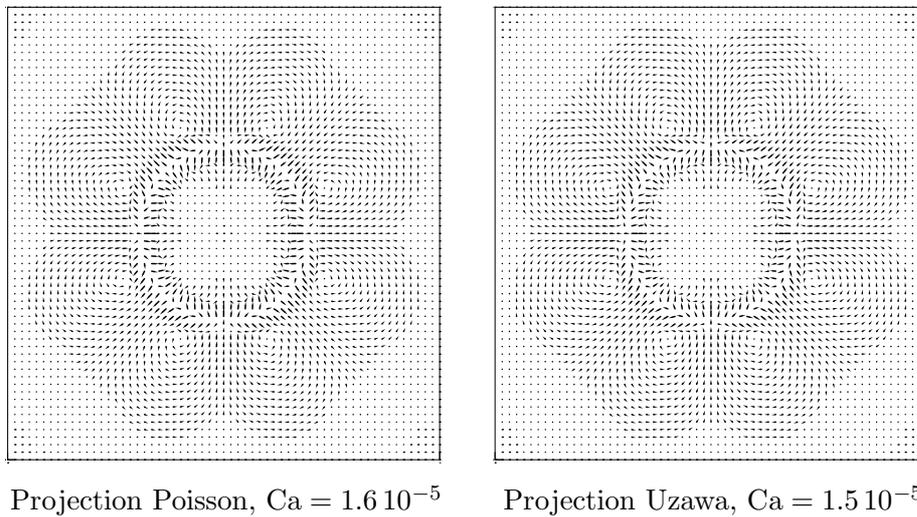


Figure 4.2: Courants parasites associés à la forme potentielle  $\rho g$  - Etape de projection résolue à partir du problème de Poisson ou du problème de Darcy (algorithme d'Uzawa) - Grille  $60 \times 60$

$\rho g \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ , condition qui comme nous l'avons vu est une condition nécessaire pour la conservation de l'énergie totale du système.

Les premiers résultats obtenus montrent que si les courants parasites sont relativement faibles (*cf.* figures (4.1), (4.2) et (4.3)), ils ne sont pas éliminés. Pour expliquer la présence de ces courants, il faudrait bien sûr reprendre l'étude de la conservation de l'énergie totale dans le cas discret mais, comme nous l'avons signalé, une telle étude déborde du cadre de ce travail. On peut cependant proposer une explication. Si la forme potentielle en enthalpie libre assure "directement" une conservation de l'énergie dans le cas continu en ce qui concerne les termes capillaires (et vraisemblablement dans le cas discret), elle n'assure pas numériquement un état d'équilibre mécanique : pour cette forme, les effets capillaires dans les équations du mouvement interviennent sous la forme  $\rho \tilde{\mu} \nabla c$  et, numériquement, le potentiel chimique généralisé est proche de sa valeur d'équilibre  $\rho \tilde{\mu}_{eq} = 0$  mais ne l'atteint pas. Par conséquent, ce terme peut devenir important au voisinage de l'interface où les variations de  $c$  sont importantes, et ce même pour un état d'équilibre. Plusieurs pistes peuvent être envisagées pour éliminer les courants parasites

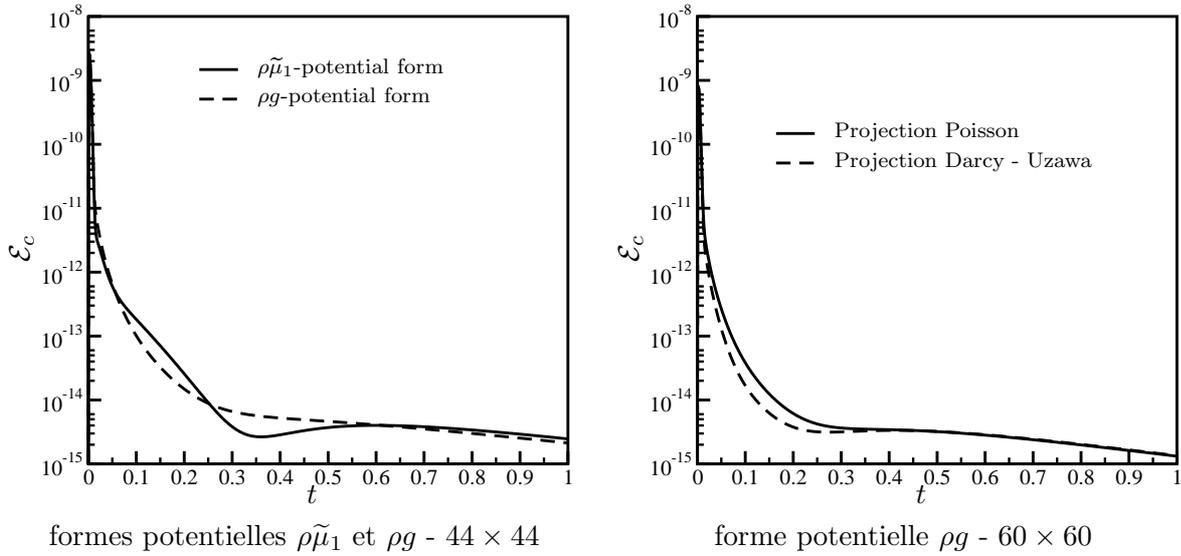


Figure 4.3: Evolutions de l'énergie cinétique discrète  $\mathcal{E}_c$  en fonction du temps

comme l'analyse du schéma en temps, le rôle de la convergence de l'équation de Cahn-Hilliard (en particulier la convergence du potentiel chimique généralisé vers sa valeur d'équilibre) ou encore la convergence et la discrétisation de l'équation de Poisson (*cf.* par exemple les développements menés par Torres et Brackbill [142] dans le cadre de la méthode Front-Tracking).

D'autre part, à l'état stationnaire, la différence de pression entre le centre de la bulle et les quatre points situés aux coins du domaine est *mesurée* puis est comparée à la relation de Laplace. Les résultats sont reportés dans le tableau (4.2) où  $e_{\Delta\mathcal{P}}$  est l'erreur relative en % entre la différence de pression mesurée et la relation de Laplace. Cette erreur est de l'ordre de 4% et correspond à l'erreur obtenue par Jamet *et al.* [83] dans le cas fluide pur pour un même nombre de points de discrétisation dans la couche capillaire.

	$e_{\Delta\mathcal{P}}$
Forme $\rho\tilde{\mu}_1$ - $44 \times 44$	6.5%
Forme $\rho g$ - $44 \times 44$	4.2%
Forme $\rho g$ - $60 \times 60$	3.4%
Forme $\rho g$ - $60 \times 60$ - Darcy	2.1%

Tableau 4.2: Erreur relative  $e_{\Delta\mathcal{P}}$  pour la relation de Laplace

## 4.5.2 Instabilités de Rayleigh-Taylor

Le problème des instabilités de Rayleigh-Taylor est un exemple classique de compétition entre les effets de la tension de surface et ceux de la gravité. Initialement, une interface horizontale sépare deux fluides de densité différentes  $\rho_\alpha$  et  $\rho_\beta$ ,  $\rho_\beta > \rho_\alpha$ , le fluide le plus dense est situé au dessus du fluide le moins dense et la gravité agit perpendiculairement à cette interface. Une telle situation est gravitationnellement instable puisque toute déformation de l'interface crée un déséquilibre de pression qui tend à amplifier cette déformation. En revanche, les forces de tension de surface ont

tendance à minimiser l'aire interfaciale et limitent donc la déformation de l'interface.

Le calcul est effectué sur le domaine  $\Omega = [-l/2, l/2] \times [0, 4l]$ , le contraste de densité est  $\rho_\beta/\rho_\alpha = 3$ , le champ de pesanteur est  $g = 9.81 \text{ m.s}^{-2}$  et les viscosités des deux phases sont identiques  $\eta \simeq 10^{-3} \text{ Pa.s}$ .

Au cours des premiers instants du développement de l'instabilité, l'analyse linéaire des instabilités permet de prédire l'amplitude  $A(t)$  de la perturbation en fonction du temps [36]. Cette amplitude a un comportement exponentiel fonction du taux d'amplification  $\tau_A$  de l'instabilité :

$$A(t) = A_0 \cosh(\tau_A t) \quad (4.142)$$

où  $A_0$  est l'amplitude initiale de la perturbation. Le taux d'amplification  $\tau_A$  est déterminé en fonction du nombre d'onde  $k$  et du nombre d'Atwood  $At$  à partir des relations :

$$\tau_A^2 = kAt \left( g - \frac{\sigma k^2}{\rho_\beta - \rho_\alpha} \right), \quad k = \frac{2\pi}{\omega}, \quad \omega = 4\pi \left( \frac{4\eta^2}{g(\rho_\beta^2 - \rho_\alpha^2)} \right)^{1/3}, \quad At = \frac{\rho_\beta - \rho_\alpha}{\rho_\beta + \rho_\alpha}$$

L'apparition de l'instabilité est déterminée par la condition  $\tau_A^2 > 0$ , soit :

$$\sigma < \frac{g(\rho_\beta - \rho_\alpha)\omega^2}{4\pi^2} \quad (4.143)$$

Pour  $\rho_\beta/\rho_\alpha = 3$  le nombre d'Atwood est donné par  $At = 0.5$  et pour  $\rho_\alpha = 10 \text{ kg.m}^{-3}$ , la longueur d'onde  $\omega$  vaut  $\omega \simeq 10^{-2} \text{ m}$ . Pour une tension de surface  $\sigma = 5 \cdot 10^{-5} \text{ N.m}^{-1}$ , le critère (4.143) du développement de l'instabilité est vérifié. La largeur du domaine de calcul est choisie de telle manière que  $l = \omega$ .

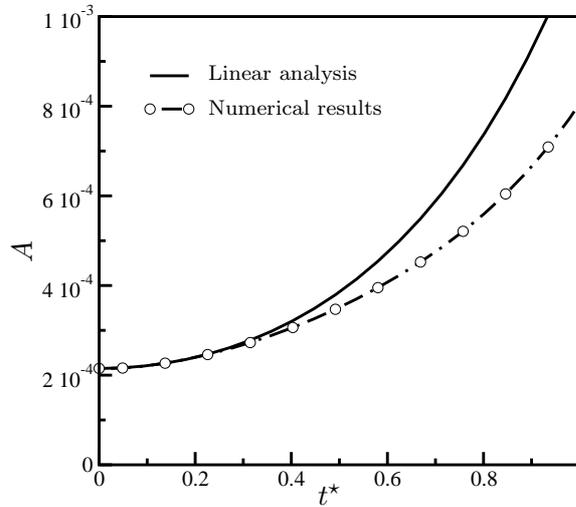


Figure 4.4: Evolution de l'amplitude  $A$  en fonction du temps  $t^* = t\sqrt{gAt}/\omega$

A l'instant initial, l'interface est perturbée avec une amplitude  $A_0 \simeq \omega/50$  (illustré sur la figure (4.5)), et le champ de vitesse est nul. Les conditions aux limites sont des conditions de non-glissement sur les parois horizontales et des conditions de périodicité sur les parois verticales. Les résultats sont représentés sur les figures (4.5) et (4.4). La figure (4.5) représente quelques instantanés du développement de l'instabilité et illustre la capacité de la méthode à prendre en compte des changements topologiques relativement importants. La figure (4.4) représente, au cours des premiers instants, l'évolution de l'amplitude  $A$  en fonction du temps et montre qu'un bon accord est obtenu entre l'amplitude prédite (relation (4.142)) et celle calculée numériquement à partir des isovaleurs du paramètre d'ordre.

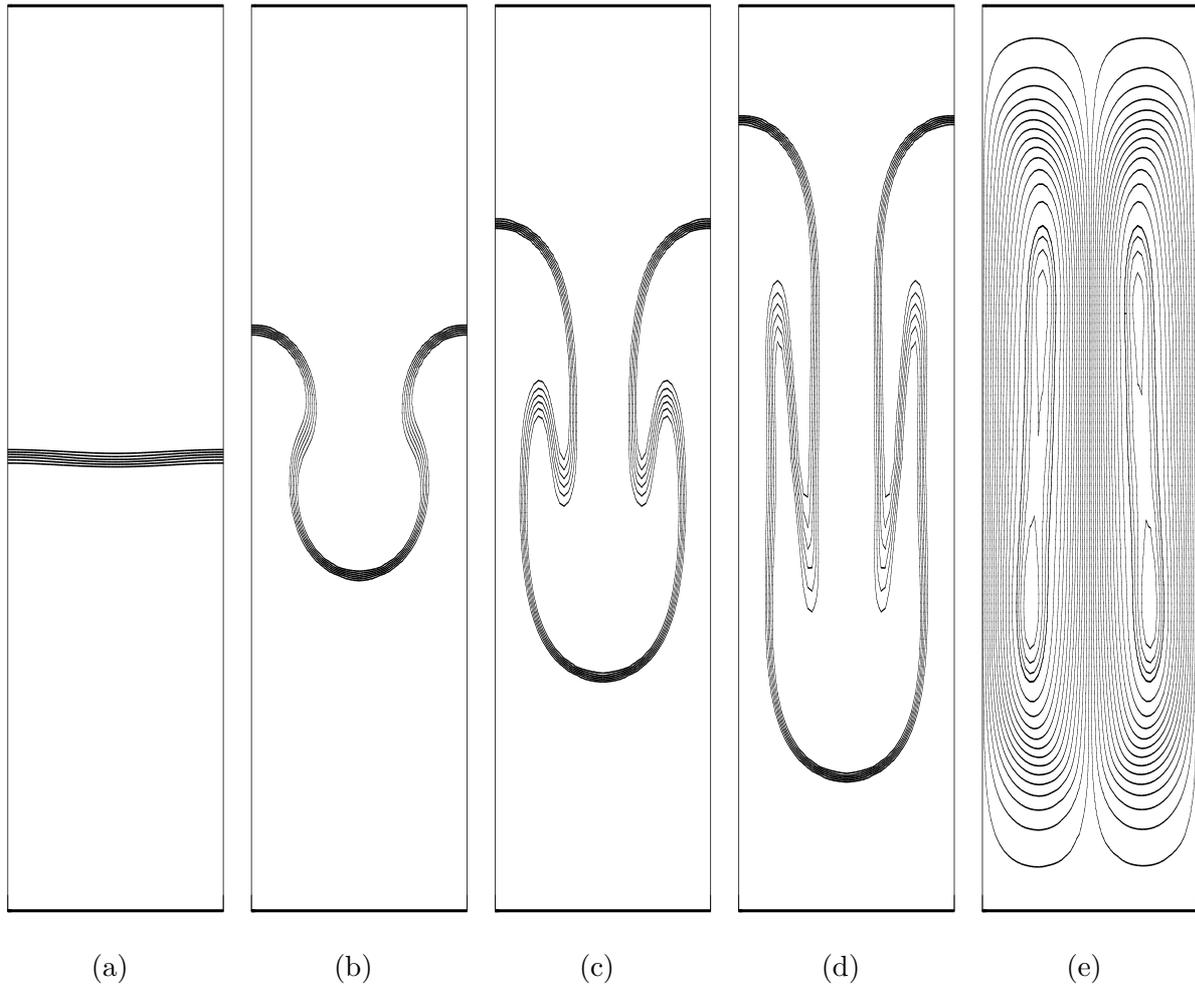


Figure 4.5: Instabilité de Rayleigh-Taylor. (a), (b), (c), (d) - isovalues du paramètre d'ordre pour  $t^* = 0, 3, 4.2, 5.45$ , (e) - lignes de courant pour  $t^* = 5.45$

### 4.5.3 Lignes de contact

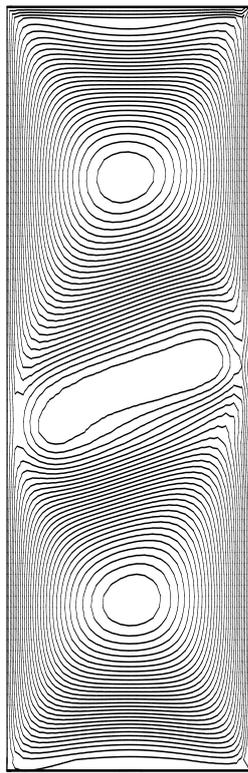
Dans ce paragraphe, nous présentons deux applications illustrant la capacité de la méthode à prendre en compte le mouvement de lignes triples, et ce lorsque la paroi est entraînée ou lorsque des conditions de non glissement sont imposées.

La première application est un problème traité en détail par Jacqmin [80] concernant la dynamique d'une ligne de contact dans une cavité. Nous reprenons ici exactement les mêmes données pour pouvoir se comparer aux résultats obtenus dans [80].

Le domaine de calcul  $\Omega$  est une cavité fermée  $\Omega = [0, 2 \cdot 10^{-2}] \times [0, 6 \cdot 10^{-2}]$  à parois verticales entraînées. Les vitesses d'entraînement sont  $u_w = \pm 4 \cdot 10^{-3} \text{ m.s}^{-1}$ , le signe + s'appliquant pour la paroi de droite. La gravité est nulle et afin de bien identifier les effets de tension de surface, les deux fluides ont la même densité et la même viscosité :  $\rho = 1 \text{ kg.m}^{-3}$ ,  $\eta = 0.1 \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$ . L'épaisseur de l'interface est donnée par  $\epsilon = 6.475 \cdot 10^{-3} \text{ m}$  et la tension de surface vaut  $\sigma = 3 \cdot 10^{-2} \text{ N.m}^{-1}$ . Pour ces valeurs, le nombre capillaire Ca vaut :  $\text{Ca} = \eta u_w / \sigma \simeq 0.0133$ .

Les parois horizontales correspondent à des parois fixes imperméables, *i.e.* conditions de non glissement, et l'interface est initialement plane et horizontale, placée au centre de la cavité. Pour ce problème, l'angle de contact de la couche capillaire à la paroi vaut  $90^\circ$

La figure (4.6) représente les lignes de courant, les isovalues du paramètre d'ordre et les isovalues



lignes de courant

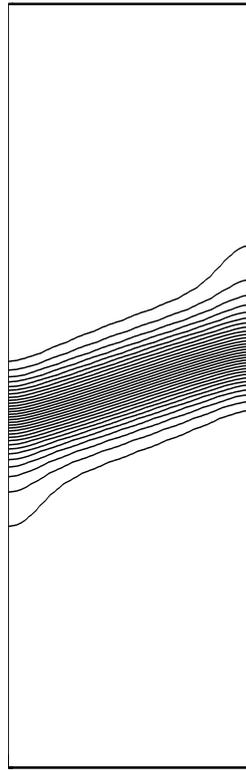
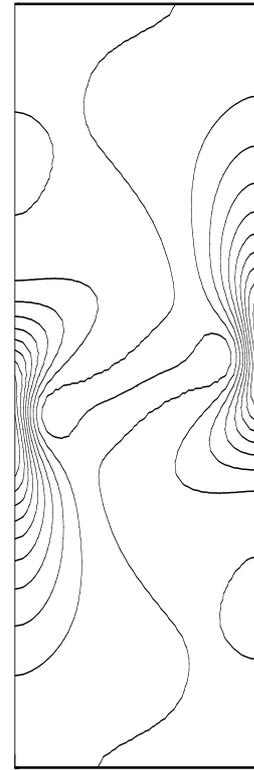
paramètre d'ordre  $c$ potentiel chimique généralisé  $\rho\tilde{\mu}$ 

Figure 4.6: Cavity à parois entraînées : état stationnaire

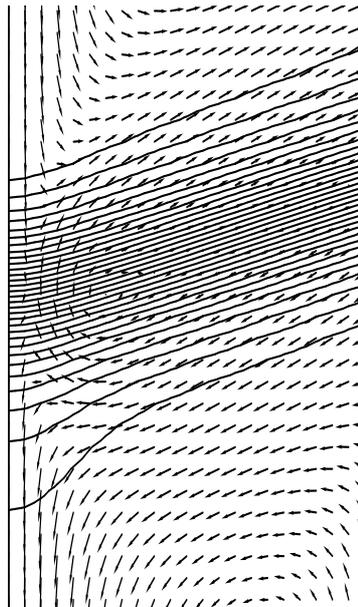


Figure 4.7: Ecoulement stationnaire au voisinage de la ligne de contact pour la cavité entraînée

du potentiel chimique généralisé dans la cavité à l'état stationnaire. L'ensemble de ces résultats est en très bon accord avec les résultats obtenus par Jacqmin [80] bien qu'ici nous utilisons une forme potentielle différente et une discrétisation en éléments finis. Cette application vient ainsi confirmer la validité du schéma numérique mis en place.

La deuxième application concernant le mouvement de lignes triples reprend un problème présenté par Jamet [83] de la montée d'une bulle vers une paroi sous l'effet de la gravité. Dans [83] la méthode utilisée est la méthode du second gradient pour un fluide pur (contexte compressible). L'application présentée ici est essentiellement illustrative puisqu'on ne reprend pas les paramètres de calcul de [83].

Le domaine de calcul consiste en un domaine  $\Omega = [0, 1.6 \cdot 10^{-2}] \times [0, 1.2 \cdot 10^{-2}]$ . Les parois verticales et la paroi horizontale supérieure correspondent à des parois fixes et imperméables sur lesquelles sont imposées des conditions de non glissement et la paroi horizontale inférieure correspond à une frontière libre sur laquelle sont spécifiées des conditions de sortie. L'épaisseur de l'interface est fixée à  $\epsilon = 8 \cdot 10^{-4}$  m et la tension de surface vaut  $\sigma = 2 \cdot 10^{-4}$  N.m<sup>-1</sup>. Les viscosités des deux phases sont les mêmes,  $\eta = 2 \cdot 10^{-3}$  kg.m<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>, l'accélération de la pesanteur vaut  $g = 9.81$  m.s<sup>-2</sup> et le contraste de densité est  $\rho_\beta/\rho_\alpha = 2$  avec  $\rho_\alpha = 2$  kg.m<sup>-3</sup>.

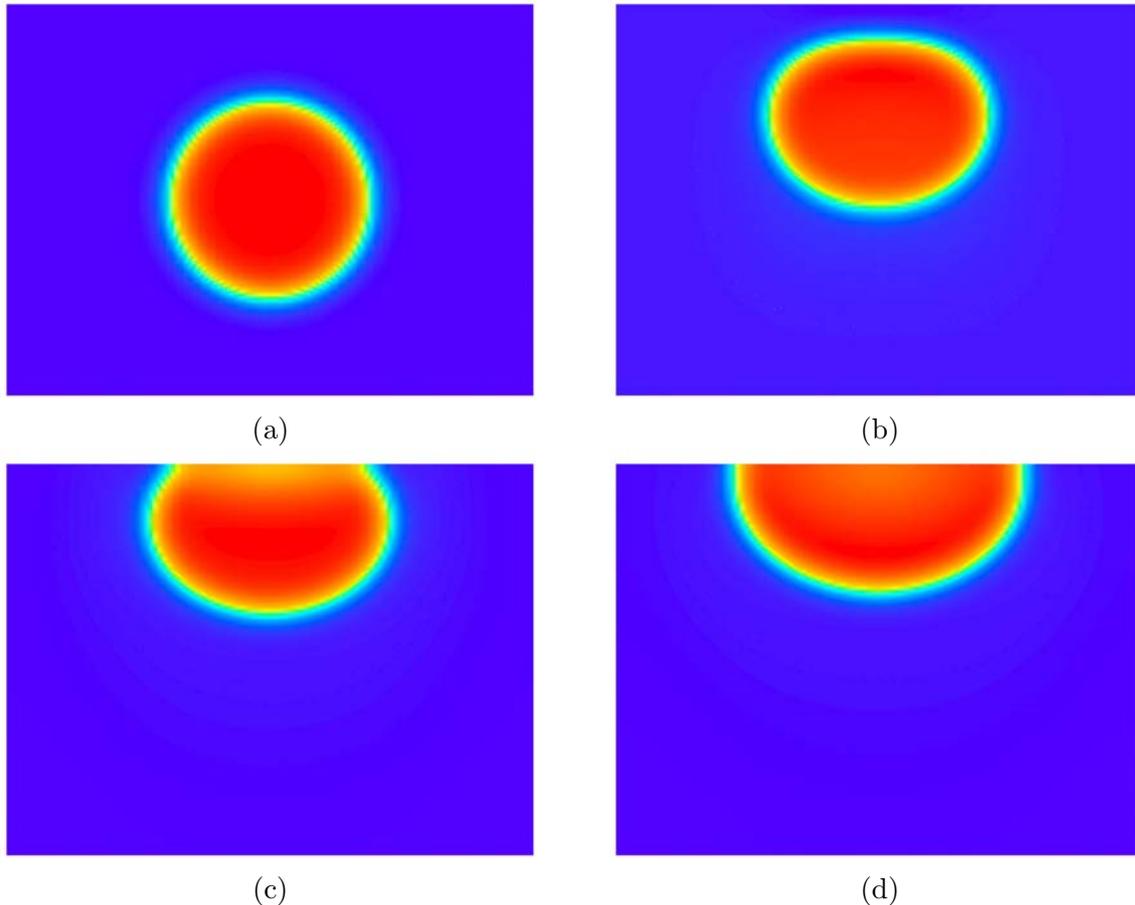


Figure 4.8: Montée d'une bulle sous l'effet de la gravité dans un liquide au repos et impact sur la paroi supérieure - angle de contact de  $90^\circ$

A l'instant initial, le rayon de la bulle, lorsque l'interface est vue comme une surface de discontinuité, est  $R = 3 \cdot 10^{-3}$  m. Pour ce problème, nous avons considéré deux cas : un cas où l'angle de contact vaut  $90^\circ$  et un autre où l'angle vaut  $45^\circ$ . La figure (4.8) représente quelques instantanés de la montée de la bulle et de son impact sur la paroi supérieure pour un angle de

contact de  $90^\circ$ . La figure (4.9) représente les formes d'équilibre de la bulle après impact pour les deux angles de contact. On rappelle ici que des conditions de non glissement sont imposées sur la paroi supérieure, la ligne triple est ici mise en mouvement uniquement par le gradient du potentiel chimique généralisé  $\rho\tilde{\mu}$ .

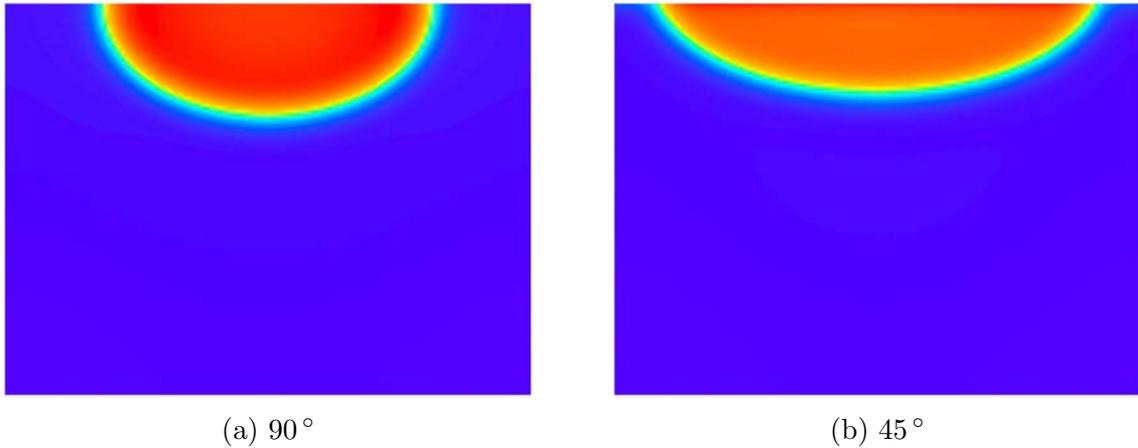


Figure 4.9: Etat d'équilibre après impact sur la paroi pour un angle de contact de  $90^\circ$  et  $45^\circ$

#### 4.5.4 Coalescence de deux bulles

Nous illustrons ici la capacité du modèle et de la méthode numérique à prendre en compte des changements topologiques importants et rapides. Le problème considéré ici reprend celui présenté par Jamet *et al.* [83] dans le cas fluide pur (*i.e.* compressible) et traite la coalescence de deux bulles dans un liquide au repos en l'absence de gravité.

Le domaine de calcul  $\Omega$  est  $\Omega = [0, 1.6 \cdot 10^{-2}] \times [0, 1.2 \cdot 10^{-2}]$  dont les bords sont des frontières fixes et imperméables (*i.e.* conditions de non glissement). Les deux phases ont les mêmes densités  $\rho = 100 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  et les mêmes viscosités  $\eta = 10^{-3} \text{ kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ . L'épaisseur de l'interface est  $\epsilon = 9 \cdot 10^{-4} \text{ m}$  et la tension de surface vaut  $\sigma = 2.6 \cdot 10^{-3} \text{ N}\cdot\text{m}^{-1}$ . Initialement, les deux bulles ont un rayon  $R = 2.8 \cdot 10^{-3} \text{ m}$  et  $R = 1.6 \cdot 10^{-3} \text{ m}$ .

Bien que ces données soient différentes de celles utilisées dans [83] et que le calcul soit mené dans un contexte incompressible, nous retrouvons un comportement similaire. La figure (4.10) présente plusieurs instantanés de la coalescence : initialement les bulles sont très proches, séparées par une longueur de l'ordre de l'épaisseur interfaciale, puis coalescent rapidement. Cette coalescence est accompagnée d'une déformation importante de l'interface qui diminue au cours du temps et tend vers l'état d'équilibre d'une bulle parfaitement cylindrique (problème 2D) pour laquelle la relation de Laplace est retrouvée (calculée à partir du rayon moyen à l'état stationnaire).

Il est important de rappeler ici que cette application se veut avant tout illustrative et que notre objectif ici n'est pas d'étudier finement la dynamique de la coalescence mais plutôt d'illustrer les potentialités de la méthode. On peut néanmoins s'interroger sur l'impact d'une méthodologie à interfaces diffuses pour ce type de problème en étudiant par exemple la constante de temps de la coalescence. Dans le cadre du modèle de Cahn-Hilliard, une telle étude passe essentiellement par une étude fine de l'impact de la mobilité  $\kappa$ , qui caractérise le taux de dissipation de l'énergie due à la tension de surface, sur la solution [79]. A titre de comparaison, ce type d'étude nécessite généralement des "lois de fermeture" pour les reconnections dans le cadre des méthodes Lagrangiennes et Eulérienne-Lagrangienne alors que pour les méthodes Eulériennes, *e.g.* Level Set, une grande partie des difficultés est reportée dans les fonctions de régularisation. Enfin, d'autres paramètres peuvent venir influencer la qualité de la solution aux premiers instants de

la coalescence [83] comme l'épaisseur de l'interface ou le pas de discrétisation.

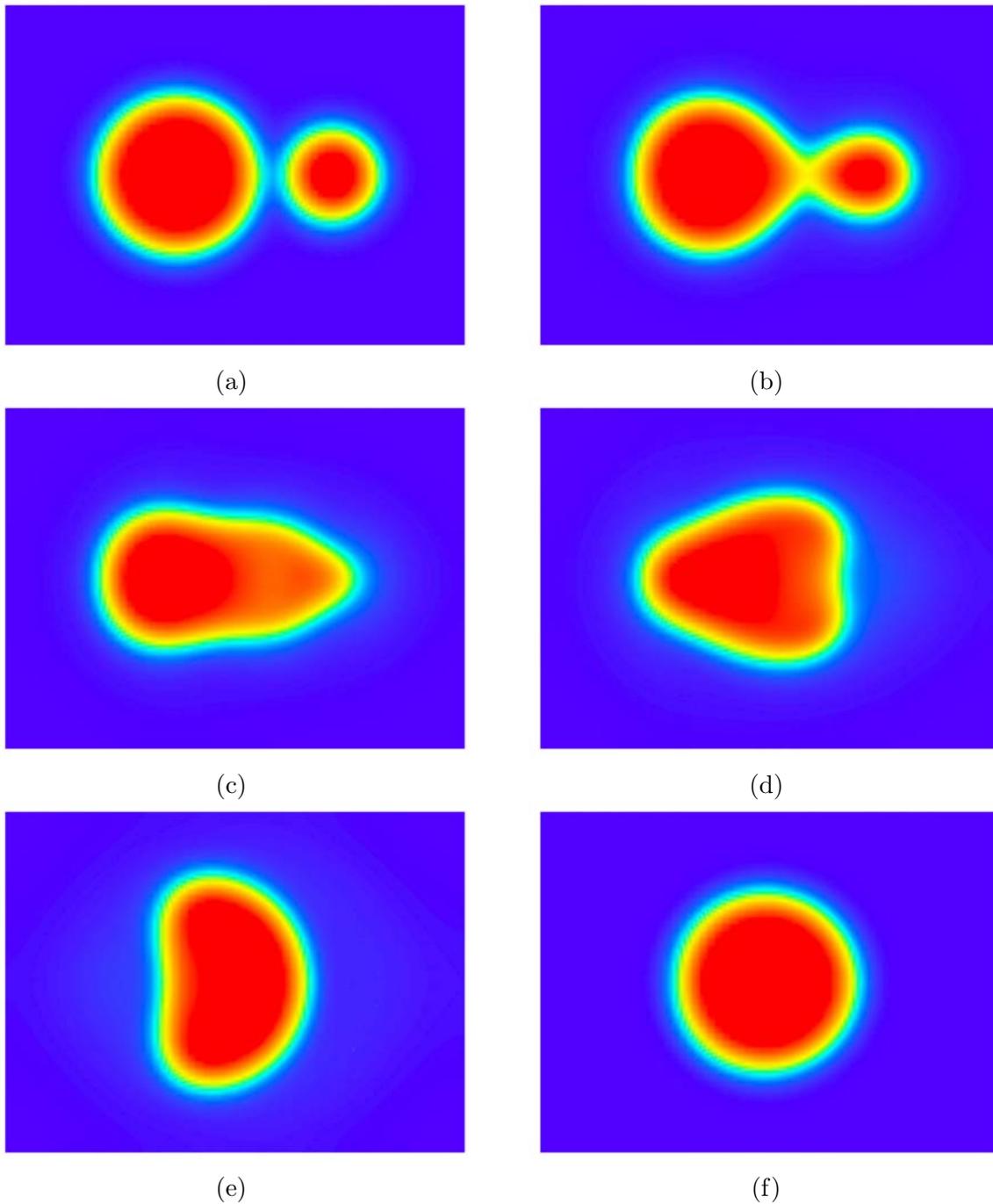


Figure 4.10: Coalescence de deux bulles initialement très proches et au repos en l'absence de gravité

## 4.6 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre une méthode de simulation numérique directe qui s'inscrit dans le cadre des méthodes à interfaces diffuses. Dans un premier temps, nous avons présenté deux grandes classes de méthodes, la méthode du second gradient pour un fluide pur compressible et les modèles de Cahn-Hilliard pour deux fluides non miscibles. Si les modèles de Cahn-Hilliard ne prenaient pas en compte le changement de phase, nous avons vu qu'ils étaient numériquement plus attractifs et nous avons cherché à établir un lien entre ces deux types de méthodes.

Dans le cadre du principe de Hamilton pour un mélange de deux fluides du second gradient, nous avons montré clairement ce lien et nous avons montré que **les modèles de Cahn-Hilliard ne sont qu'une conséquence de la théorie du second gradient pour un mélange de deux fluides.**

Nous avons montré, dans un cadre thermodynamique clair et rigoureux, qu'il existait plusieurs formes équivalentes des équations du mouvement : une forme conservative où les contributions capillaires interviennent sous la forme d'un tenseur des contraintes capillaires et deux formes dites potentielles faisant intervenir uniquement des gradients de potentiels chimiques généralisés.

A partir de ce modèle, nous avons dérivé un modèle quasi-incompressible en utilisant une définition thermodynamique de l'incompressibilité et nous avons montré que cette définition était consistante avec la relation de Gibbs pour le mélange. Nous avons indiqué également que **le modèle quasi-incompressible a les potentialités pour prendre en compte le changement de phase et ce dans un contexte incompressible.**

Dans ce travail, nous nous sommes limités à une approximation Boussinesq de ce modèle. Pour ce dernier modèle, nous avons présenté un schéma de discrétisation temporelle et un schéma de discrétisation spatiale s'inscrivant dans un contexte éléments finis dans le cadre d'une approximation de Galerkin. Le schéma en temps consiste à résoudre le problème en deux étapes de manière séquentielle : l'équation de Cahn-Hilliard est tout d'abord résolue par une méthode de Newton puis les équations du mouvement sont résolues par une méthode de projection. Pour ces deux étapes, les potentiels chimiques généralisés jouent un rôle essentiel et, en particulier, nous avons montré que **la forme potentielle en enthalpie libre semblait être la plus indiquée** du point de vue de la conservation de l'énergie totale du système. Cela a été confirmé lors de la simulation d'une inclusion en équilibre. En ce qui concerne la discrétisation spatiale, nous avons présenté une stabilisation SUPG pour la première étape d'advection-diffusion de la méthode de projection et nous avons indiqué qu'une stabilisation du terme convectif de l'équation de Cahn-Hilliard ne s'avérait pas nécessaire. Enfin, nous avons présenté plusieurs applications qui ont permis de valider le schéma numérique et d'illustrer les potentialités de la méthode.



## Chapitre 5

# Propriétés effectives : cellules unitaires 2D

Dans le chapitre 3, nous avons présenté des cellules unitaires simples, la cellule stratifiée et la cellule de Chang, qui permettaient de résoudre analytiquement les problèmes de fermeture et d'obtenir ainsi les coefficients paramétrant le modèle macroscopique de manière analytique. Pour des cellules unitaires plus complexes, la détermination des propriétés effectives passe par deux étapes. La première consiste à déterminer finement les caractéristiques de l'écoulement à l'échelle locale. Dans le chapitre 4, nous avons présenté une méthode de simulation numérique directe qui permettait d'avoir accès à ces informations. Dans ce travail, nous nous sommes limités à un modèle isotherme établi à partir d'une approximation de Boussinesq. Si ce modèle ne prend pas en compte le changement de phase, il constitue cependant un outil pour la détermination des propriétés effectives du modèle macroscopique qui, rappelons-le, s'inscrit dans le cadre d'une théorie quasi-statique. La simulation numérique directe de l'écoulement à l'échelle de la cellule unitaire permet d'avoir accès à la topologie des interfaces, au champ de vitesse et aux fractions volumiques qui constituent des informations jouant le rôle de *données d'entrée* pour les problèmes de fermeture. La deuxième étape conduisant à la détermination des propriétés effectives consiste alors à résoudre numériquement les problèmes de fermeture.

Ce chapitre traite de cette deuxième étape et est consacré à la simulation numérique directe d'écoulements diphasiques sur des cellules unitaires, à la résolution numérique des problèmes de fermetures et à la détermination des propriétés effectives. La démarche et les méthodes présentées dans ce travail permettent de déterminer l'ensemble des coefficients de transports du modèle mais nous nous limiterons ici aux coefficients d'échange entre phases.

La première partie de ce chapitre est consacrée à une méthode numérique de résolution des problèmes de fermeture. Comme pour la méthode de simulation numérique directe, les problèmes de fermeture sont discrétisés dans un contexte éléments finis et une formulation SUPG est introduite pour stabiliser la partie transport pour les nombres de Péclet forts ou modérés. La résolution numérique des problèmes de fermeture est tout d'abord validée pour les cellules simples considérées dans le chapitre 3. Dans un deuxième temps, les problèmes de fermeture sont résolus sur une cellule unitaire 2D consistant en un arrangement décalé de cylindres dans le cas purement diffusif mais où les deux phases liquide et vapeur sont mouillantes. Dans un deuxième temps, nous présentons quelques résultats pour des Péclets de cellule non nuls sur des cellules unitaires 2D consistants en des arrangements alignés et décalés de cylindres. Nous étudions en particulier les effets de la saturation et de l'intensité de l'écoulement sur les coefficients d'échange. Les résultats présentés ici ne conduisent pas encore à des corrélations pour les coefficients effectifs. Cela nécessiterait un nombre plus important de configurations. Ils permettent cependant d'observer

certaines tendances et viennent clairement illustrer l'intérêt de la démarche suivie dans ce travail.

## 5.1 Résolution numérique des problèmes de fermeture

Nous avons vu dans les chapitres 2 et 3 que les problèmes de fermeture avaient pour caractéristique commune de se présenter sous la forme de problèmes aux limites intégro-différentiels. Ces problèmes font intervenir des intégrales des solutions en tant que termes sources dans les équations de transport locales. Dans le chapitre 3, nous avons vu que pour des cellules unitaires simples, la cellule stratifiée et la cellule de Chang, ces problèmes pouvaient être résolus analytiquement en substituant les conditions de périodicité par des conditions de symétrie. Pour des cellules plus complexes, il n'est plus possible de mener des développements analytiques et la détermination des propriétés effectives passe par une résolution numérique des problèmes de fermeture.

Une des principales difficultés associée à la résolution numérique des problèmes de fermeture provient de leur nature intégro-différentielle. Dans le cadre des modèles à deux équations pour les systèmes à deux phases avec fermeture quasi-stationnaire, cette difficulté peut être levée en introduisant un changement de variable pour les inconnues de fermeture. Pour un problème de fermeture donné, ce changement de variable permet de s'affranchir de son caractère intégro-différentiel et conduit à une résolution plus aisée et plus efficace (système discret creux) de deux sous-problèmes indépendants. Cette technique pour résoudre les problèmes de fermeture est classique et on pourra se reporter à Quintard et Whitaker [123] et Quintard *et al.* [119] pour une présentation détaillée.

Dans le cadre du modèle à trois équations proposé ici, on peut suivre la même méthodologie mais il n'est pas possible de s'affranchir de la résolution d'un problème intégro-différentiel. La raison principale provient d'un couplage plus complexe des inconnues de fermeture ou, en d'autres termes, de la multiplicité des continuums. Nous invitons le lecteur aux références citées plus haut pour s'en convaincre. D'un autre côté, nous avons vu dans le chapitre 2 que l'approximation quasi-stationnaire pour les déviations correspondait à la solution asymptotique de l'approximation instationnaire. En particulier, les problèmes de fermeture instationnaires convergent aux temps longs vers leur homologue quasi-stationnaire. Si les problèmes instationnaires ont une structure mathématique similaire aux problèmes quasi-stationnaires, nous allons voir cependant qu'ils offrent la possibilité de relaxer dans le temps le caractère intégro-différentiel.

### 5.1.1 Forme instationnaire

Les problèmes I à III pour les inconnues de fermeture scalaires qui conduisent aux coefficients d'échange effectifs ayant une structure similaire, nous nous intéressons ici au problème I. Les formes instationnaire et quasi-stationnaire de ce problème sont données dans le chapitre 2 au paragraphe 2.3.3 et nous retenons ici la forme instationnaire.

On cherche dans un premier temps à écrire le problème de fermeture au sens des distributions afin d'obtenir une forme plus compacte de ce problème. On introduit pour cela le changement de variable :

$$S_{\ell i}^g = s_{\ell i}^g + 1, \quad S_{\ell i}^s = s_{\ell i}^s + 1, \quad S_{\ell i}^\ell = s_{\ell i}^\ell \quad (5.1)$$

A partir de ce changement de variable, on peut écrire le problème instationnaire sous la forme :

$$(\rho C_p)_g \left( \frac{\partial S_{\ell i}^g}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla S_{\ell i}^g \right) = \nabla \cdot (k_g \nabla S_{\ell i}^g) - \varepsilon_g^{-1} (h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs}), \quad \text{dans } V_g \quad (5.2)$$

$$(\rho C_p)_\ell \left( \frac{\partial S_{\ell i}^\ell}{\partial t} + \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla S_{\ell i}^\ell \right) = \nabla \cdot (k_\ell \nabla S_{\ell i}^\ell) - \varepsilon_\ell^{-1} (h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}), \quad \text{dans } V_\ell \quad (5.3)$$

$$(\rho C_p)_s \frac{\partial S_{\ell i}^s}{\partial t} = \nabla \cdot (k_s \nabla S_{\ell i}^s) + \varepsilon_s^{-1} (h_{\ell i}^{gs} + h_{\ell i}^{\ell s}), \quad \text{dans } V_s \quad (5.4)$$

$$S_{\ell i}^\ell = 1, \quad S_{\ell i}^g = 1, \quad \text{sur } A_{g\ell} \quad (5.5)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla S_{\ell i}^g = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla S_{\ell i}^s, \quad S_{\ell i}^g = S_{\ell i}^s, \quad \text{sur } A_{gs} \quad (5.6)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla S_{\ell i}^s = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla S_{\ell i}^\ell, \quad S_{\ell i}^\ell = S_{\ell i}^s, \quad \text{sur } A_{\ell s} \quad (5.7)$$

$$\begin{aligned} \text{Per :} \quad S_{\ell i}^g(\mathbf{r} + l_i) &= S_{\ell i}^g(\mathbf{r}), \quad S_{\ell i}^\ell(\mathbf{r} + l_i) = S_{\ell i}^\ell(\mathbf{r}) \\ S_{\ell i}^s(\mathbf{r} + l_i) &= S_{\ell i}^s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\text{C.I :} \quad S_{\ell i}^g(t = 0) = 1, \quad S_{\ell i}^\ell(t = 0) = 0, \quad S_{\ell i}^s(t = 0) = 1 \quad (5.9)$$

$$\text{Moy :} \quad \langle S_{\ell i}^g \rangle^g = 1, \quad \langle S_{\ell i}^\ell \rangle^\ell = 0, \quad \langle S_{\ell i}^s \rangle^s = 1 \quad (5.10)$$

Les expressions des coefficients d'échange en fonction des nouvelles variables sont évidemment les mêmes :

$$h_{\ell i}^{g\ell} = \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot k_g \nabla S_{\ell i}^g dA, \quad h_{\ell i}^{gs} = \frac{1}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla S_{\ell i}^g dA \quad (5.11)$$

$$h_{\ell i}^{\ell g} = \frac{1}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot k_\ell \nabla S_{\ell i}^\ell dA, \quad h_{\ell i}^{\ell s} = \frac{1}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla S_{\ell i}^\ell dA \quad (5.12)$$

Ainsi, le changement de variable (5.1) permet d'obtenir des conditions aux limites de continuité des inconnues de fermeture aux interfaces solide-liquide (5.7) et solide-vapeur (5.6) et une condition aux limites de "continuité"<sup>1</sup> pour la condition de Dirichlet à l'interface liquide-vapeur (5.5). On rappelle ici que les conditions dites de moyennes (5.10) sont consistantes avec les conditions initiales (5.9).

Le problème précédent peut s'écrire au sens des distributions si on introduit la variable de fermeture  $S$  définie par :  $S = S_{\ell i}^g$  dans  $V_g$ ,  $S = S_{\ell i}^\ell$  dans  $V_\ell$  et  $S = S_{\ell i}^s$  dans  $V_s$ . En introduisant le même type de notation pour les propriétés thermiques et les vitesses, avec  $\mathbf{v} = \mathbf{v}_s = 0$  dans  $V_s$ , le problème de fermeture instationnaire I peut s'écrire sous la forme condensée suivante :

$$(\rho C_p) \frac{\partial S}{\partial t} + (\rho C_p) \mathbf{v} \cdot \nabla S = \nabla \cdot (k \nabla S) - h, \quad \text{dans } V \quad (5.13)$$

$$S = 1, \quad \text{sur } A_{\ell g} \quad (5.14)$$

$$\text{Per :} \quad S(\mathbf{r} + l_i) = S(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (5.15)$$

$$\text{C.I :} \quad \gamma_g S(t = 0) = 1, \quad \gamma_\ell S(t = 0) = 0, \quad \gamma_s S(t = 0) = 1 \quad (5.16)$$

$$\text{Moy :} \quad \langle \gamma_g S \rangle^g = 1, \quad \langle \gamma_\ell S \rangle^\ell = 0, \quad \langle \gamma_s S \rangle^s = 1 \quad (5.17)$$

où on a posé :

$$h = \gamma_g \varepsilon_g^{-1} (h_{\ell i}^{g\ell} + h_{\ell i}^{gs}) + \gamma_\ell \varepsilon_\ell^{-1} (h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}) - \gamma_s \varepsilon_s^{-1} (h_{\ell i}^{gs} + h_{\ell i}^{\ell s}) \quad (5.18)$$

Sous cette forme, la résolution du problème instationnaire I se réduit à la résolution d'un problème intégral-différentiel pour l'inconnue  $S$  sous les contraintes (5.17) dans les phases dont la

<sup>1</sup>dans le sens où la valeur imposée est la même des deux côtés de l'interface

solution à l'état stationnaire est la solution du problème quasi-stationnaire. Les problèmes II et III peuvent s'écrire sous une forme similaire. Pour le problème II, il suffit d'introduire le changement de variable :

$$S_{gi}^g = s_{gi}^g, \quad S_{gi}^s = s_{li}^s + 1, \quad S_{gi}^\ell = s_{gi}^\ell + 1 \quad (5.19)$$

Pour le problème III, le changement de variable s'écrit :

$$S_{si}^g = s_{si}^g + 1, \quad S_{si}^s = s_{si}^s, \quad S_{si}^\ell = s_{si}^\ell + 1 \quad (5.20)$$

### 5.1.2 Discrétisation temporelle

Pour résoudre le problème intégral-différentiel (5.13)-(5.17), nous suivons la démarche proposée par Landereau [92]. Au cours d'un pas de temps  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$ , si on note  $S^n$  et  $S^{n+1}$  les solutions aux instants  $t_n$  et  $t_{n+1}$ , le problème de fermeture est discrétisé en temps et est résolu en trois sous-étapes de la manière suivante :

(i) Pour  $S^n$  connue, trouver la solution intermédiaire  $S^{n+1}$  telle que :

$$\begin{cases} (\rho C_p) \frac{S^{n+1} - S^n}{\Delta t} + (\rho C_p) \mathbf{v} \cdot \nabla S^{n+1} = \nabla \cdot (k \nabla S^{n+1}) - h^n \\ \text{BC} : S^{n+1} = S^n = 1, \quad \text{sur } A_{\ell g} \end{cases} \quad (5.21)$$

(ii) Trouver  $S^{n+1}$  en contraignant la solution intermédiaire :

$$\begin{cases} \langle \gamma_g S^{n+1} \rangle^g = 1, \quad \langle \gamma_\ell S^{n+1} \rangle^\ell = 0, \quad \langle \gamma_s S^{n+1} \rangle^s = 1 \\ \text{BC} : S^{n+1} = 1, \quad \text{sur } A_{\ell g} \end{cases} \quad (5.22)$$

(iii) Calculer et mettre à jour les coefficients d'échange :

$$h^{n+1} = h(S^{n+1}) \quad (5.23)$$

Nous n'avons pas ici écrit explicitement les conditions de périodicité pour les étapes (i) et (ii) puisqu'elles ne constituent pas à proprement parler des conditions aux limites.

Un tel schéma permet de traiter simplement  $h^n$  dans l'équation de transport pour la solution intermédiaire  $S^{n+1}$  en tant que terme source calculé explicitement à partir de la solution  $S^n$ . La nature intégral-différentielle du problème est ainsi conservée mais relaxée dans le temps. Ce découpage en temps introduit naturellement une condition sur le pas de temps puisque les termes sources sont traités explicitement mais conduit pour la première étape, pour une discrétisation spatiale donnée et aux conditions de périodicité près, à un système discret creux dont l'inversion est peu coûteuse en comparaison d'un traitement implicite des coefficients d'échange.

En reprenant la démarche proposée par Quintard et Whitaker [123] pour les contraintes de moyennes et en notant  $S^*$  la solution intermédiaire au cours d'un pas de temps  $\Delta t$ , l'algorithme de résolution du problème de fermeture s'écrit :

1. Pour  $n = 0$ , initialiser  $\gamma_g S^n = 1$ ,  $\gamma_\ell S^n = 0$ ,  $\gamma_s S^n = 1$  et  $h^n = 0$
2. Pour  $n \geq 0$ , résoudre au cours d'un pas de temps  $\Delta t = t_{n+1} - t_n$  les trois sous-étapes :

(i) Pour  $S^n$  connue, trouver  $S^*$  tel que :

$$\begin{cases} (\rho C_p) \frac{S^* - S^n}{\Delta t} + (\rho C_p) \mathbf{v} \cdot \nabla S^* = \nabla \cdot (k \nabla S^*) - h^n \\ \text{BC} : S^* = S^n = 1, \quad \text{sur } A_{\ell g} \end{cases}$$

(ii) Trouver  $S^{n+1}$  à partir de la contrainte de moyenne :

$$\begin{cases} \gamma_g S^{n+1} = \gamma_g S^* - \langle \gamma_g S^* \rangle^g + 1 \\ \gamma_\ell S^{n+1} = \gamma_\ell S^* - \langle \gamma_\ell S^* \rangle^\ell \\ \gamma_s S^{n+1} = \gamma_s S^* - \langle \gamma_s S^* \rangle^s + 1 \\ \text{BC} : S^{n+1} = 1, \quad \text{sur } A_{\ell g} \end{cases}$$

(iii) Calculer et mettre à jour les coefficients d'échange :

$$\begin{cases} h_{\ell i}^{g\ell n+1} = \frac{1}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot k_g \nabla S^{n+1} dA, & h_{\ell i}^{gs n+1} = \frac{1}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla S^{n+1} dA \\ h_{\ell i}^{\ell g n+1} = \frac{1}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot k_\ell \nabla S^{n+1} dA, & h_{\ell i}^{\ell s n+1} = \frac{1}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla S^{n+1} dA \end{cases}$$

3. Itérer en temps jusqu'à l'état stationnaire qui correspond à la solution du problème quasi-stationnaire

### 5.1.3 Discrétisation spatiale : méthode éléments finis

Les problèmes de fermeture du modèle à trois équations présentent deux particularités qui conduisent à une discrétisation spatiale s'inscrivant dans un contexte non structuré. La première est que, comme nous l'avons indiqué, il n'est pas possible d'éviter la résolution d'un problème intégral-différentiel. Ainsi, même si la nature intégral-différentielle est relaxée dans le temps, le calcul des coefficients à l'étape (iii) nécessite un maillage s'appuyant sur les interfaces contenues dans la cellule unitaire. La deuxième est la condition de Dirichlet sur l'interface liquide-vapeur pour l'inconnue de fermeture qui nécessite également un maillage s'appuyant sur cette interface.

Dans ce travail, les problèmes de fermeture sont discrétisés par la méthode des éléments finis dans le cadre de l'approximation de Galerkin. Nous notons  $\mathcal{I}_h$  une triangulation de la cellule unitaire  $\Omega$  et  $K$  les éléments finis de  $\mathcal{I}_h$ . Nous associons à  $\mathcal{I}_h$  l'espace d'approximation  $\mathcal{S}_h(\Omega) \subset H_h^1(\Omega)$  défini comme l'espace engendré par les fonctions continues et polynômiales d'ordre 2 par morceaux sur  $\mathcal{I}_h$  :

$$\mathcal{S}_h = \{w_h \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega}) ; \forall K \in \mathcal{I}_h, w_h|_K \in \mathbb{P}_2\} \quad (5.24)$$

Notons  $S_h \in \mathcal{S}_h$  l'approximation de  $S$ , la formulation faible associée à la première étape (i) s'écrit : pour  $n \geq 0$ , trouver  $S_h^* \in \mathcal{S}_h$  avec  $S_h^*|_{A_{\ell g}} = 1$  tel que  $\forall \varphi_h \in \mathcal{S}_h$  avec  $\varphi_h|_{A_{\ell g}} = 0$  :

$$\int_{\Omega} \varphi_h \left( (\rho C_p) \left( \frac{S_h^* - S_h^n}{\Delta t} + \mathbf{v} \cdot \nabla S_h^* \right) - \nabla \cdot (k \nabla S_h^*) - h^n \right) d\Omega = 0 \quad (5.25)$$

A partir d'une intégration par parties du terme de diffusion et du théorème de Green, la formulation faible précédente devient :

$$\int_{\Omega} \varphi_h \left( (\rho C_p) \left( \frac{S_h^* - S_h^n}{\Delta t} + \mathbf{v} \cdot \nabla S_h^* \right) - h^n \right) d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \varphi_h \cdot \nabla S_h^* d\Omega = 0 \quad (5.26)$$

La formulation faible contient implicitement les conditions de saut aux interfaces solide-liquide et solide-vapeur. La contribution du terme de bord sur l'interface liquide-vapeur est nulle car  $\varphi_h|_{A_{\ell_g}} = 0$ , la condition de Dirichlet sur cette interface étant prise en compte au sens fort, *i.e.*  $S_h^*|_{A_{\ell_g}} = 1$ . Pour des Péclets non nuls, nous utilisons une stabilisation SUPG dont le paramètre de stabilisation dépend du Péclet moyen sur l'élément. Nous ne présentons pas ici la formulation SUPG et nous invitons le lecteur intéressé à se reporter au paragraphe 4.4.2 du chapitre 4 pour une présentation de cette formulation.

L'étape de contrainte sur les moyennes (*ii*) est discrétisée dans le cadre d'une approximation de Galerkin classique. Enfin, le calcul des coefficients d'échange dans la dernière étape (*iii*) est mené en calculant le gradient de l'inconnue de fermeture sur les éléments linéiques de l'interface liquide-vapeur à partir de la projection du gradient sur l'élément surfacique situé d'un côté, ou de l'autre, de l'interface selon le coefficient d'échange (*cf.* étape (*iii*) pour la définition des coefficients d'échange).

Les systèmes linéaires résultant de la discrétisation temporelle et spatiale sont résolus à partir de la méthode itérative GMRES avec un préconditionnement SSOR.

## 5.2 Validation

Dans un premier temps, les problèmes de fermeture sont résolus numériquement pour les cellules unitaires simples présentées dans le chapitre 3 : la cellule stratifiée et la version cylindrique de la cellule de Chang . Pour ces cellules, les problèmes de fermeture peuvent être résolus analytiquement et on peut ainsi valider le schéma numérique mis en place pour résoudre les problèmes de fermeture en comparant la solution numérique à la solution analytique.

Capacités calorifiques [J.m <sup>-3</sup> .K <sup>-1</sup> ]	$(\rho C_p)_g$	$(\rho C_p)_\ell$	$(\rho C_p)_s$
	2.10 <sup>3</sup>	4.2 10 <sup>6</sup>	3.5 10 <sup>6</sup>
Conductivités thermiques [W.m <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> ]	$k_g$	$k_\ell$	$k_s$
	0.025	0.68	17

Tableau 5.1: Propriétés thermiques associées aux cellules unitaires simples.

### 5.2.1 Cellule unitaire stratifiée

Dans le cas de la cellule stratifiée, on rappelle que la longueur caractéristique  $H$  de la cellule unitaire est donnée par  $H = \ell_g + \ell_\ell + \ell_s$ , avec  $\ell_g = \varepsilon_g H$ ,  $\ell_\ell = \varepsilon_\ell H$  et  $\ell_s = \varepsilon_s H$ . Les problèmes de fermeture ont été résolus numériquement sur la cellule  $[-H/2, H/2] \times [-H/2, H/2]$  avec  $H = 0.01$  m,  $\varepsilon_s = 0.6$  et  $\varepsilon_g = \varepsilon_\ell = 0.2$ .

On présente ici les solutions du problème I dans le cas de la configuration SGL. Pour une triangulation  $\mathcal{I}_h$  de la cellule illustrée sur la figure (5.1), le problème de fermeture a été résolu avec des approximations  $\mathbb{P}_1$  et  $\mathbb{P}_2$  de l'inconnue de fermeture  $S$ . L'évolution en fonction du temps du coefficient d'échange non nul  $h_{\ell_i}^{\ell_g}$  associé au problème I est représentée sur la figure (5.2). Le temps  $t$  a été adimensionné relativement à la plus faible diffusivité thermique des trois phases et à la longueur caractéristique de la cellule unitaire. A partir des données du tableau (5.1), le temps adimensionné  $t^*$  correspond ici au nombre de Fourier macroscopique associé à la phase liquide :

$$t^* = \frac{k_\ell}{(\rho C_p)_\ell H^2} t \quad (5.27)$$

Nous retrouvons ici le même type de comportement pour l'évolution du coefficient d'échange en fonction du temps que celui observé par Landereau [92] : la fonction d'échange est *quasi-singulière* à l'origine, en particulier pour l'approximation  $\mathbb{IP}_2$ , puis décroît de façon monotone et tend asymptotiquement vers une valeur constante. Comme nous l'avons indiqué, la valeur de cette constante correspond à la valeur du coefficient d'échange du problème quasi-stationnaire, c'est-à-dire la solution analytique obtenue dans le chapitre 3. Si les temps de relaxation de la fonction d'échange pour les approximations  $\mathbb{IP}_1$  et  $\mathbb{IP}_2$  sont quasi-identiques, on remarque que pour une même triangulation, seule l'approximation  $\mathbb{IP}_2$  converge vers la solution asymptotique. Nous avons obtenu des résultats similaires pour une approximation  $\mathbb{IP}_1$  avec une grille deux fois plus fine que celle utilisée pour une approximation  $\mathbb{IP}_2$  (temps CPU similaire pour les deux approximations). Ces résultats étaient prévisibles puisque les problèmes de fermeture sont essentiellement gouvernés par les gradients des inconnues de fermeture.

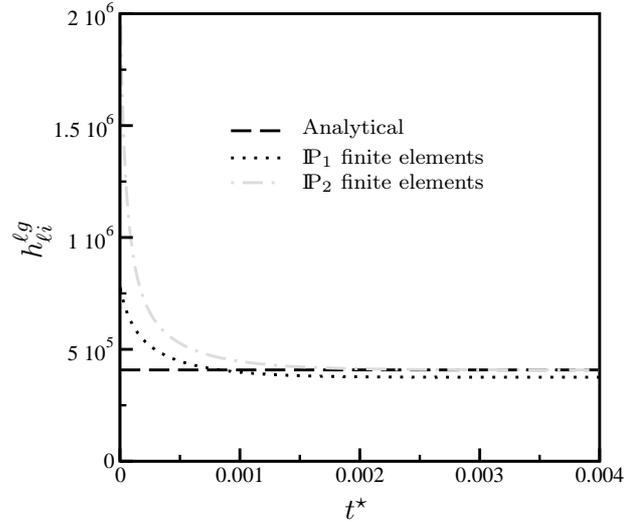
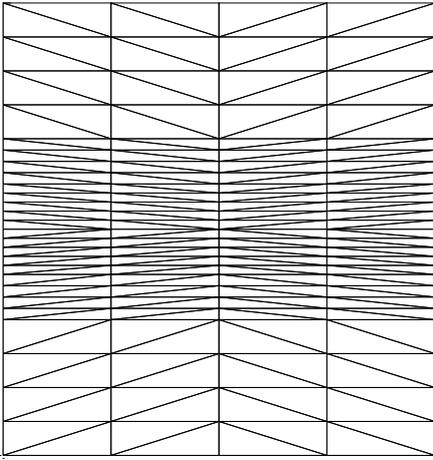


Figure 5.1: Triangulation  $\mathcal{I}_h$  de la cellule stratifiée

Figure 5.2: Evolutions du coefficient  $h_{li}^{lg}$  pour des approximations  $\mathbb{IP}_1$  et  $\mathbb{IP}_2$

### 5.2.2 Cellule 2D périodique associée à la cellule de Chang

Dans le cas de la version cylindrique de la cellule de Chang, illustrée sur la figure (5.3) pour la configuration SLG, on rappelle que les longueurs caractéristiques  $r_1$  et  $r_2$  sont données par  $r_1 = R\sqrt{\varepsilon_s}$  et  $r_2 = R\sqrt{\varepsilon_s + \varepsilon_\ell}$  où  $R$  représente la longueur caractéristique associée à la cellule de Chang. Dans le cadre d'une résolution numérique des problèmes de fermeture avec des conditions de périodicité pour l'inconnue  $S$ , la cellule de Chang doit au préalable être *modifiée* puisqu'elle constitue seulement une partie du motif d'un arrangement de cylindres alignés. On est ainsi amené à définir une cellule 2D périodique associée à la cellule de Chang.

Pour définir cette cellule, on reprend les arguments de Quintard et Whitaker [126] et on définit la longueur caractéristique  $H$  de la cellule périodique telle que  $H^2 = \pi R^2$  pour que la porosité et la surface spécifique de la phase solide restent les mêmes. Cette cellule est illustrée sur la figure (5.4). Les problèmes de fermeture sont ensuite résolus numériquement sur la cellule  $[-H/2, H/2] \times [-H/2, H/2]$  avec  $H = 0.01$  m et  $\varepsilon_s = 0.4$ .

Nous présentons ici les résultats pour le problème I dans le cas de la configuration SLG. La fraction volumique liquide a été fixée à 0.12, 0.18, 0.24 et 0.33, ce qui correspond respectivement à une saturation  $S_\ell$  de 0.2, 0.3, 0.4 et 0.55. Les propriétés thermiques sont celles indiquées dans le tableau (5.1).

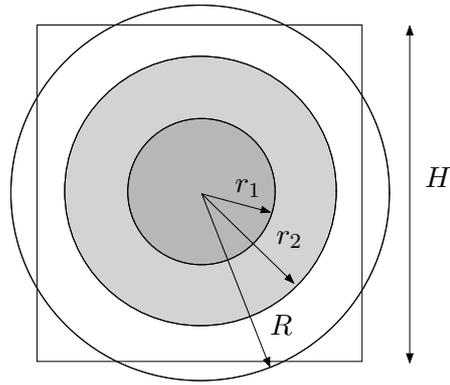
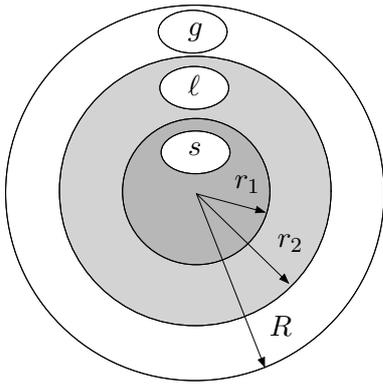
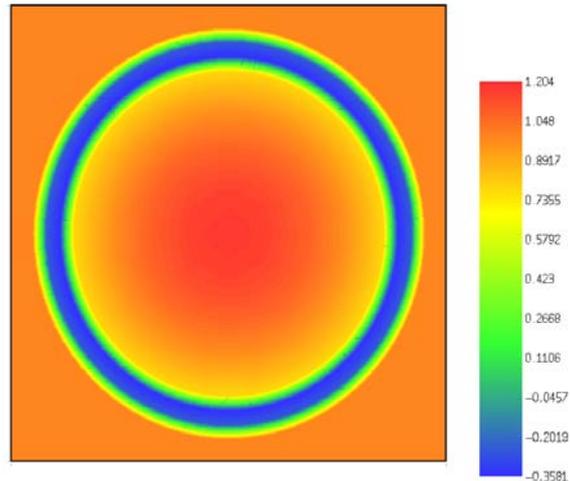
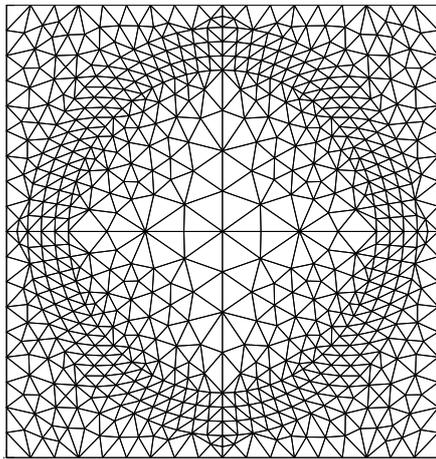


Figure 5.3: Cellule de Chang

Figure 5.4: Motif périodique associé à la cellule de Chang

Pour une triangulation  $\mathcal{I}_h$  de la cellule illustrée sur la figure (5.5) pour  $\varepsilon_\ell = 0.24$ , la figure (5.6) donne un exemple de l'inconnue de fermeture  $S$  associée au problème I à l'état stationnaire.

Figure 5.5: Triangulation  $\mathcal{I}_h$  de la cellule 2D périodique associée à la cellule de Chang,  $\varepsilon_\ell = 0.24$ Figure 5.6: Inconnue de fermeture  $S$  à l'état stationnaire pour le problème I - Configuration SLG,  $\varepsilon_\ell = 0.24$ 

Les courbes présentées sur la figure (5.7) représentent les évolutions en fonction du temps du coefficient d'échange  $h_{\ell i}^{\ell g}$  pour les différentes fractions volumiques considérées. On retrouve ici l'évolution monotone et décroissante observée dans le paragraphe précédent. Il est intéressant de remarquer que la valeur asymptotique des coefficients est quasi-identique aux valeurs calculées analytiquement à partir de la cellule de Chang. Ceci est illustré sur les figures (5.8) et (5.9). Ces résultats semblent ainsi indiquer que les résultats analytiques obtenus pour la cellule de Chang (version cylindrique) constituent de bons estimateurs des coefficients obtenus pour des cellules 2D périodiques<sup>2</sup>, tout du moins pour une saturation  $0.2 \leq S_\ell \leq 0.8$ . Nous allons en avoir la confirmation dans le prochain paragraphe pour des cellules plus complexes.

<sup>2</sup>ces deux cellules ne doivent cependant pas être confondues, on pourra trouver dans [126] une comparaison plus détaillée

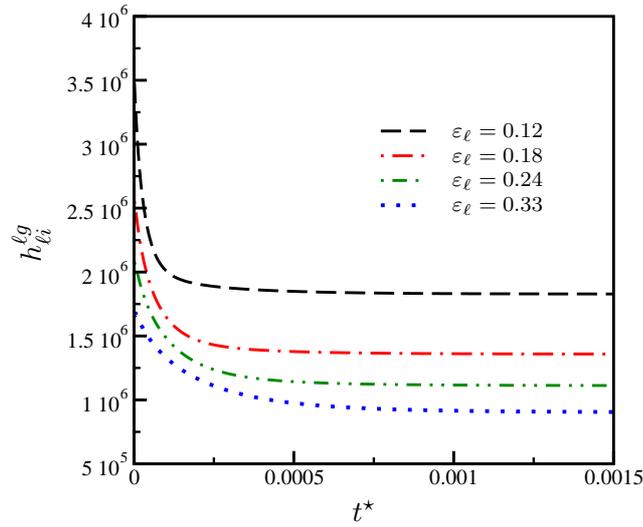


Figure 5.7: Evolutions du coefficient d'échange  $h_{li}^{\ell g}$  pour différentes fractions volumiques

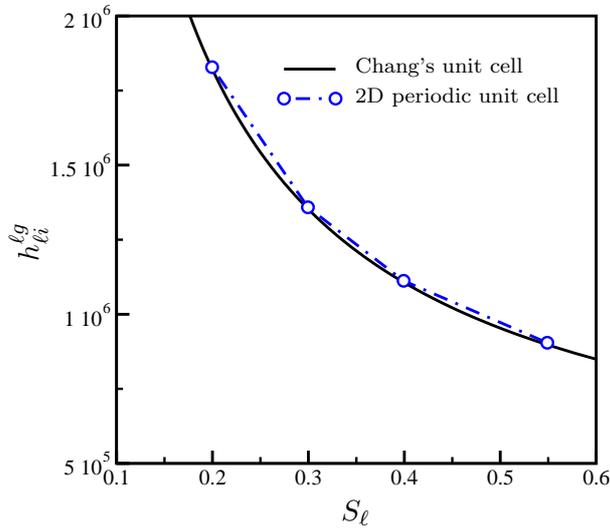


Figure 5.8: Coefficient d'échange  $h_{li}^{\ell g}$

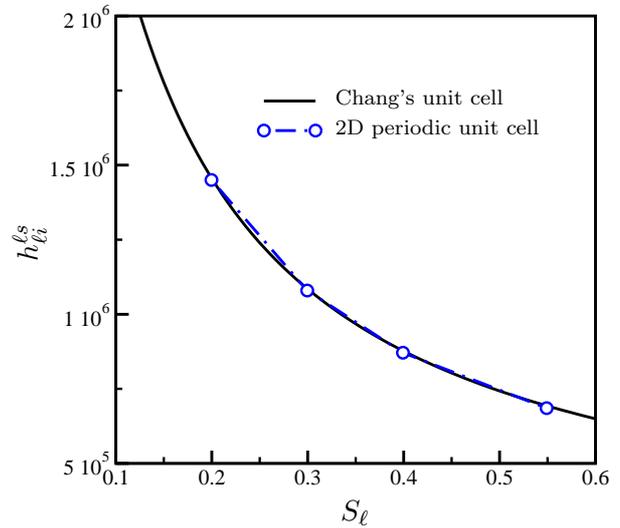


Figure 5.9: Coefficient d'échange  $h_{li}^{\ell s}$

### 5.3 Cellules unitaires 2D : cas purement diffusif

Le calcul des propriétés effectives sur des cellules unitaires 2D dans le cas purement diffusif constitue une étape importante dans le sens où ce type de cellule fournit un estimateur de la borne inférieure, c'est-à-dire pour un nombre de Péclet nul, des propriétés effectives.

Dans le cas purement diffusif, il est légitime d'assimiler les interfaces liquide-vapeur à des sphères, *i.e.* cylindres en 2D, et une simulation numérique directe de l'écoulement est inutile. Contrairement aux cellules considérées jusqu'à présent, nous présentons dans ce paragraphe une cellule unitaire pour laquelle les deux phases, liquide et vapeur, sont mouillantes. Les deux types de mouillabilité sur une même cellule unitaire traduisent, même si la cellule considérée reste schématique, une certaine structuration de l'écoulement pouvant provenir de phénomènes physiques (*e.g.* coalescence ou rupture) ou des hétérogénéités du milieu (*e.g.* variation de la porosité ou de la source volumique).

### 5.3.1 Répartition des phases pour un arrangement de cylindres décalés

On se place ici dans le cas où les deux phases, liquide et vapeur, sont mouillantes. La cellule unitaire représentée sur la figure (5.10) représente une telle répartition des phases pour un arrangement de cylindres décalés. Bien que cette répartition soit complètement différente de la répartition où une seule des deux phases est mouillante, nous reprenons les terminologies SLG et SGL pour distinguer deux types de configurations. Nous désignerons par SLG la configuration où la particule solide centrale est mouillée par le liquide et par SGL la configuration où la particule solide centrale est mouillée par la vapeur.

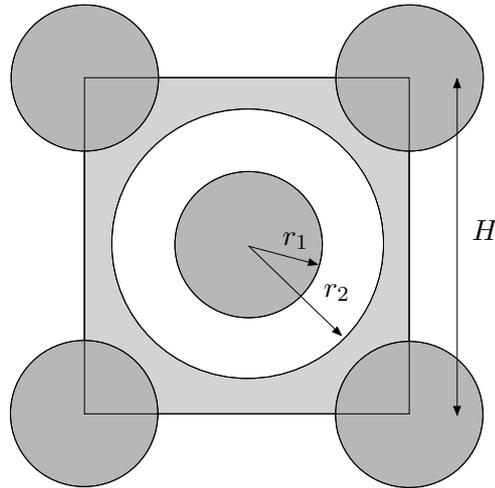


Figure 5.10: Cellule unitaire représentative d'un arrangement de cylindres décalés avec deux phases mouillantes - Configuration "SGL"

La longueur  $H$ , représentant la période, désigne la longueur caractéristique de la cellule unitaire et  $r_1$  est la longueur caractéristique associée à la phase solide. Pour cette cellule, il est encore possible de calculer analytiquement les longueurs caractéristiques en fonction des fractions volumiques. Dans le cas où la particule solide centrale est mouillée par la vapeur, configuration SGL, on a :

$$r_1 = H \sqrt{\frac{\varepsilon_s}{2\pi}}, \quad r_2 = H \sqrt{\frac{2\varepsilon_g + \varepsilon_s}{2\pi}} \quad (5.28)$$

Les problèmes de fermeture ont été résolus numériquement pour les deux configurations SLG et SGL. Les propriétés thermiques sont celles données dans le tableau (5.1). La longueur caractéristique de la cellule est donnée par  $H = 10^{-2}$  m et la porosité vaut  $\varepsilon = 0.7$ . Dans le cas de la configuration SGL, la fraction volumique vapeur  $\varepsilon_g$  a été fixée à 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.55 et 0.59. Pour la configuration SLG, nous avons repris les mêmes valeurs mais pour la fraction volumique liquide  $\varepsilon_\ell$ . La figure (5.11) représente les triangulations  $\mathcal{I}_h$  de la cellule dans le cas de la configuration SGL pour les deux valeurs extrêmes  $\varepsilon_g = 0.1$  et  $\varepsilon_g = 0.59$ . Sur la figure (5.12), nous avons représenté l'inconnue de fermeture  $S$  du problème I à l'état stationnaire pour les deux configurations et pour une saturation quasi-identique.

### 5.3.2 Coefficients d'échange

Comme nous l'avons signalé en introduction de ce paragraphe, la cellule considérée ici est plus complexe que les cellules considérées jusqu'à présent puisque les deux phases sont mouillantes. Nous avons vu dans le chapitre 3 que lorsqu'une phase était parfaitement mouillante, la condition d'équilibre thermodynamique local se traduisait par un découplage, conduisant à décomposer un problème de fermeture en deux sous-problèmes indépendants, et apportait des simplifications

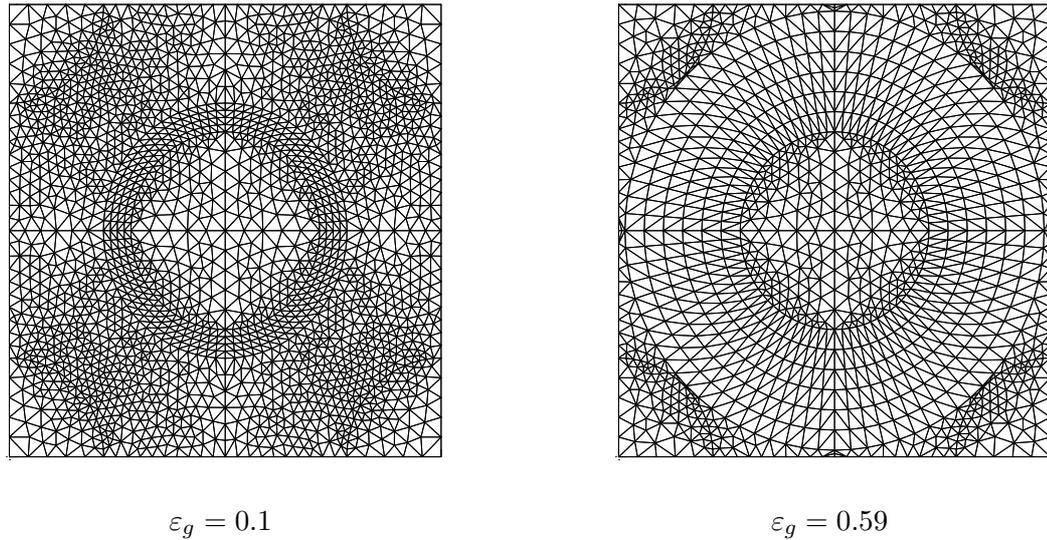


Figure 5.11: Triangulations  $\mathcal{I}_h$  pour  $\varepsilon_g = 0.1$  et  $\varepsilon_g = 0.59$  - Configuration SGL

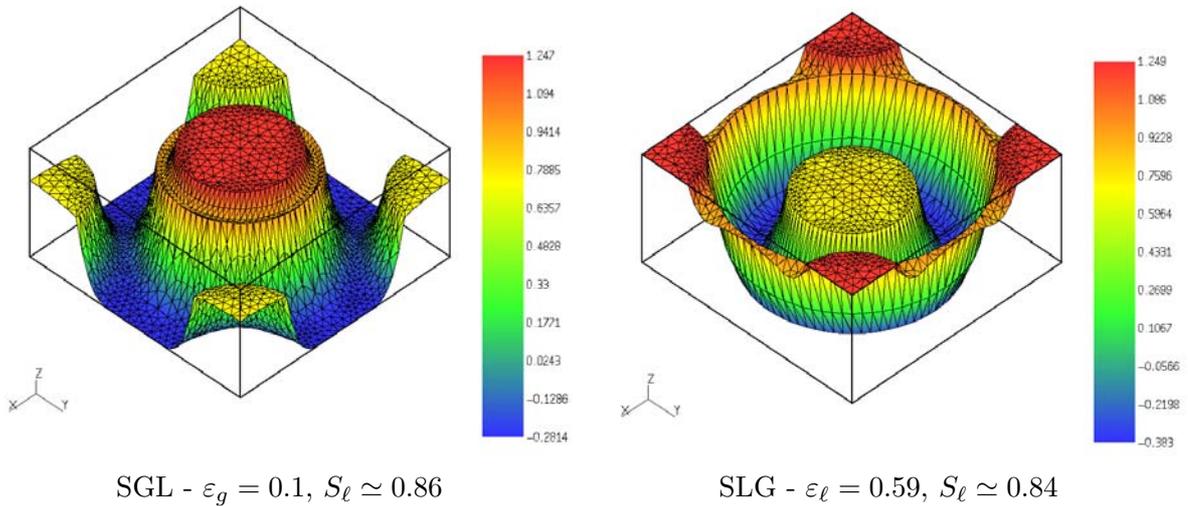


Figure 5.12: Inconnue de fermeture  $S$  à l'état stationnaire pour le problème I - Configurations SGL et SLG pour une saturation quasi-identique

importantes. En particulier, nous avons vu qu'un bon nombre de coefficients d'échange était nul et, par suite, que les termes d'échange dans les équations de transport macroscopiques pouvaient s'écrire d'une manière plus simple en comparaison du modèle complet non simplifié. Nous avons également remarqué que les termes d'échange entre phases du modèle simplifié étaient formellement identiques aux termes d'échange des modèles à trois températures existants. Il apparaît ainsi important de savoir si ces simplifications constituent un cas particulier ou si elles peuvent s'étendre à des configurations plus générales où les deux phases sont mouillantes.

La résolution numérique des problèmes I à III pour les configurations SGL et SLG où les deux phases sont mouillantes vient confirmer les simplifications obtenues pour les cellules simples. En effet, les coefficients qui étaient nuls pour les cellules simples sont ici numériquement négligeables devant les autres coefficients d'échanges (de l'ordre de trois à quatre décades). Il est possible que cette caractéristique soit spécifique aux cellules symétriques qui, rappelons le, peuvent être extrêmement complexes, mais nous ne sommes pas actuellement en mesure de le montrer formellement. Ce résultat est relativement important car il signifie que les simplifications apportées au

modèle macroscopique au regard des échanges, présentées dans le chapitre 3, ont un caractère assez général, tout du moins dans le régime diffusif. Nous reviendrons sur ces simplifications un peu plus loin dans le cas où les nombres de Péclet sont non nuls.

Les autres coefficients d'échange, qui étaient non nuls pour les cellules simples, sont représentés sur les figures (5.13) à (5.20) en fonction de la saturation  $S_\ell$  pour les deux configurations SGL et SLG. Nous avons également représenté sur ces figures les coefficients obtenus analytiquement pour la cellule de Chang (version cylindrique) pour une même porosité  $\varepsilon$  mais avec une longueur caractéristique  $R$  telle que  $R^2 = H^2/\pi$  (cf. paragraphe 5.2.2) où  $H$  est la longueur représentée sur la figure (5.10).

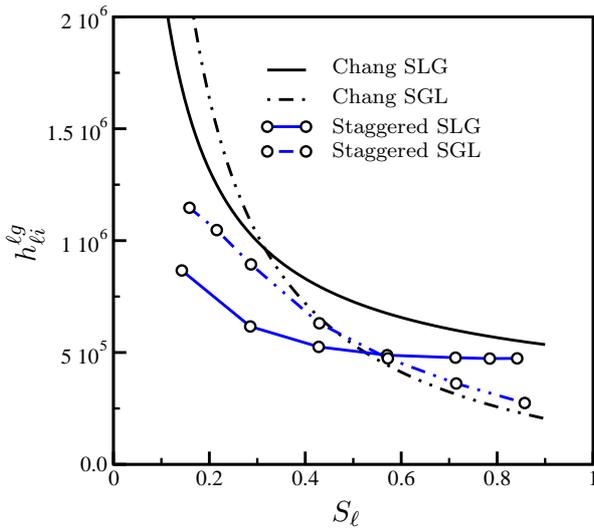


Figure 5.13: Coefficient d'échange  $h_{\ell i}^{\ell g}$

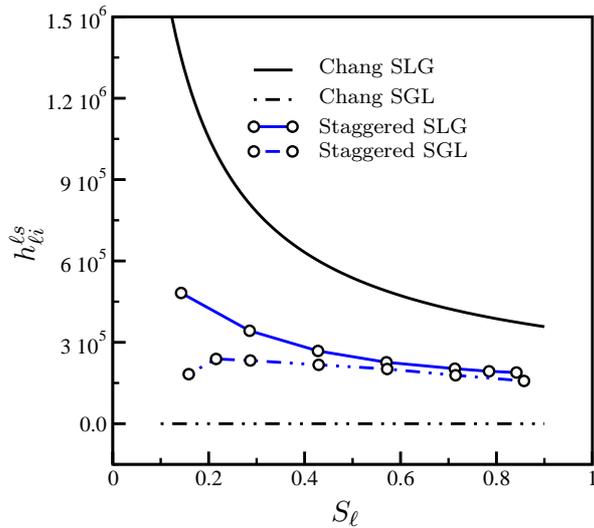


Figure 5.14: Coefficient d'échange  $h_{\ell i}^{\ell s}$

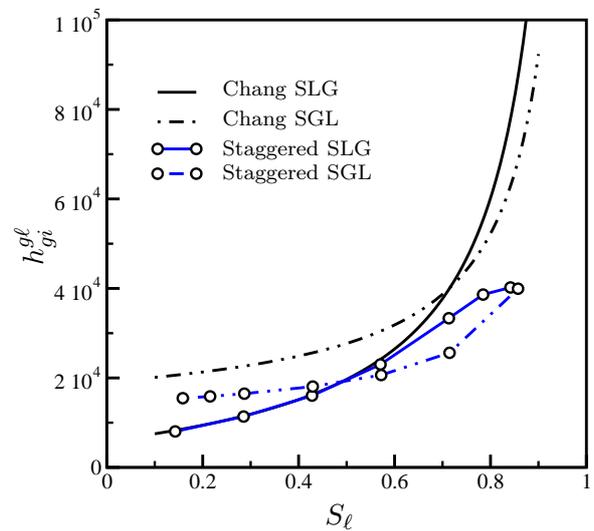


Figure 5.15: Coefficient d'échange  $h_{g i}^{g \ell}$

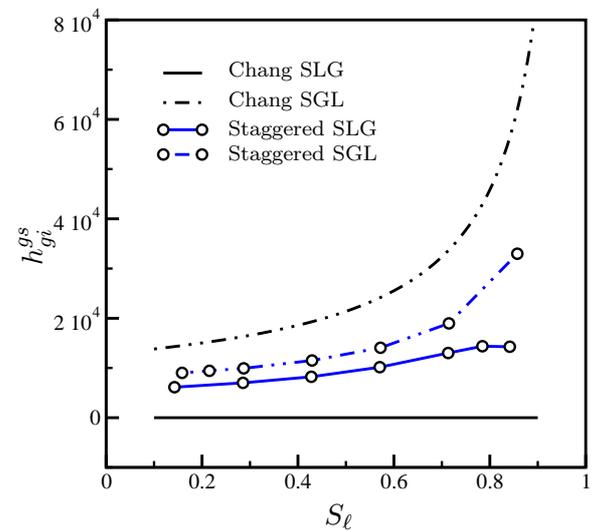
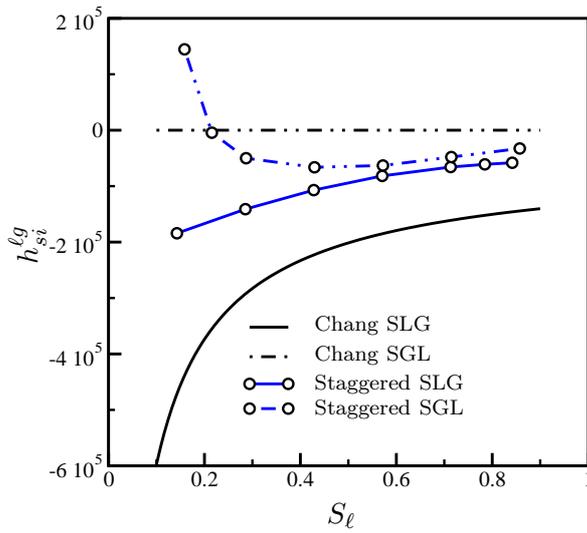
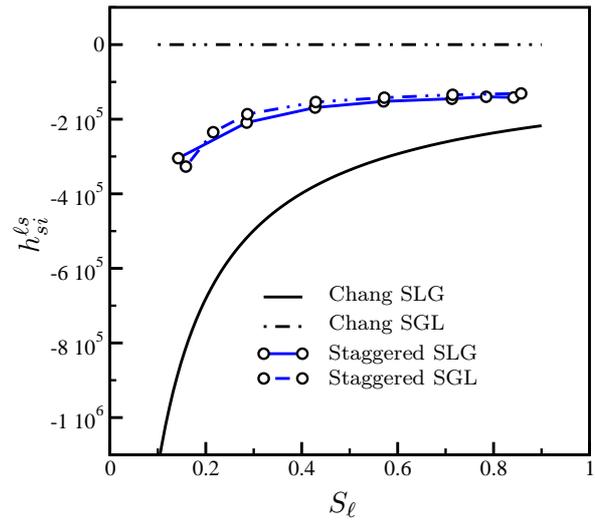
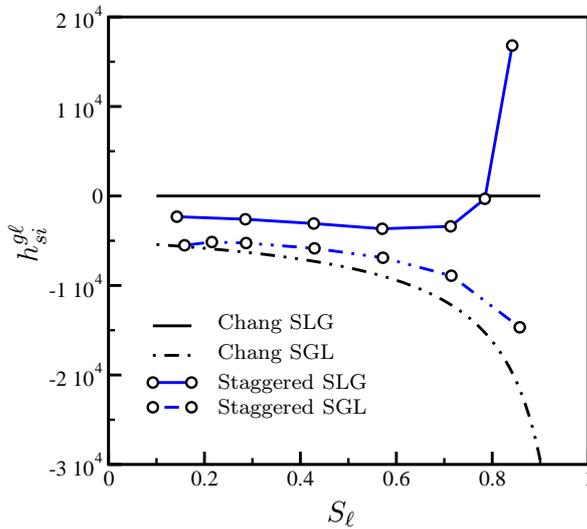
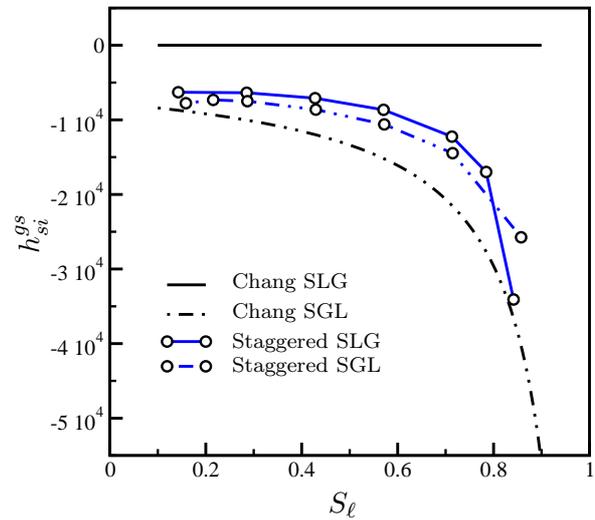


Figure 5.16: Coefficient d'échange  $h_{g i}^{g s}$

Les résultats présentés sur les figures (5.13) à (5.20) montrent que malgré la relative simplicité de la cellule de Chang, elle fournit un bon estimateur des coefficients d'échange dans le cas de cellules plus complexes. On constate en effet que les valeurs des coefficients d'échange ont le même ordre de grandeur et que les évolutions de ces coefficients en fonction de la saturation sont sensiblement les mêmes. D'une manière générale, pour l'ensemble des coefficients, les résultats

Figure 5.17: Coefficient d'échange  $h_{si}^{lg}$ Figure 5.18: Coefficient d'échange  $h_{si}^{ls}$ Figure 5.19: Coefficient d'échange  $h_{si}^{gl}$ Figure 5.20: Coefficient d'échange  $h_{si}^{gs}$ 

obtenus pour la cellule de Chang dans les configurations limites SLG et SGL constituent des bornes inférieures et supérieures pour les résultats obtenus dans des configurations où les deux phases sont mouillantes. Nous rappelons ici que la terminologie SLG et SGL pour l'arrangement de cylindres décalés a été introduite pour distinguer deux types de configurations mais ne signifie pas qu'une phase est parfaitement mouillante.

Nous observons ici pour une même saturation, comme pour les cellules simples, un impact relativement important de la répartition des phases sur les coefficients d'échange. Cet impact est d'autant plus marqué pour les valeurs faibles ou fortes de la saturation et rappelle qu'il est insuffisant d'estimer les coefficients d'échange uniquement par une fonction *simple* de la saturation.

Plus précisément, les paramètres les plus importants traduisant l'influence de la répartition des phases sont, comme l'ont souligné Ahmadi *et al.* [1], les longueurs caractéristiques  $\ell_g$  et  $\ell_\ell$  (nombre de Nusselt inversement proportionnel au carré d'une longueur caractéristique) et, les relations entre ces longueurs, les fractions volumiques et les surfaces d'échange spécifiques ne sont pas nécessairement simples. A titre d'exemple, si on se place dans le cas d'une faible saturation,

on peut remarquer que si les deux répartitions SLG et SGL peuvent conduire à des fractions volumiques et des surfaces d'échange solide-liquide et solide-vapeur identiques, en revanche les longueurs caractéristiques de la phase liquide sont très différentes puisque dans le cas SGL,  $\ell_\ell$  est pratiquement constante puisqu'elle est associée à la distance entre deux particules solides, tandis que dans le cas SLG,  $\ell_\ell$  est associée à l'épaisseur du film liquide et peut donc devenir beaucoup plus petite.

Comme nous l'avons indiqué, la cellule de Chang fournit un bon estimateur des coefficients d'échange. Cependant, on peut remarquer une différence de comportement des coefficients lorsque la saturation se rapproche de ses bornes inférieure ou supérieure, correspondant respectivement à une région représentative saturée en vapeur ou en liquide. En effet, dans le cas des résultats analytiques obtenus pour la cellule de Chang, certains coefficients ont un comportement singulier pour les valeurs limites de la saturation alors que les résultats présentés ici semblent indiquer que ces coefficients ne sont pas singuliers et gardent une valeur finie. Cette différence de comportement des coefficients d'échange n'est en fait qu'*apparente* dans le sens où dans les deux cas, les échanges sont tels que lorsqu'une phase devient résiduelle, son continuum associé à l'échelle macroscopique est en équilibre thermique local avec le quatrième continuum sur lequel est définie la température de saturation. Prenons l'exemple de la phase liquide, l'équation de transport pour  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  s'écrit, après simplification des termes d'échange minoritaires, sous la forme :

$$\begin{aligned} \varepsilon_\ell (\rho C_p)_\ell \frac{\partial \langle T_\ell \rangle^\ell}{\partial t} + \dots = \\ \dots - \left( h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s} - \dot{m} C_{p\ell} \right) \left( \langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat} \right) - \left( h_{s i}^{\ell g} + h_{s i}^{\ell s} \right) \left( \langle T_s \rangle^s - T^{sat} \right) \end{aligned} \quad (5.29)$$

Les coefficients d'échange  $h = h_{\ell i}^{\ell g} + h_{\ell i}^{\ell s}$  et  $h = h_{s i}^{\ell g} + h_{s i}^{\ell s}$  sont représentés sur les figures (5.21) et (5.22) en fonction de la saturation pour les deux cellules unitaires. Ces figures montrent clairement que pour les résultats analytiques obtenus pour la cellule de Chang et les résultats numériques obtenus pour un arrangement de cylindres décalés, le terme d'échange entre  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  et  $T^{sat}$  dans (5.29) devient prédominant lorsque  $S_\ell$  tend vers 0, *i.e.* lorsque la phase liquide devient résiduelle. Le cas où  $S_\ell$  tend vers 1 est symétrique et conduit également à la condition d'équilibre thermique local  $\langle T_g \rangle^g \simeq T^{sat}$  lorsque la phase vapeur est résiduelle.

## 5.4 Influence du Péclet

Nous avons considéré jusqu'à présent différentes cellules unitaires et différentes répartitions de phases pour des problèmes purement diffusifs. Nous abordons dans cette partie la détermination des coefficients d'échange pour des cellules unitaires 2D en considérant des nombres de Péclet non nuls.

Notre objectif ici n'est pas de présenter une comparaison avec les corrélations utilisées pour les coefficients d'échange dans les modèles à trois équations existants. Cela nécessiterait un nombre plus important de configurations locales. D'autre part, cela nécessiterait également d'établir une correspondance claire entre les coefficients d'échange du modèle et ceux des modèles existants.

En effet, si le modèle macroscopique obtenu constitue une généralisation des modèles à trois températures existants, il semble cependant que les couplages entre les différents continums en termes d'échanges ne puissent pas être représentés de manière aussi simples que dans les modèles traditionnels. Un premier travail a été mené par Béchaud *et al.* [16] visant à écrire les termes d'échange sous la forme traditionnelle. Les développements menés dans cette référence montrent clairement que si les échanges peuvent s'écrire sous une forme identique à celle des modèles existants, en revanche les relations entre les trois équations de transport en termes de flux (*i.e.*

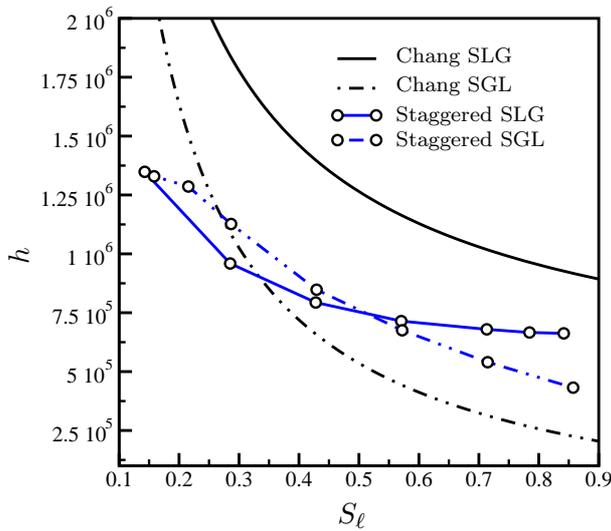


Figure 5.21: Coefficient  $h = h_{li}^{lg} + h_{li}^{ls}$  caractérisant l'échange  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$  dans l'équation (5.29) pour  $\langle T_\ell \rangle^\ell$

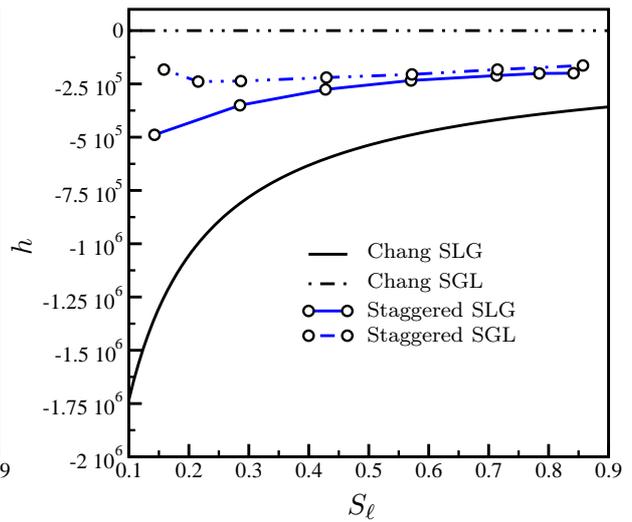


Figure 5.22: Coefficient  $h = h_{si}^{lg} + h_{si}^{ls}$  caractérisant l'échange  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$  dans l'équation (5.29) pour  $\langle T_\ell \rangle^\ell$

répartition des coefficients d'échange) ne sont pas aussi simples. Contrairement aux systèmes à deux phases, les échanges dans un système à trois phases représenté par quatre continums (solide, liquide, vapeur et *interface*), semblent très complexes et les premiers développements menés dans [16] sont instructifs et mériteraient d'être approfondis pour mieux comprendre la nature de ces couplages.

L'objectif de ces premiers calculs est plutôt de savoir si l'on peut confirmer les simplifications obtenues dans le cas purement diffusif et s'il est possible d'observer des tendances pour les coefficients d'échange pour quelques configurations sur la base d'une simulation numérique directe de l'écoulement diphasique. L'intérêt de la démarche menée dans ce travail est de pouvoir examiner, sur la base d'une relation explicite (problèmes de fermeture), l'impact de différents paramètres comme la géométrie, le régime d'écoulement et la topologie des interfaces, sur les coefficients effectifs.

#### 5.4.1 De la simulation numérique directe aux propriétés effectives

La première étape consiste, pour une configuration locale initiale donnée, à résoudre numériquement les équations du modèle Boussinesq de Cahn-Hilliard à partir du schéma présenté au chapitre 4. Ces équations sont résolues numériquement sur une cellule unitaire bidimensionnelle avec des conditions aux limites périodiques dans les deux directions. Le terme moteur de l'écoulement est représenté par un gradient de pression moyen sur la cellule selon une des deux directions. Ainsi, si on note  $p$  la pression dynamique, elle est écrite sous la forme :

$$p = \langle \nabla p \rangle \cdot \mathbf{x} + \tilde{p} \quad (5.30)$$

où  $\langle \nabla p \rangle$  est le gradient de pression moyen sur la cellule et où  $\tilde{p}$  est périodique et représente les fluctuations de pression dans la cellule.

A partir d'une configuration initiale qui fixe les fractions volumiques des phases liquide et vapeur, le problème diphasique est résolu jusqu'à un état stationnaire. Cette solution stationnaire dépend non seulement de la géométrie de la matrice solide et du gradient de pression moyen  $\langle \nabla p \rangle$  mais

également de la porosité  $\varepsilon$ , de la saturation  $S_\ell$ , de la densité moyenne  $\rho$  de l'approximation de Boussinesq, des viscosités  $\eta_\ell$  et  $\eta_g$  et de la tension superficielle  $\sigma$ .

A l'état stationnaire, les points  $(x, y)$  définissant la topologie des interfaces sont ensuite identifiés à partir des valeurs du paramètre d'ordre puis, une nouvelle triangulation  $\mathcal{I}_h$  est définie pour la cellule unitaire s'appuyant sur les contours des interfaces. Le champ de vitesse calculé sur la triangulation initiale est ensuite projeté sur cette nouvelle triangulation. Enfin, les problèmes de fermeture I à III définissant les coefficients d'échange sont résolus numériquement jusqu'à l'état stationnaire.

La figure (5.23) représente une simulation numérique directe qui illustre la première étape. A partir d'une triangulation  $\mathcal{I}_h^{(1)}$  de la cellule unitaire et d'une configuration initiale (a), qui correspond ici à une configuration SGL pour une cellule de type Chang dans le cas purement diffusif, un gradient de pression moyen horizontal est imposé. A partir de l'état stationnaire (j), où l'écoulement est quasi-statique, une nouvelle triangulation  $\mathcal{I}_h^{(2)}$  s'appuyant sur la topologie des interfaces est définie. Le champ de vitesse à l'état (j) est alors projeté sur  $\mathcal{I}_h^{(2)}$  puis, les problèmes de fermeture sont résolus.

### 5.4.2 Cellules unitaires

Nous nous sommes intéressés principalement à la cellule unitaire associée à un arrangement de cylindres alignés dans le cas d'une phase parfaitement mouillante. Pour cette cellule, les cas où les deux phases sont mouillantes sont synonymes de lignes triples quasi-statiques et, bien que l'outil de simulation numérique directe présenté au chapitre 4 soit capable de prendre en compte ces situations, nous avons décidé dans une première approche de ne pas considérer ces cas.

Les deux répartitions limites SGL et SLG sont étudiées ici. Nous les désignerons respectivement par "In-Line SGL" et "In-Line SLG". Nous avons également mené un nombre limité de calculs pour une cellule unitaire associée à un arrangement de cylindres décalés où les deux phases sont mouillantes et où la particule centrale est mouillée par la vapeur. Nous désignerons cette dernière par "Staggered SGL".

Etant donné le nombre important de paramètres, pour le problème de l'écoulement et les problèmes de fermeture, nous avons fait le choix de nous intéresser à l'influence d'un nombre limité d'entre eux et d'étudier l'influence du gradient de pression moyen  $\langle \nabla p \rangle$ , *i.e.* de l'intensité de l'écoulement, pour quelques saturations  $S_\ell$  données. Les autres propriétés ont été fixées et sont regroupées dans le tableau (5.2). Les propriétés thermiques sont celles utilisées précédemment pour les cas purement diffusifs.

Cellules unitaires	$\varepsilon$	$H[\text{m}]$
	0.7	0.01
Densité $\rho$ [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ]	1	
Viscosités $\eta$ [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ]	$\eta_g$	$\eta_\ell$
	$10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$
Tension interfaciale $\sigma$ [ $\text{N} \cdot \text{m}^{-1}$ ]	$10^{-3}$	

Tableau 5.2: Paramètres pour la simulation numérique directe

Des exemples de solutions stationnaires  $S$  des problèmes de fermeture I à III sont représentés sur les figures (5.24) et (5.28) pour les cellules "In-Line SGL" et "Staggered SGL". S'il est évidemment difficile de discuter de l'impact des champs  $S$  sur les déviations à partir de ces figures, on peut cependant remarquer le rôle important de l'interface liquide-vapeur qui, comme nous l'avons signalé, introduit un découplage pour  $S$  et par suite pour les déviations. Cela est clairement

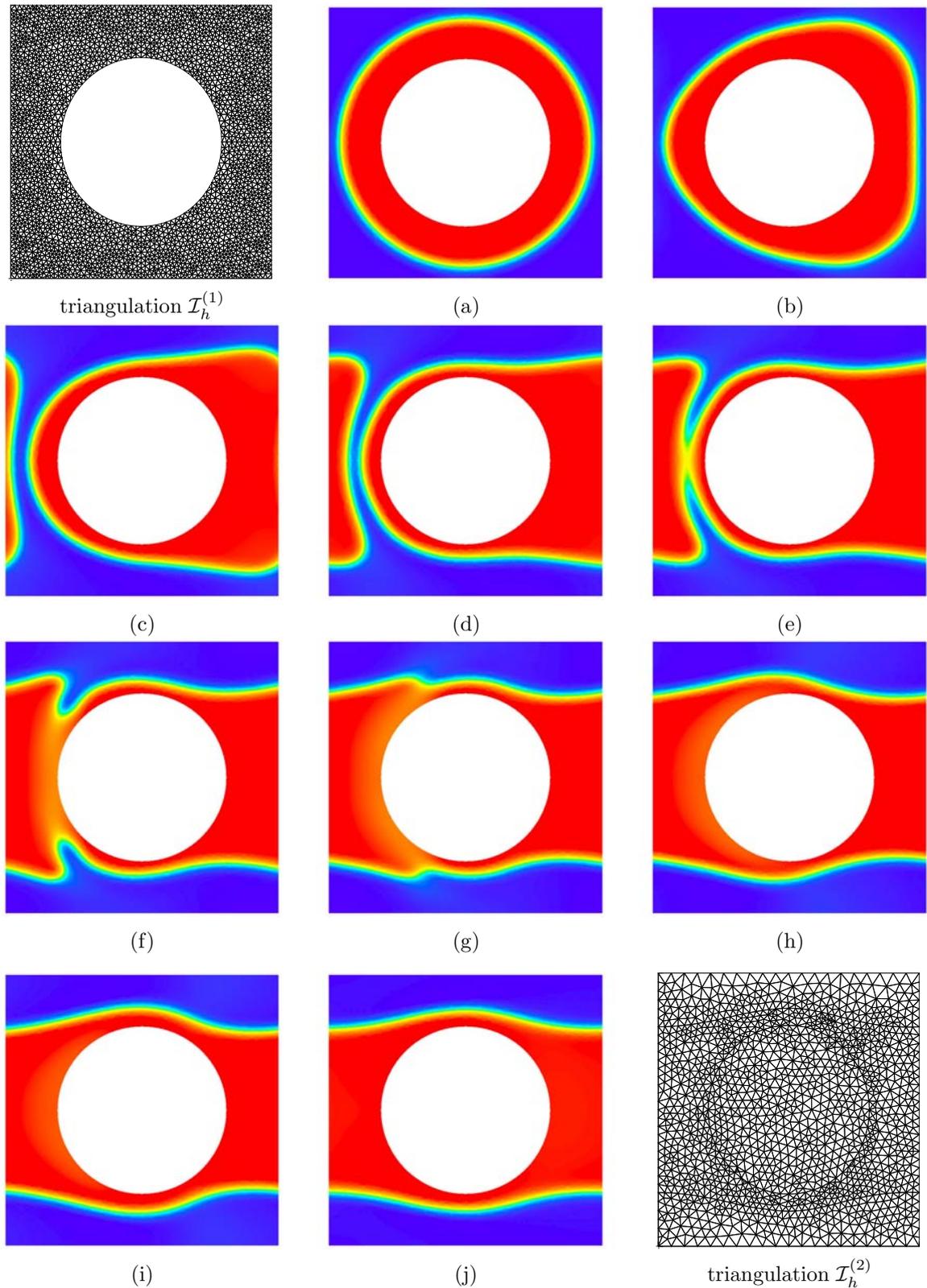


Figure 5.23: Simulation numérique directe sur une cellule unitaire associée à un arrangement de cylindres alignés - cellule "In-Line SGL". Triangulation  $\mathcal{I}_h^{(1)}$  de la cellule pour la SND. (a) : configuration initiale. (b)-(i) : instantanés de l'évolution des interfaces sous l'action d'un gradient de pression moyen horizontal. (j) : état stationnaire. Nouvelle triangulation  $\mathcal{I}_h^{(2)}$  incluant les contours des interfaces pour la résolution des problèmes de fermeture

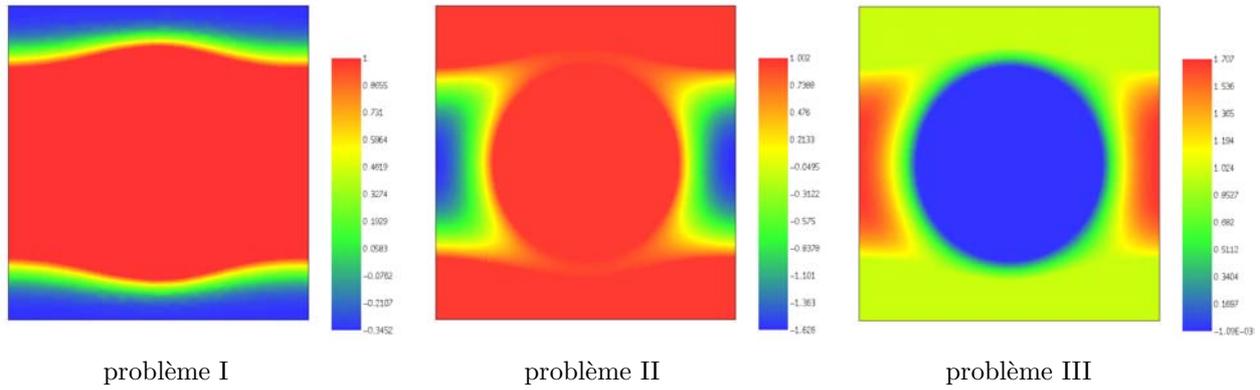


Figure 5.24: Cellule "In-Line SGL" : champs  $S$  à l'état stationnaire.  $\varepsilon_\ell = 0.33$ ,  $\varepsilon_g = 0.37$ ,  $Pe_\ell = 2480$ ,  $Pe_g = 8.5$

illustré par la figure (5.24) lorsqu'une phase est parfaitement mouillante. On pourra également remarquer que pour les valeurs données dans le tableau (5.2),  $\kappa_{\ell s} \ll 1$  et  $\kappa_{gs} \ll 1$ , les déviations dans la phase solide sont très faibles, ce qui correspond bien à un milieu très conducteur.

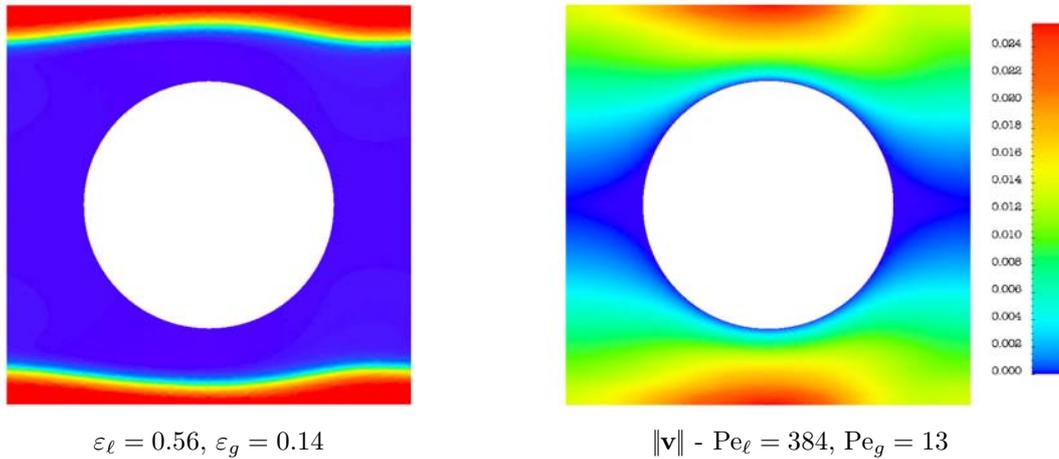


Figure 5.25: Cellule unitaire pour un arrangement de cylindres alignés - Configuration SLG

### 5.4.3 Coefficients d'échange

Avant de présenter les résultats pour les coefficients d'échange, il faut rappeler que notre objectif est de proposer un modèle dans lequel les propriétés effectives sont fonctions des paramètres moyens caractérisant l'écoulement. Ainsi, nous examinons l'impact de différents paramètres, choisis *arbitrairement* (saturation, vitesses moyennes, ...), sur les propriétés effectives.

Comme nous l'avons vu, ces paramètres sont nombreux et même si nous en avons fixé un certain nombre, l'analyse reste complexe. Par exemple, les corrélations utilisées dans le cadre des modèles traditionnels font généralement intervenir de manière indépendante les nombres de Reynolds  $Re_\beta$  et de Prandtl  $Pr_\beta$  pour chaque phase fluide  $\beta = g, \ell$ . Afin de rendre plus simple l'analyse de l'impact des différents paramètres, nous nous sommes placés dans le cadre des écoulements de Stokes pour lesquels les vitesses  $\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta$  ne dépendent pas du nombre de Reynolds. Dans ce cas, le nombre de paramètres est moins important puisque l'on se ramène à un nombre de Péclet  $Pe_\beta = Pr_\beta Re_\beta$  pour chaque phase fluide.

Ainsi, nous examinons principalement l'influence de la configuration locale (topologie des interfaces, saturation, ...) et du nombre de Péclet sur les propriétés effectives où le nombre de Péclet

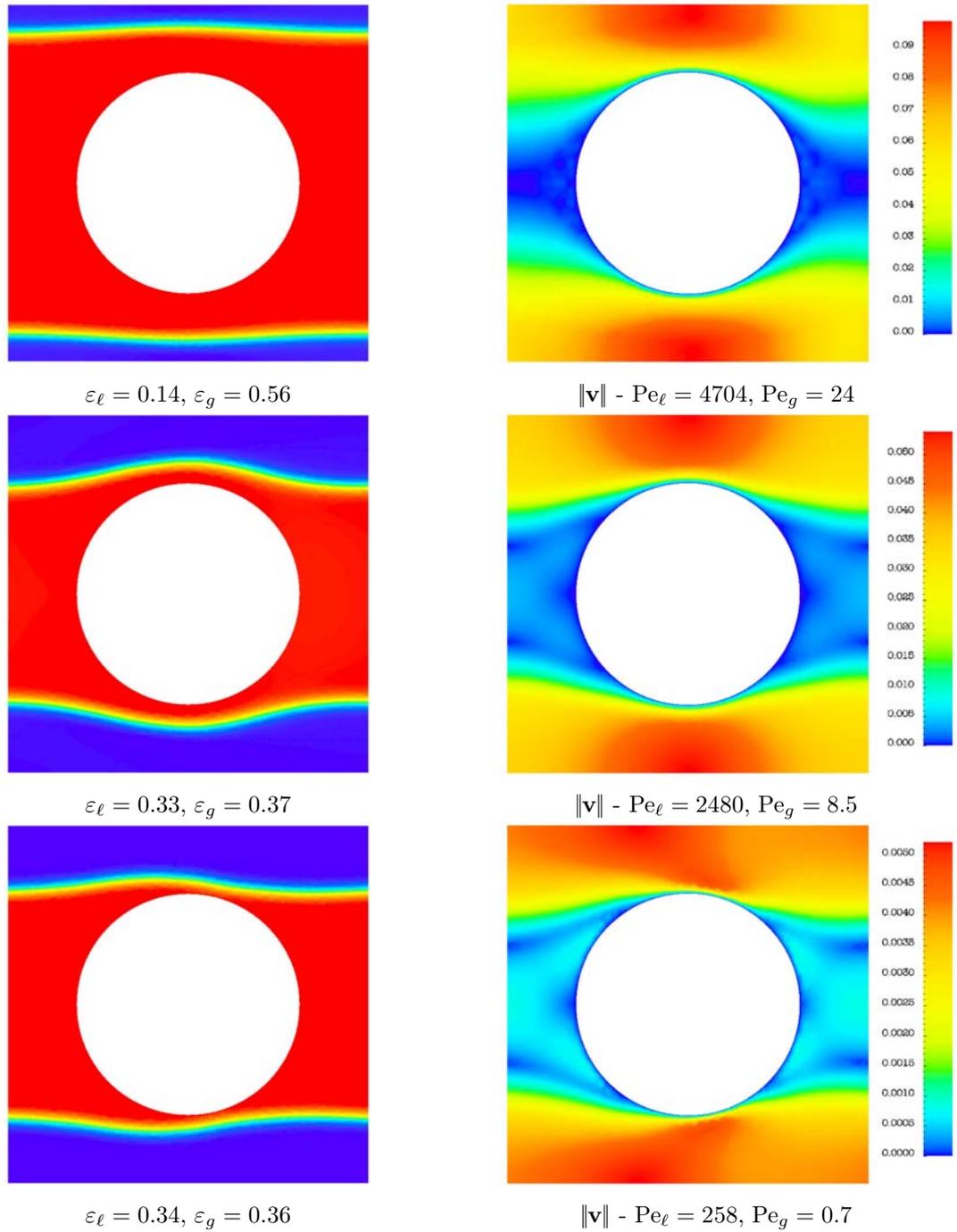


Figure 5.26: Cellule unitaire pour un arrangement de cylindres alignés - Configuration SGL

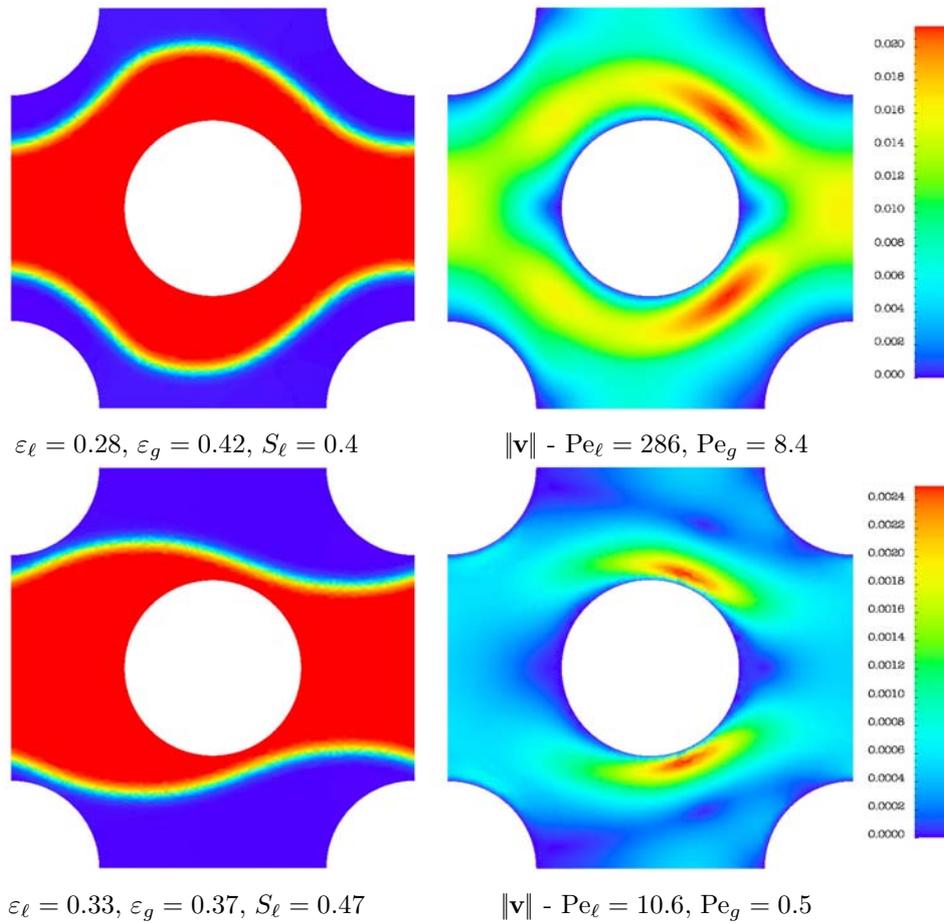


Figure 5.27: Cellule unitaire pour un arrangement de cylindres décalés - Configuration "SGL"

associé à la phase  $\beta$  est construit à partir de la longueur caractéristique  $H$  de la cellule unitaire :

$$\text{Pe}_\beta = (\rho C_p)_\beta \frac{\|\langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta\| H}{k_\beta}, \quad \beta = g, \ell \quad (5.31)$$

Dans un premier temps, notre objectif est de savoir s'il est possible d'observer des tendances pour les coefficients dans différentes configurations de l'écoulement et différents Péclets.

Les coefficients d'échange sont représentés en fonction de la saturation sur les figures (5.29) à (5.32) pour quelques nombres de Péclet. Comme précédemment, nous avons également représenté les coefficients obtenus analytiquement à partir de la version cylindrique de la cellule de Chang avec  $R^2 = H^2/\pi$ . Les coefficients sont adimensionnés par  $l_c^2/k_\beta$  où  $l_c$  est la longueur caractéristique de la cellule,  $l_c = H$  pour les résultats numériques et  $l_c = R$  pour la cellule de Chang, et  $k_\beta = k_\ell$  pour les coefficients intervenant dans l'équation pour  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  et  $k_\beta = k_g$  pour ceux intervenant dans l'équation pour  $\langle T_g \rangle^g$ . Si ces premiers résultats ne permettent pas, pour l'instant, d'écrire des corrélations pour les coefficients d'échange, ils sont cependant instructifs et viennent confirmer certaines observations faites précédemment.

D'une part, les coefficients qui étaient nuls ou numériquement négligeables dans le cas diffusif restent numériquement négligeables pour les configurations considérées, indépendamment des fractions volumiques et du régime d'écoulement. Ils ne sont donc pas représentés sur ces figures. Si ces résultats numériques ne peuvent pas tenir lieu de démonstration rigoureuse, il semblerait cependant que les simplifications, en termes d'échanges, présentées au chapitre 3 soient assez générales. Ce résultat est très important puisqu'il permet, comme nous l'avons vu, d'apporter des simplifications importantes au modèle et de rendre *plus simple* les couplages entre les continums.

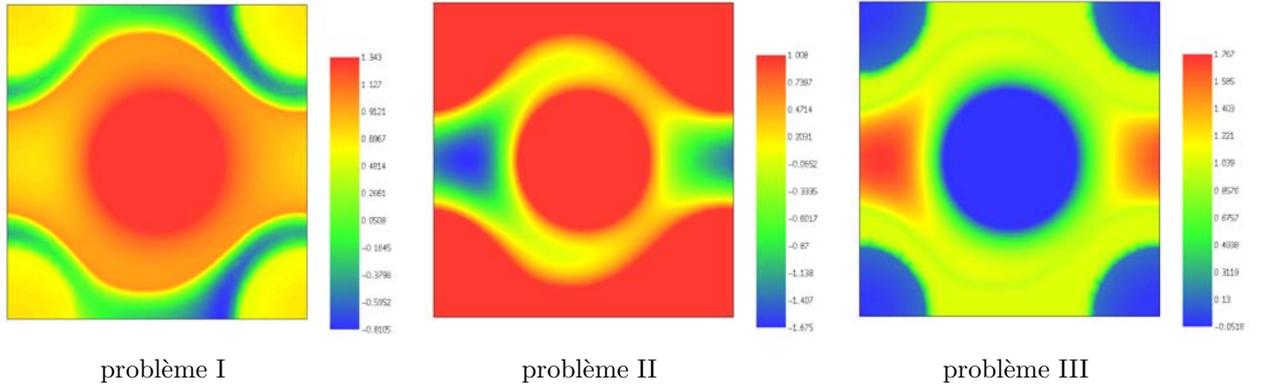


Figure 5.28: Cellule "Staggered SGL" : champs  $S$  à l'état stationnaire.  $\varepsilon_\ell = 0.28$ ,  $\varepsilon_g = 0.42$ ,  $Pe_\ell = 286$ ,  $Pe_g = 8.4$

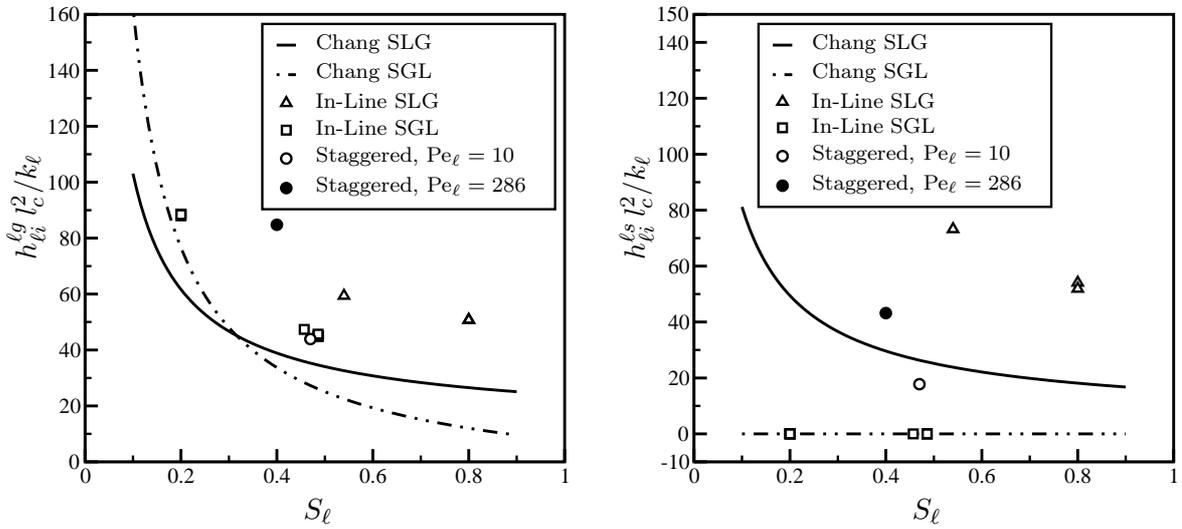


Figure 5.29: Coefficients adimensionnés  $h_{li}^{lg}$  et  $h_{li}^{ls}$ . In-Line SLG :  $201 \leq Pe_\ell \leq 663$ , In-Line SGL :  $258 \leq Pe_\ell \leq 4704$

D'autre part, si les figures (5.29) à (5.32) montrent que les comportements des coefficients en fonction de la saturation sont similaires à ceux obtenus précédemment, elles viennent aussi confirmer le rôle important des longueurs caractéristiques sur les coefficients. Les figures (5.32) et (5.33) illustrent bien cette remarque lorsqu'on se reporte aux figures (5.26) et (5.27) représentant la topologie des interfaces et l'écoulement pour les cellules appelées respectivement "In-Line SGL" et "Staggered SGL". Il semblerait en effet que l'épaisseur minimale du film de vapeur au contact de la surface solide joue un rôle déterminant pour le coefficient caractérisant le terme d'échange  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$  dans l'équation pour  $\langle T_g \rangle^g$ . Ce type de comportement ne peut pas être mis en évidence sur des cellules unitaires simples, telle que la cellule stratifiée, et illustre clairement l'intérêt de la simulation numérique directe à l'échelle locale. On peut en particulier se rendre compte que la surface d'échange liquide-vapeur, les longueurs caractéristiques et l'intensité de l'écoulement (*i.e.* les nombres de Péclet) ne sont pas des paramètres indépendants. Ces résultats rappellent que les relations entre saturation, surfaces d'échanges et longueurs caractéristiques ne sont pas nécessairement simples.

Nous avons représenté sur les figures (5.34) et (5.35) l'évolution de deux coefficients, le coefficient  $(h_{li}^{lg} + h_{li}^{ls})$  caractérisant l'échange  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$  dans l'équation pour  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  ainsi que le coefficient  $(h_{gi}^{gl} + h_{gi}^{gs})$  caractérisant l'échange  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$  dans l'équation pour  $\langle T_g \rangle^g$ . Ici encore, on rappelle

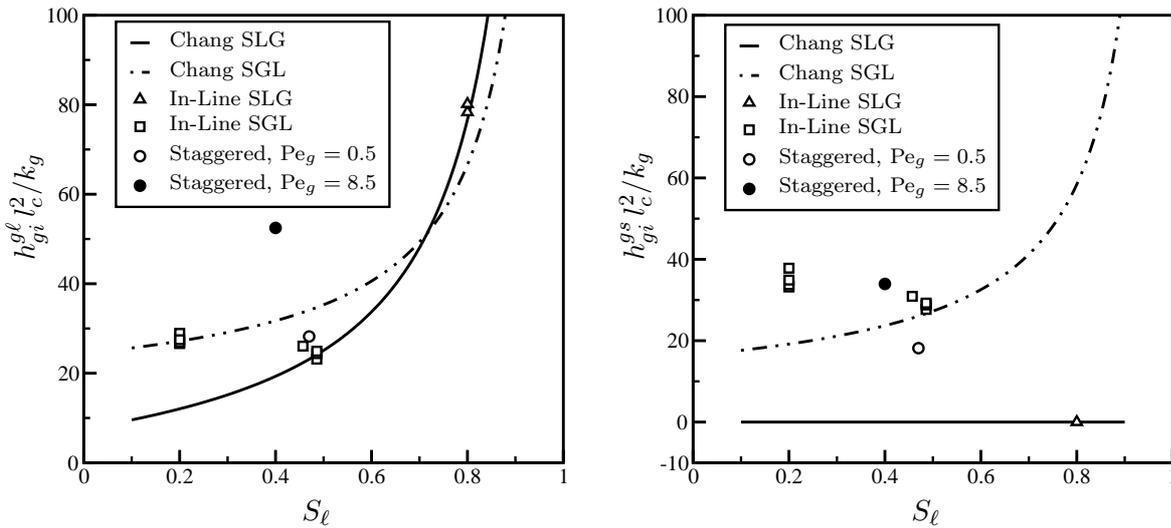


Figure 5.30: Coefficients adimensionnés  $h_{gi}^{gl}$  et  $h_{gi}^{gs}$ . In-Line SLG :  $7 \leq Pe_g \leq 13$ , In-Line SGL :  $0.7 \leq Pe_g \leq 24$

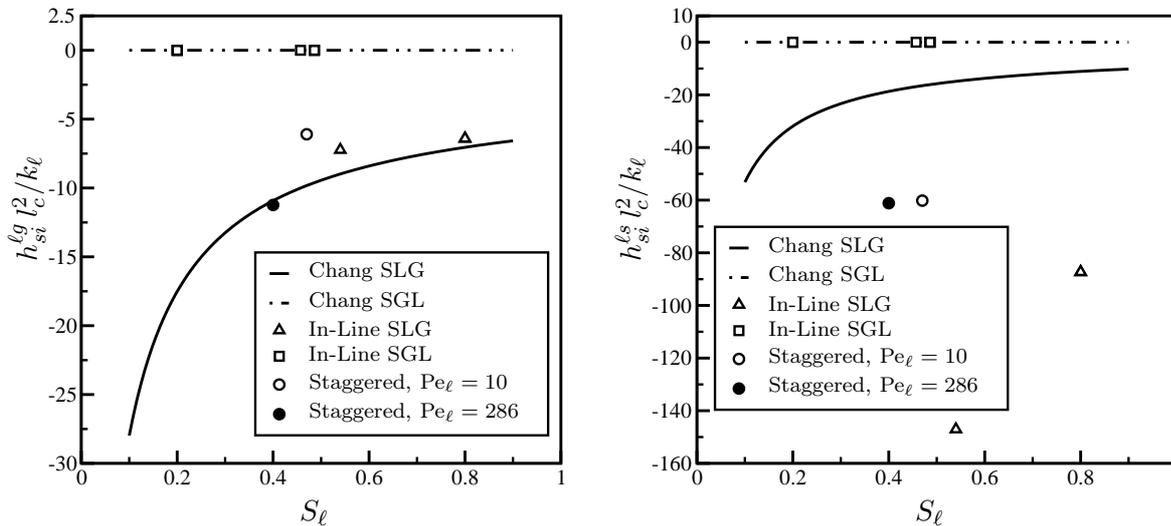


Figure 5.31: Coefficients adimensionnés  $h_{si}^{lg}$  et  $h_{si}^{ls}$ . In-Line SLG :  $201 \leq Pe_l \leq 663$ , In-Line SGL :  $258 \leq Pe_l \leq 4704$

que notre objectif est d'examiner si les coefficients suivent certaines tendances.

Les figures (5.34) et (5.35) semblent indiquer que les coefficients d'échange ont un comportement similaire à celui observé pour les systèmes à deux phases : régime diffusif où les coefficients sont quasiment indépendants du Péclet, régime de transition et régime dispersif.

Il est important de préciser que les valeurs des coefficients correspondant à un Péclet nul (*i.e.* résultats obtenus pour la cellule de Chang) n'ont pas été reportés sur ces figures. Si on se reporte à la figure (5.34) et aux points correspondants à la saturation  $S_\ell = 0.48$  pour la cellule In-Line SGL, on remarque que le coefficient d'échange peut être considéré comme indépendant du Péclet pour  $Pe_\ell < 10^3$ ; en revanche, nous avons observé que sa valeur ne correspondait pas à celle obtenue pour la cellule de Chang dans le cas SGL pour la même saturation. Ce résultat n'est cependant pas surprenant car, dans le cas purement diffusif, la surface d'échange liquide-vapeur ainsi que les longueurs caractéristiques peuvent être très différentes comme cela est illustré par les instantanés (a) et (j) de la figure (5.23). Cela rappelle une fois de plus que les coefficients ne

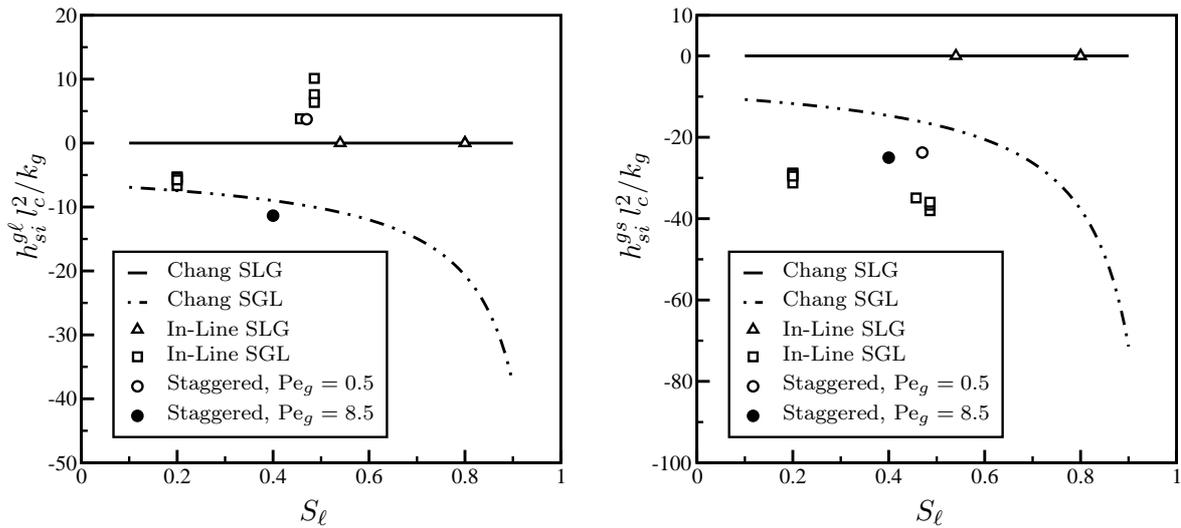


Figure 5.32: Coefficients adimensionnés  $h_{si}^{gl}$  et  $h_{si}^{gs}$ . In-Line SLG :  $7 \leq Pe_g \leq 13$ , In-Line SGL :  $0.7 \leq Pe_g \leq 24$

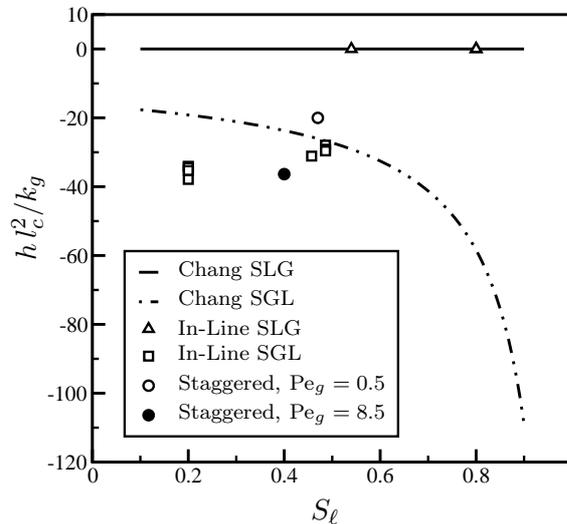


Figure 5.33: Coefficient adimensionné  $h = h_{si}^{gl} + h_{si}^{gs}$  caractérisant l'échange  $(\langle T_s \rangle^s - T^{sat})$  dans l'équation pour  $\langle T_g \rangle^g$ . In-Line SLG :  $7 \leq Pe_g \leq 13$ , In-Line SGL :  $0.7 \leq Pe_g \leq 24$

sont pas nécessairement des fonctions simples de la saturation et du nombre de Péclet<sup>3</sup>.

En retournant aux figures (5.34) et (5.35), on peut remarquer que l'importance du régime diffusif dépend non seulement de la saturation mais également de la répartition des phases. On retrouve ainsi le même type de comportement que celui observé pour les coefficients de dispersion dans le cas de la cellule stratifiée. D'autre part, il faut également remarquer que ces premiers résultats semblent indiquer que les régimes dispersifs ne sont pas nécessairement caractérisés par les mêmes nombres de Péclet  $Pe_\ell$  et  $Pe_g$ . Par conséquent, l'extrapolation de résultats obtenus pour des écoulements monophasiques en milieu poreux peut conduire à une sous-estimation ou une sur-estimation des coefficients d'échange.

Enfin, il faut noter que l'on peut s'attendre à une dépendance plus forte en fonction du nombre de Péclet du coefficient réel. En effet, les conditions de périodicité font que l'écoulement sous-jacent représenté par ces résultats est un écoulement établi. Si des effets de zone d'entrée (ou

<sup>3</sup>cette remarque s'étend bien sûr également aux corrélations faisant intervenir indépendamment les nombres de Reynolds et de Prandtl

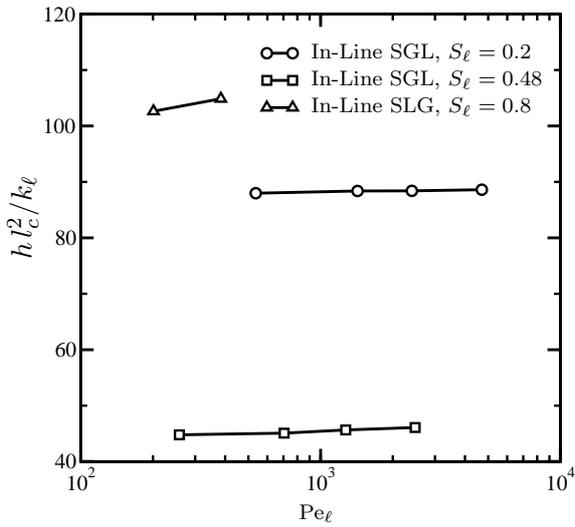


Figure 5.34: Coefficient  $h = h_{li}^{\ell g} + h_{li}^{\ell s}$  caractérisant l'échange  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$  dans l'équation pour  $\langle T_\ell \rangle^\ell$  en fonction de  $Pe_\ell$

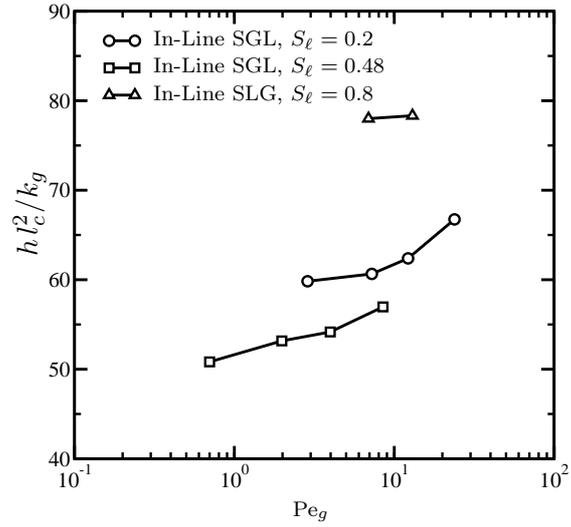


Figure 5.35: Coefficient  $h = h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs}$  caractérisant l'échange  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$  dans l'équation pour  $\langle T_g \rangle^g$  en fonction de  $Pe_g$

zone d'établissement) sont à prévoir, les coefficients obtenus ici représentent une borne inférieure. Nous invitons le lecteur à se reporter à Golfier *et al.* [61] pour une discussion et une illustration de ce problème dans le cas du problème de Graetz sur un tube cylindrique.

A ce stade, une étude portant sur un plus grand nombre de configurations locales doit évidemment être menée pour mieux comprendre le comportement des propriétés effectives. Ce type d'étude consiste à reprendre les calculs présentés pour un nombre plus important des valeurs des Péclets et de la saturation pour des cellules 2D puis 3D et pour différentes géométries de la matrice solide. Les cellules unitaires 3D permettraient en particulier d'atteindre<sup>4</sup> des valeurs plus faibles ou plus fortes de la saturation. Ces cellules permettraient également de prendre en compte de manière plus réaliste la contribution de la dispersion hydrodynamique pour les tenseurs de conductivité thermique effective. Une telle étude constitue évidemment une tâche longue et complexe mais la démarche suivie dans ce travail fournit les outils nécessaires, à savoir : un outil de simulation numérique directe pour avoir accès aux grandeurs locales (la plupart du temps non mesurables expérimentalement) et des propriétés effectives qui sont reliés d'une manière claire et explicite aux phénomènes locaux au travers de six problèmes de fermeture. Du point de vue de l'utilisation du modèle macroscopique, les coefficients obtenus analytiquement pour des cellules simples peuvent, dans un premier temps, être utilisés puisqu'ils sont de bons estimateurs des coefficients obtenus pour des cellules plus complexes. Le lecteur intéressé pourra se reporter aux travaux de Béchaud *et al.* [16] pour une application du modèle aux problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris surchauffés. Dans un deuxième temps, suite aux calculs menés pour des cellules 2D et 3D, ces coefficients pourront être remplacés par des *corrélations numériques* obtenues pour des géométries plus complexes, plus proches d'un milieu poreux réel, et incluant les effets dispersifs.

<sup>4</sup>sans lignes triples

## 5.5 Conclusions

Nous avons abordé dans ce chapitre l'estimation des coefficients d'échange du modèle macroscopique pour des cellules 2D, dans un premier temps pour des problèmes diffusifs puis, dans un deuxième temps, pour quelques configurations locales obtenues à partir d'une simulation numérique directe de l'écoulement diphasique à l'échelle de la cellule unitaire.

Pour ces cellules, la résolution des problèmes de fermeture est obligatoirement numérique. Leur résolution pose deux difficultés liées à leur nature intégro-différentielle et à la condition d'équilibre thermodynamique local. Ces deux difficultés conduisent à l'utilisation d'un maillage non-structuré et nous avons mis en place une discrétisation spatiale éléments finis avec une stabilisation SUPG pour les problèmes où les nombres de Péclet étaient forts ou modérés. La nature intégro-différentielle des problèmes de fermeture a été relaxée dans le temps en considérant la version instationnaire des problèmes de fermeture. Les solutions des problèmes quasi-stationnaires correspondent alors naturellement, comme nous l'avons vu au chapitre 2, aux solutions asymptotiques des problèmes instationnaires.

La résolution numérique des problèmes de fermeture a été validée pour les géométries simples considérées dans le chapitre 3, pour lesquelles on peut mener des développements analytiques et on dispose de solutions exactes. Nous avons, dans un premier temps, considéré la cellule stratifiée, puis nous avons introduit, dans le cas cylindrique, la *version périodique* de la cellule de Chang. Les résultats numériques obtenus pour une approximation  $\mathbb{P}_2$  convergent bien aux temps longs vers les solutions analytiques obtenues à partir des problèmes quasi-stationnaires.

Nous avons vu également qu'une approximation  $\mathbb{P}_1$ , gradient constant par maille d'intégration, s'avérait insuffisante et moins efficace qu'une approximation  $\mathbb{P}_2$ . Bien que la méthode proposée permette d'avoir accès aux inconnues de fermeture et aux propriétés effectives pour des géométries complexes, nous avons constaté que la stabilité de la solution nécessitait de très petits pas de temps en comparaison du temps caractéristique de relaxation des coefficients effectifs dynamiques. Dans ce travail, nous n'avons pas réglé ce problème et nous avons choisi des pas de temps assurant la stabilité de la solution. Il serait cependant intéressant, pour résoudre ce problème, de mener une étude plus approfondie sur la nature du découpage en temps qui conduit à relaxer dans le temps le caractère intégro-différentiel des problèmes de fermeture. Il serait également intéressant de s'assurer que les problèmes ne proviennent pas de l'approximation  $\mathbb{P}_2$  qui peut conduire à des oscillations aux interfaces avec la phase solide (fort contraste de propriétés thermiques). Dans ce dernier cas, il serait peut-être avantageux de mettre en place une discrétisation spatiale en volumes finis non structuré avec, compte tenu de la remarque sur l'approximation  $\mathbb{P}_1$ , une discrétisation d'ordre élevé (au moins d'ordre deux) pour les flux diffusifs.

La méthode numérique mise en place pour résoudre les problèmes de fermeture ayant été validée, nous nous sommes intéressés dans un premier temps à des cellules plus complexes, mais toujours pour des problèmes purement diffusifs. Nous avons considéré une cellule où les deux phases, liquide et vapeur étaient mouillantes. Les objectifs étaient de savoir si les simplifications en termes d'échanges présentées au chapitre 3 étaient encore justifiées pour des cellules plus complexes et si les expressions analytiques des coefficients obtenues pour les configurations limites SLG et SGL fournissaient de bons estimateurs des coefficients pour des configurations intermédiaires plus complexes. Nous avons montré que les réponses à ces deux questions étaient oui : d'une part, **il est encore justifié de simplifier certains termes d'échanges lorsque les deux phases sont mouillantes** et, d'autre part, **la version cylindrique de la cellule de Chang fournit de bons estimateurs des coefficients d'échanges pour des configurations plus complexes**. Nous avons cependant observé des différences importantes aux valeurs limites de la saturation pour certains coefficients d'échange. En particulier, il apparaît que **les coefficients**

d'échange définis sur l'interface liquide-vapeur (exposant  $\ell g$  ou  $g\ell$ ) ne sont pas singuliers pour les valeurs faibles ou modérées de la saturation et gardent des valeurs finies. Nous avons montré également que ces deux types de comportements correspondaient tous deux au résultat classique pour lequel **le continuum associé à la phase résiduelle est en équilibre thermique local avec le continuum sur lequel est défini la température de saturation**. Du point de vue de l'utilisation pratique du modèle, ces résultats sont évidemment importants. La remarque sur l'intérêt semi-prédictif des cellules de Chang 2D suggère également d'utiliser des cellules de Chang 3D comme estimateur *a priori* en l'absence d'autres données.

Dans un deuxième temps, nous nous sommes intéressés à des cellules 2D en considérant des nombres de Péclet non nuls. Nous avons pour cela effectué quelques simulations numériques directes de l'écoulement diphasique à l'échelle de la cellule unitaire à partir du modèle et du schéma numérique présenté au chapitre 4. Ici encore, nous avons cherché à savoir si les simplifications de certains termes d'échange restaient valables. Nous avons observé qu'elles le restaient et, si les résultats obtenus ne peuvent pas tenir lieu de démonstration rigoureuse, **il semblerait que les simplifications des termes d'échanges aient un caractère assez général**. Ces premiers calculs ont permis également de mettre en évidence le caractère complexe de la relation entre saturation, surface d'échange et longueur caractéristique ou encore le rôle important de la répartition des phases. Des tendances peuvent néanmoins être observées, mais il est nécessaire d'effectuer beaucoup plus de calculs pour espérer aboutir à des corrélations à caractère général.

## Chapitre 6

# Conclusion générale et perspectives

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés aux transferts de masse et de chaleur dans un milieu poreux surchauffé parcouru par un écoulement diphasique avec changement de phase et, en particulier, au problème de changement d'échelle dans le cadre du non équilibre thermique local. Pour aborder ce problème, nous nous sommes appuyés sur la méthode de prise de moyenne volumique qui, dans le cadre du non équilibre thermique local, nous a semblé particulièrement bien adaptée. La démarche suivie dans ce travail apporte deux contributions importantes : d'une part elle fournit des éléments de discussion sur la forme des modèles heuristiques existants et, d'autre part, elle propose des problèmes de fermeture qui établissent un lien explicite entre la description locale et les coefficients de transport effectifs paramétrant le modèle. A partir d'une description locale sur une cellule unitaire périodique représentative du milieu étudié, ces problèmes permettent de déterminer les coefficients effectifs qui, pour les écoulements diphasiques en milieux poreux, sont peu connus et sont généralement extrapolés à partir de corrélations obtenues pour les écoulements diphasiques dans les tubes ou les écoulements monophasiques en milieux poreux.

L'établissement du modèle macroscopique a été présenté dans le chapitre 2. Après une description du problème et des hypothèses à l'échelle du pore, nous avons procédé à la prise de moyenne volumique des équations de transport de masse et de l'énergie. *Le changement d'échelle a été effectué dans le cadre d'un découplage, à l'échelle du pore, du problème des transferts de chaleur de celui de l'écoulement diphasique.* Ce découplage s'appuie d'une part sur une hypothèse négligeant les variations de la densité et de la viscosité avec la température et, d'autre part, sur une hypothèse négligeant les effets associés aux mouvements rapides des interfaces. Si cette deuxième hypothèse est relativement forte pour les problèmes d'ébullition, elle apporte des simplifications importantes du point de vue de la description macroscopique et est cohérente avec la *théorie quasi-statique* qui conduit à une forme des équations de transport macroscopiques équivalente à la loi de Darcy généralisée.

Dans le cadre du non équilibre thermique local et d'une approche pseudo-permanente des échanges, nous avons obtenu, moyennant certaines simplifications et approximations, un modèle macroscopique se présentant sous la forme d'un *modèle quasi-stationnaire à trois équations*. Un des aspects attrayants de la technique de changement d'échelle réside ici dans le développement d'une *forme fermée du taux d'évaporation à l'échelle macroscopique* dépendant des températures moyennes et des propriétés effectives. Enfin, sans introduire de relations supplémentaires sur les coefficients effectifs, nous avons montré que le modèle à trois équations dégénérait naturellement vers les modèles à deux et une équation, ceci constituant une propriété importante au regard de la consistance des échanges.

Le modèle peut être vu comme une généralisation des modèles à non équilibre local existants obtenus dans le cadre d'une approche heuristique. Il possède en contrepartie un nombre plus élevé

de coefficients de transport effectifs traduisant une description macroscopique plus complexe et, on peut l'espérer, plus précise. L'intérêt majeur de l'approche développée ici est de proposer *six problèmes de fermeture permettant de déterminer ces coefficients à partir d'une description locale* sur une cellule représentative du milieu considéré.

L'objet du chapitre 3 a été, dans un premier temps, de déterminer les coefficients effectifs pour des cellules simples représentatives d'un milieu stratifié et d'un arrangement de cylindres et de sphères. Cette étude a été menée *dans le cadre d'une théorie complètement fermée* où l'on ne se préoccupe pas de l'historique des interfaces mais où l'on étudie, pour une topologie locale arbitrairement donnée, l'impact de différents paramètres (répartition des phases, saturation, ...). Deux configurations types ont été considérées : l'une classique où le liquide est mouillant et l'autre, plus spécifique aux problèmes d'ébullition, où la vapeur est "mouillante". L'étude de ces deux cas limites a mis en évidence *le rôle important de la répartition des phases sur les coefficients effectifs*. Si ce résultat était prévisible, il pose cependant des difficultés puisqu'on ne connaît généralement pas la répartition locale à l'échelle macroscopique. Cette difficulté peut néanmoins être contournée en introduisant un critère de sélection à l'échelle macroscopique. Il apparaît en effet, en première approximation, que la saturation et le signe du déséquilibre entre la température macroscopique du solide et la température de saturation soient deux paramètres moyens importants qui permettraient de caractériser la configuration des deux phases fluides.

Dans un deuxième temps, nous avons cherché à estimer la validité du modèle et la qualité de la représentation quasi-stationnaire des échanges. Pour cela, nous nous sommes intéressés à un problème de conduction avec changement de phase pour lequel il était relativement aisé de comparer la solution prédite par le modèle à une solution de référence obtenue par résolution directe du problème local. *Les expériences numériques menées pour des problèmes de diffusion-évaporation ont montré la capacité du modèle à décrire correctement le comportement macroscopique*. S'il s'agit ici d'une validation partielle, ces expériences numériques viennent illustrer l'intérêt pratique du modèle et laissent entrevoir ses potentialités pour les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris surchauffés.

En dernier lieu, nous avons présenté des simplifications au regard des termes d'échange et nous sommes revenus sur les liens entre le modèle proposé et les modèles heuristiques existants. Une discussion a ainsi été menée sur les termes qualifiés de non classiques et nous avons montré dans quelles mesures le modèle tendait vers les modèles traditionnels. En termes d'échanges, si les simplifications présentées ont conduit à une forme similaire à celle proposée dans les modèles traditionnels, il semblerait cependant que les couplages entre les différents continuums soient *a priori* plus complexes.

Dans le but d'obtenir une description locale pour des cellules unitaires plus complexes, nous avons présenté au chapitre 4 une méthode de simulation numérique directe des écoulements diphasiques. Cette méthode s'inscrit dans le cadre des *méthodes à interfaces diffuses* où l'interface est modélisée comme une zone de transition volumique. Parmi ces méthodes, nous avons vu que l'on pouvait distinguer la méthode mettant en jeu un fluide pur compressible, ou méthode du second gradient, des méthodes mettant en jeu un mélange incompressible de deux fluides non miscibles, appelés modèles de Cahn-Hilliard. Si les modèles de Cahn-Hilliard ne prennent pas en compte le changement de phase, ils sont cependant numériquement plus attractifs.

Dans ce contexte, nous avons cherché à établir un lien entre ces deux types de méthodes et, en particulier, nous avons recherché une formulation permettant de prendre en compte le changement de phase et pouvant être résolue relativement facilement par des schémas et des méthodes numériques "classiques". Nous avons mis d'une part en évidence ce lien en montrant que les modèles de Cahn-Hilliard n'étaient qu'une conséquence de la théorie du second gradient pour un mélange de deux fluides et, d'autre part, nous avons vu qu'un modèle de type Cahn-Hilliard

qualifié de *quasi-incompressible* avait les potentialités pour prendre en compte le changement de phase, et ce, dans un contexte incompressible. Des développements sont encore nécessaires pour bien comprendre la nature de ce modèle et nous nous sommes limités dans ce travail à une approximation de type Boussinesq. Pour ce dernier modèle, une discussion a été menée sur les différentes formes dites *potentielles* et une méthode numérique éléments finis a été mise en place afin de pouvoir considérer des géométries complexes. Enfin, plusieurs applications ont été présentées qui ont permis de valider le schéma numérique et d'illustrer les potentialités de la méthode.

Ayant à notre disposition un outil de simulation numérique directe des écoulements diphasiques, nous avons abordé dans le chapitre 5 la détermination des propriétés effectives pour des cellules unitaires plus complexes. Dans un premier temps, une méthode de type éléments finis a été proposée pour la résolution numérique des problèmes de fermeture puis validée pour les cellules simples considérées dans le chapitre 3. Dans le cas purement diffusif, nous nous sommes ensuite intéressés à une cellule plus complexe 2D représentative d'un arrangement de cylindres décalés où les deux phases liquide et vapeur sont mouillantes. Pour cette cellule, nous avons constaté que les simplifications apportées en termes d'échanges restaient encore valables et que les résultats analytiques obtenus pour les cellules simples constituaient de bons estimateurs des coefficients d'échange. Certaines différences ont cependant été observées, en particulier pour les valeurs limites de la saturation, traduisant le rôle important des longueurs caractéristiques des phases sur les coefficients. Malgré ces différences, nous retrouvons naturellement à partir des résultats analytiques ou numériques le résultat classique pour lequel le continuum associé à cette phase est en équilibre thermique local avec le continuum sur lequel est défini la température de saturation. Enfin, des résultats préliminaires ont été présentés à partir de simulations numériques directes d'écoulements diphasiques sur des cellules 2D périodiques. S'il est encore trop tôt pour proposer des corrélations pour les propriétés effectives, ces premiers résultats ont permis de mettre en évidence des tendances déjà observées sur les cellules simples. Ainsi, nous avons constaté que les simplifications apportées en termes d'échange restaient encore valables pour des nombres de Péclet non nuls et, par suite, il semble que ces simplifications aient un caractère assez général. Nous avons également retrouvé le rôle important de la répartition et des longueurs caractéristiques des phases. Enfin, nous avons souligné que les coefficients effectifs n'étaient pas nécessairement des fonctions simples de la saturation et du nombre de Péclet en illustrant, pour une même saturation, l'influence du nombre de Péclet sur la topologie des interfaces.

La description macroscopique des problèmes de transport en milieux poreux parcourus par un écoulement liquide-vapeur avec changement de phase représente comme nous l'avons vu un problème vaste et complexe, et l'ensemble des résultats présentés dans ce travail ainsi que la démarche proposée ouvrent de nombreuses perspectives.

Tout d'abord, les calculs présentés dans le chapitre 5 sont à poursuivre en considérant un nombre plus important de configurations locales et en étendant les calculs à l'ensemble des coefficients effectifs du modèle. Ces calculs pourraient dans un premier temps être menés sur les cellules 2D en considérant une gamme plus large de saturation et des nombres de Péclet. Dans un deuxième temps, des cellules 3D devraient être considérées ; cela permettrait entre autres d'approcher les valeurs limites de la saturation et d'étudier, de manière plus réaliste, l'influence de la distribution du champ de vitesse sur les coefficients effectifs, en particulier sur les coefficients de dispersion thermique. Ces calculs permettraient d'une part d'obtenir des corrélations pour les propriétés effectives et, d'autre part, d'apporter des estimations sur l'importance des différents termes des équations de transport macroscopiques (tenseurs couplés, termes pseudo-convectifs, ...) dans le cas général.

Il est clair que le coût numérique d'une telle étude est élevé puisque l'on doit effectuer une

simulation numérique directe de l'écoulement diphasique puis résoudre numériquement les six problèmes de fermeture. Ces deux étapes nécessitent un maillage relativement fin de la cellule unitaire et, à partir des méthodes numériques et des résultats présentés, on peut envisager des améliorations qui permettraient de réduire sensiblement les temps de calculs.

En ce qui concerne la simulation numérique directe, on pourrait envisager, soit de rendre la méthode éléments finis utilisée dans ce travail plus performante : approximation  $\text{IP}_1$  pour la vitesse avec stabilisation de type PSPG pour la pression, condensation de matrices masses, sous-intégration numérique, . . . , soit d'utiliser une méthode volumes finis en maillage non structuré. Si une méthode volumes finis demande certainement plus de travail, en particulier en ce qui concerne la discrétisation du couple vitesse-pression et la construction de schémas d'ordre élevé (*e.g.* d'ordre deux avec limiteur de flux), elle est généralement plus efficace qu'une méthode éléments finis du point de vue du temps de calcul et présente de plus l'avantage d'être conservative. A partir des résultats et de la discussion présentée dans le chapitre 4 sur les différentes formes potentielles des équations du mouvement et sur la simulation d'une inclusion en équilibre, nous pensons que ce dernier point est particulièrement important pour éliminer les courants parasites. En ce qui concerne les problèmes de fermeture, et compte tenu des remarques apportées en conclusion du chapitre 5 sur la stabilité de la solution, il serait intéressant de suivre la même démarche et de rendre plus efficace la méthode éléments finis ou d'utiliser une méthode volumes finis en maillage non structuré. On dispose actuellement de peu de recul sur la résolution numérique des problèmes de fermeture instationnaires et il serait également intéressant de mener une étude plus approfondie sur la nature du découpage en temps qui conduit à relaxer dans le temps leur caractère intégro-différentiel.

L'intérêt de la simulation numérique directe à l'échelle locale a clairement été mis en évidence dans ce travail et, à partir des résultats et des éléments de réflexion présentés dans le chapitre 4, il serait intéressant de mener une étude portant sur la prise en compte du changement de phase dans le cadre d'un modèle de type Cahn-Hilliard. Un tel modèle permettrait d'obtenir plus d'informations sur la nature des hypothèses présentées dans le chapitre 2. On pourrait ainsi revenir sur le découplage du problème de l'écoulement du problème des transferts de chaleur, sur l'hypothèse de quasi-staticité et sur l'importance du taux d'évaporation à l'échelle des fermetures. De plus, on pourrait étendre les expériences numériques de diffusion-évaporation présentées dans le chapitre 3 et estimer la validité et la qualité du modèle macroscopique pour des problèmes beaucoup plus complexes. On pourrait considérer pour cela une région représentative constituée de quelques motifs (*e.g.* de l'ordre d'une dizaine) pour laquelle il est encore possible d'effectuer une simulation numérique directe à un coût raisonnable.

Dans le cadre de l'utilisation du modèle macroscopique pour les problèmes de dénoyage et de renoyage des lits de débris surchauffés, des études ont commencé à être menées à l'aide du code de sûreté ICARE-CATHARE. Une version simplifiée du modèle a été implémentée, où les termes non traditionnels n'ont pas été pris en compte, où les tenseurs de conductivité dominants ont été représentés par l'estimateur simple  $\varepsilon_\beta k_\beta$  et où les résultats analytiques présentés dans le chapitre 3 pour la cellule stratifiée ont été utilisés pour les coefficients d'échanges. Les premiers calculs sont encourageants et ont permis d'illustrer la capacité du modèle à prendre en compte les forts déséquilibres thermiques macroscopiques. Ces études devront bien sûr être poursuivies pour valider de manière plus quantitative le modèle. Dans ce contexte, il faudrait envisager d'utiliser les résultats obtenus sur des cellules plus complexes. On pourrait également profiter des résultats obtenus sur des cellules de Chang, qui ont un comportement topologique plus proche d'un milieu poreux réel que les cellules stratifiées. Il serait également intéressant d'étudier l'impact des termes non traditionnels et de juger de leur importance en tenant compte de la précision demandée sur la solution macroscopique et également du nombre limité de mesures expérimentales disponibles

et des incertitudes de mesures. Par la suite, il serait intéressant de prendre en compte la présence d'espèces incondensables dans la phase gazeuse. Soulignons dès à présent que leur prise en compte pose une difficulté supplémentaire importante puisqu'elle introduit un couplage entre la fraction massique de vapeur et la pression de vapeur saturante. Enfin, à plus long terme, nous pensons qu'il serait intéressant d'étudier le problème de changement d'échelle pour la description des écoulements diphasiques avec changement de phase dans le régime inertiel et ce, principalement pour deux raisons. D'une part, l'ensemble des résultats présentés dans ce travail indique que l'utilisation de corrélations obtenues pour des problèmes sans changement de phase (*e.g.* drainage et imbibition) peut être remise en question pour les problèmes d'ébullition. D'autre part, une approche théorique permettrait d'apporter une contribution à l'estimation du frottement interfacial dont l'expression reste actuellement très controversée.



# Annexe A

## La méthode de prise de moyenne volumique

L'objet de cette annexe est d'introduire les principales notations et définitions associées à la méthode de prise de moyenne volumique et de rappeler les théorèmes ainsi que quelques approximations classiques de cette méthode. L'ensemble des définitions et des résultats présentés dans cette annexe sert de base aux développements menés dans le corps du mémoire, en particulier dans le chapitre 2. Le lecteur intéressé par une présentation détaillée de la méthode pourra se reporter par exemple à Carbonell et Whitaker [33], Gray [67], Quintard et Whitaker [124] et Whitaker [150, 154].

### A.1 Notations et définitions

La méthode de prise de moyenne volumique est basée sur la définition d'un opérateur de moyenne volumique qui, lorsque il est appliqué aux équations de transport à la petite échelle  $\ell$ , conduit aux équations de transport macroscopiques à la grande échelle  $L$ . Cet opérateur est défini sur un volume de prise de moyenne, appelé Volume Élémentaire Représentatif (VER), qui est associé à tout point  $\mathbf{x}$  du milieu. Ce volume est illustré sur la figure (A.1) pour un système triphasique, c'est à dire ici pour un système solide-liquide-vapeur.

Pour toute grandeur  $\psi_\beta$  associée à la phase  $\beta$ ,  $\beta = s, \ell, g$ , on peut définir deux types de moyennes, la moyenne de phase notée  $\langle \psi_\beta \rangle$  et la moyenne intrinsèque de phase notée  $\langle \psi_\beta \rangle^\beta$ . La moyenne de phase, appelée également moyenne superficielle, est définie par :

$$\langle \psi_\beta \rangle |_{\mathbf{x}} = \frac{1}{V} \int_{V_\beta(\mathbf{x}, t)} \psi_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{y}) dV_y \quad (\text{A.1})$$

où  $V_\beta(\mathbf{x}, t)$  représente le volume de la phase  $\beta$  contenu dans le volume de prise de moyenne  $V$ . Le centre de  $V$  est localisé par le vecteur position  $\mathbf{x}$  et, comme l'indique l'intégration (A.1), la moyenne superficielle  $\langle \psi_\beta \rangle$  est définie au centre du volume de prise de moyenne. Dans cette définition, la notation  $dV_y$  signifie que l'intégration se fait par rapport à la variable  $\mathbf{y}$ .

D'un autre côté, la moyenne intrinsèque de phase est définie par :

$$\langle \psi_\beta \rangle^\beta |_{\mathbf{x}} = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta(\mathbf{x}, t)} \psi_\beta(\mathbf{x} + \mathbf{y}) dV_y \quad (\text{A.2})$$

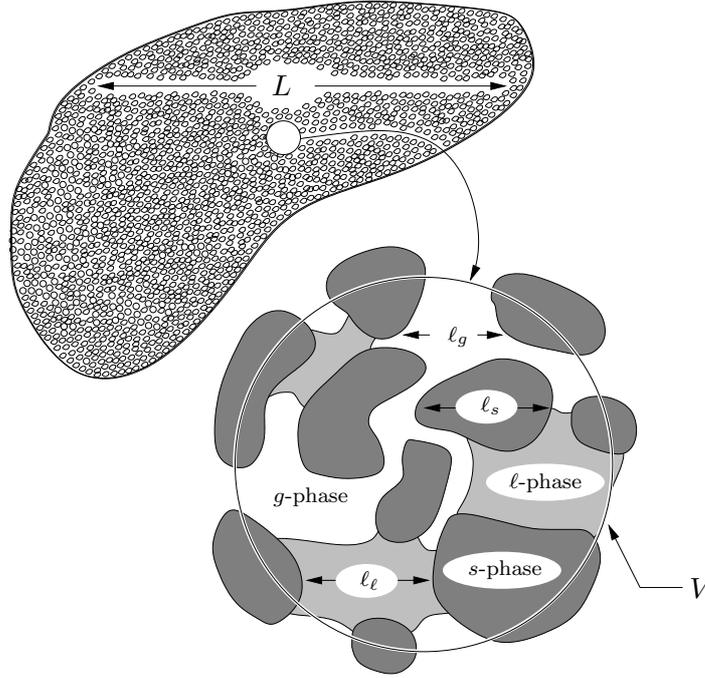


Figure A.1: Volume élémentaire représentatif d'un système triphasique s-l-g

Ici encore, la définition (A.2) montre que la moyenne intrinsèque est définie au centre du volume de prise de moyenne. On utilise généralement, pour alléger l'écriture, les notations simplifiées suivantes pour les définitions des moyennes superficielle et intrinsèque :

$$\langle \psi_\beta \rangle = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} \psi_\beta dV \quad (\text{A.3})$$

$$\langle \psi_\beta \rangle^\beta = \frac{1}{V_\beta} \int_{V_\beta} \psi_\beta dV \quad (\text{A.4})$$

Pour finir sur les principales notations et définitions, toute grandeur  $\psi_\beta$  de la phase  $\beta$  peut s'écrire sous la forme d'une décomposition spatiale, plus communément appelée décomposition de Gray [67]. Cette décomposition consiste à écrire la grandeur locale  $\psi_\beta$  comme la somme de sa moyenne intrinsèque  $\langle \psi_\beta \rangle^\beta$  et de sa déviation  $\tilde{\psi}_\beta$  autour de la valeur moyenne, c'est à dire :

$$\psi_\beta = \gamma_\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta + \tilde{\psi}_\beta \quad (\text{A.5})$$

où  $\gamma_\beta$  désigne l'indicatrice de phase de la phase  $\beta$ , c'est à dire la fonction valant 1 dans la phase  $\beta$  et s'annulant dans les autres phases. Comme le note Whitaker [153], la décomposition (A.5) représente une décomposition des échelles de longueurs puisque  $\langle \psi_\beta \rangle^\beta$  varie significativement sur la longueur caractéristique macroscopique  $L$ , tandis que la longueur caractéristique associée aux variations des déviations  $\tilde{\psi}_\beta$  est l'échelle microscopique  $\ell_\beta$ . Nous verrons plus loin qu'une telle signification pour la décomposition (A.5) est à la base de nombreuses simplifications et approximations.

On peut écrire les relations suivantes en posant  $\psi_\beta = \gamma_\beta$  dans (A.3) et (A.4) :

$$\langle \gamma_\beta \rangle = \varepsilon_\beta, \quad \langle \gamma_\beta \rangle^\beta = 1 \quad (\text{A.6})$$

où  $\varepsilon_\beta = V_\beta/V$  désigne la fraction volumique de la phase  $\beta$  dans le volume de prise de moyenne. A partir de la définition de  $\varepsilon_\beta$ , les moyennes superficielle et intrinsèque sont reliées par la relation :

$$\langle \psi_\beta \rangle = \varepsilon_\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta \quad (\text{A.7})$$

Il faut noter que si  $\psi_\beta$  est une grandeur constante, elle le reste en valeur moyenne mais seule la moyenne intrinsèque permet de conserver la valeur de la constante puisque la moyenne superficielle est pondérée par la fraction volumique  $\varepsilon_\beta$ . De plus, si  $\psi_\beta$  est une grandeur constante dans une certaine région à l'échelle macroscopique, elle le reste en valeur moyenne intrinsèque mais pas en valeur moyenne superficielle puisque  $\varepsilon_\beta$  n'est généralement pas une constante. De ce fait, la moyenne intrinsèque est généralement préférée à la moyenne superficielle.

## A.2 Propriétés

A partir des équations de transport locales pour chaque phase du système, la méthode de prise de moyenne volumique consiste à prendre la moyenne superficielle de ces équations pour obtenir les équations de transport macroscopiques. D'une manière générale, les équations de transport locales contiennent des termes d'accumulation, de convection et des termes sources pouvant suivre une loi de type gradient (*i.e.* loi de Fick, loi de Fourier, ...). Nous présentons dans ce paragraphe comment traiter ces différents termes au sens des moyennes volumiques pour un milieu poreux constitué de trois phases  $\beta$ ,  $\gamma$  et  $\sigma$ . Nous présentons dans un premier temps les deux théorèmes fondamentaux de la méthode puis, dans un deuxième temps, quelques approximations classiques.

### Théorèmes

Les deux théorèmes fondamentaux de la méthode de prise de moyenne volumique sont le *théorème du transport de Reynolds*, qui permet d'invertir les opérateurs de moyenne et de dérivée partielle en temps, et le *théorème de moyenne spatiale*, qui permet d'invertir les opérateurs de moyenne et de dérivées partielles spatiales.

- Pour une grandeur  $\psi_\beta$  de la phase  $\beta$ , le théorème du transport de Reynolds s'écrit :

$$\left\langle \frac{\partial \psi_\beta}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \psi_\beta \rangle}{\partial t} - \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{w}_{\beta\sigma} \psi_\beta dA - \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{w}_{\beta\gamma} \psi_\beta dA \quad (\text{A.8})$$

où  $\mathbf{w}_{\beta\sigma}$  et  $\mathbf{w}_{\beta\gamma}$  désignent respectivement les vitesses de déplacement des interfaces  $A_{\beta\sigma}$  et  $A_{\beta\gamma}$  qui sont contenues dans le volume de prise de moyenne.

- Pour une grandeur  $\psi_\beta$  de la phase  $\beta$ , le théorème de moyenne spatiale s'écrit :

$$\langle \nabla \cdot \psi_\beta \rangle = \nabla \cdot \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \psi_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \psi_\beta dA \quad (\text{A.9})$$

où l'opérateur  $\nabla \cdot$  correspond effectivement à l'opérateur divergence lorsque  $\psi_\beta$  est une grandeur vectorielle, ou à l'opérateur gradient lorsque  $\psi_\beta$  est une grandeur scalaire.

### Approximations classiques

Dans le paragraphe précédent, nous avons présenté les deux théorèmes fondamentaux pour la prise de moyenne volumique d'une équation de transport. Dans ce paragraphe, nous présentons quelques approximations classiques pour la prise de moyenne volumique d'un terme convectif et d'un flux suivant une loi de type gradient.

- La moyenne volumique d'un terme convectif du type  $\mathbf{v}_\beta \psi_\beta$  s'écrit, à partir du théorème de moyenne spatiale (A.9), sous la forme :

$$\langle \nabla \cdot (\mathbf{v}_\beta \psi_\beta) \rangle = \nabla \cdot \langle \mathbf{v}_\beta \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \cdot \mathbf{v}_\beta \psi_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \cdot \mathbf{v}_\beta \psi_\beta dA \quad (\text{A.10})$$

En introduisant la décomposition spatiale (A.5) pour  $\mathbf{v}_\beta$  et  $\psi_\beta$  dans le premier terme du second membre de (A.10), il vient :

$$\langle \mathbf{v}_\beta \psi_\beta \rangle = \langle \gamma_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta + \gamma_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \tilde{\psi}_\beta + \gamma_\beta \tilde{\mathbf{v}}_\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta + \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{\psi}_\beta \rangle \quad (\text{A.11})$$

En appliquant l'opérateur de moyenne dans le membre de droite de (A.11), on simplifie généralement le résultat en :

$$\langle \mathbf{v}_\beta \psi_\beta \rangle = \varepsilon_\beta \langle \mathbf{v}_\beta \rangle^\beta \langle \psi_\beta \rangle^\beta + \langle \tilde{\mathbf{v}}_\beta \tilde{\psi}_\beta \rangle \quad (\text{A.12})$$

La relation (A.12) est admise sous la contrainte :

$$\frac{r_0^2}{L^2} \ll \frac{\ell_\beta}{L} \quad (\text{A.13})$$

Le lecteur intéressé par une démonstration détaillée du résultat (A.12) pourra se reporter à Carbonell et Whitaker [33]. Le dernier terme de (A.12), qui s'écrit sous la forme d'un produit des fluctuations de  $\psi_\beta$  par les fluctuations de vitesse, caractérise la dispersion, c'est à dire le transport convectif dans la phase  $\beta$  à l'échelle microscopique des fluctuations de  $\psi_\beta$ .

- La moyenne volumique d'un flux  $\mathbf{q}_\beta$  suivant une loi de gradient du type  $\mathbf{q}_\beta = \nabla \psi_\beta$  s'écrit, à partir du théorème de moyenne spatiale (A.9), sous la forme :

$$\langle \nabla \psi_\beta \rangle = \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \psi_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \psi_\beta dA \quad (\text{A.14})$$

En introduisant la décomposition spatiale (A.5) pour  $\psi_\beta$  dans les intégrales de surface du membre de droite de (A.14), il vient :

$$\begin{aligned} \langle \nabla \psi_\beta \rangle &= \nabla \langle \psi_\beta \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \langle \psi_\beta \rangle^\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \langle \psi_\beta \rangle^\beta dA \\ &\quad + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{\psi}_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \tilde{\psi}_\beta dA \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Dans le cas où les échelles de longueur sont convenablement séparées, on peut sortir  $\langle \psi_\beta \rangle^\beta$  des intégrales de surface de (A.15) et, l'application du théorème (A.9) avec  $\psi_\beta = \gamma_\beta$  et la relation (A.6) conduisent au résultat :

$$\langle \nabla \psi_\beta \rangle = \nabla \langle \psi_\beta \rangle - \langle \psi_\beta \rangle^\beta \nabla \varepsilon_\beta + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\sigma}} \mathbf{n}_{\beta\sigma} \tilde{\psi}_\beta dA + \frac{1}{V} \int_{A_{\beta\gamma}} \mathbf{n}_{\beta\gamma} \tilde{\psi}_\beta dA \quad (\text{A.16})$$

Comme nous l'avons indiqué, le résultat (A.16) est acceptable dans le cas où les échelles de longueur sont convenablement séparées, plus précisément si la contrainte suivante est vérifiée :

$$\frac{r_0^2}{L^2} \ll 1 \quad (\text{A.17})$$

Ici encore, le lecteur intéressé pourra se reporter par exemple à Carbonell et Whitaker [33] pour une démonstration détaillée de ce résultat.

## Annexe B

# Problème de conduction hétérogène

L'objet de cette annexe est de donner un exemple simple du raisonnement menant à la représentation (2.86) du chapitre 2 pour les déviations spatiales de température.

Nous considérons pour cela un problème de conduction hétérogène dans un milieu spatialement périodique. A l'échelle locale, le problème aux limites est donné par :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T), \quad \text{dans } V \quad (\text{B.1})$$

$$T(\mathbf{x} + l_i) = T(\mathbf{x}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.2})$$

$$T(\mathbf{x}, t = 0) = \mathfrak{S}(\mathbf{x}) \quad (\text{B.3})$$

La prise de moyenne volumique de (B.1) conduit à l'équation de transport macroscopique :

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot \langle k \nabla T \rangle \quad (\text{B.4})$$

En introduisant les décompositions spatiales pour la température,  $T = \langle T \rangle + \tilde{T}$ , et la conductivité,  $k = \langle k \rangle + \tilde{k}$ , on obtient à partir des approximations classiques (*cf.* relation (A.12)) :

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \langle k \rangle \nabla \langle T \rangle + \langle k \nabla \tilde{T} \rangle \right) \quad (\text{B.5})$$

L'équation de transport pour les déviations  $\tilde{T}$  s'obtient en introduisant les décompositions spatiales dans l'équation locale (B.1) et en soustrayant (B.5) au résultat :

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \tilde{k} \nabla \langle T \rangle + k \nabla \tilde{T} - \langle k \nabla \tilde{T} \rangle \right) \quad (\text{B.6})$$

Les échelles étant supposées convenablement séparées, *i.e.*  $\ell \ll L$ , on montre que le dernier terme du second membre de (B.6) peut être négligé et l'équation de transport pour les déviations peut s'écrire sous la forme plus simple :

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \tilde{k} \nabla \langle T \rangle + k \nabla \tilde{T} \right) \quad (\text{B.7})$$

Ainsi, dans l'espace de Laplace, le problème mixte, c'est-à-dire le problème couplé (B.5)-(B.7), s'écrit :

$$p\{\langle T \rangle\} = \nabla \cdot \left( \langle k \rangle \nabla \{\langle T \rangle\} + \langle k \nabla \{\tilde{T}\} \rangle \right) \quad (\text{B.8})$$

$$p\{\tilde{T}\} = \nabla \cdot \left( \tilde{k} \nabla \{\langle T \rangle\} + k \nabla \{\tilde{T}\} \right) \quad (\text{B.9})$$

où, pour simplifier, on a posé :  $\mathfrak{S}(\mathbf{x}) = 0$ . On rappelle ici que  $\{\psi\}$  désigne la transformée de Laplace de  $\psi$  et  $p$  est la variable de Laplace.

L'équation (B.9) apparaît<sup>1</sup> linéaire en  $\nabla\{\langle T \rangle\}$ , ce qui suggère la représentation :

$$\{\tilde{T}\} = p\{\mathbf{b}\} \cdot \nabla\{\langle T \rangle\} \quad (\text{B.10})$$

L'intérêt de multiplier par  $p$  l'équation (B.10) va être illustré dans la suite des développements ; nous allons voir que c'est le seul moyen de revenir dans l'espace physique de manière simple.

Le problème aux limites local pour l'inconnue de fermeture  $\mathbf{b}$  s'obtient en introduisant la représentation (B.10) dans (B.9) et s'écrit :

$$p\{\mathbf{b}\} = \nabla \cdot (k\nabla\{\mathbf{b}\}) + \nabla\tilde{k}, \quad \text{dans } V \quad (\text{B.11})$$

$$\{\mathbf{b}\}(\mathbf{x} + l_i) = \{\mathbf{b}\}(\mathbf{x}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.12})$$

On rappelle ici que pour obtenir (B.11), les termes en  $\nabla\nabla\{\langle T \rangle\}$  ont été négligés.

A partir de la représentation (B.10), l'équation de transport macroscopique (B.8) s'écrit :

$$p\{\langle T \rangle\} = \nabla \cdot (\langle k \rangle \nabla\{\langle T \rangle\}) + p\langle k \nabla\{\mathbf{b}\} \rangle \cdot \nabla\{\langle T \rangle\} \quad (\text{B.13})$$

En appliquant la transformée de Laplace inverse, la représentation (B.10) s'écrit dans l'espace physique :

$$\tilde{T} = \mathbf{b} * \frac{\partial}{\partial t} \nabla\langle T \rangle = \int_0^t \mathbf{b}(t - \tau) \cdot \frac{\partial}{\partial t} \nabla\langle T \rangle(\tau) d\tau \quad (\text{B.14})$$

Le problème de fermeture associé (B.11)-(B.12) devient :

$$\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} = \nabla \cdot (k\nabla\mathbf{b}) + \nabla\tilde{k}, \quad \text{dans } V \quad (\text{B.15})$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{x} + l_i) = \mathbf{b}(\mathbf{x}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{B.16})$$

$$\mathbf{b}(t = 0) = 0 \quad (\text{B.17})$$

Enfin, l'équation de transport macroscopique (B.13) s'écrit :

$$\frac{\partial\langle T \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \langle k \rangle \nabla\langle T \rangle + \langle k \nabla\mathbf{b} \rangle * \frac{\partial}{\partial t} \nabla\langle T \rangle \right) \quad (\text{B.18})$$

Dans le cadre d'une approximation quasi-stationnaire du problème, on s'intéresse uniquement à la solution stationnaire de (B.15)-(B.17). En d'autres termes, on traite l'inconnue de fermeture  $\mathbf{b}$  comme une constante par rapport au temps et, si l'on note  $\mathbf{b}_\infty$  cette constante, l'approximation quasi-stationnaire consiste à prendre :

$$\mathbf{b}_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) \quad (\text{B.19})$$

Dans ces circonstances, la représentation et l'équation macroscopique s'écrivent :

$$\tilde{T} = \mathbf{b}_\infty \cdot \nabla\langle T \rangle \quad (\text{B.20})$$

$$\frac{\partial\langle T \rangle}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{K} \cdot \nabla\langle T \rangle) \quad (\text{B.21})$$

avec :

$$\mathbf{K} = \langle k \rangle \mathbf{I} + \langle k \nabla\mathbf{b}_\infty \rangle \quad (\text{B.22})$$

Il est important de noter ici que l'approximation quasi-stationnaire intervient au niveau de la variable de fermeture  $\mathbf{b}$  et non pas de  $\tilde{T}$ . Sur la base d'expériences numériques, il apparaît que, en général, le temps caractéristique pour atteindre  $\mathbf{b}_\infty$  (*cf.* équation (B.19)) est plus court que le temps de relaxation de la variable macroscopique  $\langle T \rangle$  (essentiellement parce que la longueur caractéristique associée au problème de fermeture est plus petite). Ce qui confirme l'intérêt de ce genre d'approche. Le lecteur intéressé trouvera dans Landereau [92] et Moyne [104] des informations quantitatives sur ces aspects.

<sup>1</sup>car  $\tilde{k}\nabla^2\{\langle T \rangle\} = O(L^{-2}\tilde{k}\{\langle T \rangle\}) \ll \nabla\tilde{k} \cdot \nabla\{\langle T \rangle\} = O(\ell^{-1}L^{-1}\tilde{k}\{\langle T \rangle\})$

## Annexe C

# Problèmes de fermeture

**Problème I** problème associé à  $(\langle T_\ell \rangle^\ell - T^{sat})$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla s_{li}^g = k_g \nabla^2 s_{li}^g - \varepsilon_g^{-1} (h_{li}^{g\ell} + h_{li}^{gs}), \quad \text{in the } g\text{-phase} \quad (\text{C.1})$$

$$s_{li}^g = 0, \quad s_{li}^\ell = 1, \quad \text{at } A_{lg} \quad (\text{C.2})$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla s_{li}^s = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla s_{li}^g, \quad s_{li}^g = s_{li}^s, \quad \text{at } A_{gs} \quad (\text{C.3})$$

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla s_{li}^\ell = k_\ell \nabla^2 s_{li}^\ell - \varepsilon_\ell^{-1} (h_{li}^{\ell g} + h_{li}^{\ell s}), \quad \text{in the } \ell\text{-phase} \quad (\text{C.4})$$

$$\mathbf{n}_{ls} \cdot k_\ell \nabla s_{li}^\ell = \mathbf{n}_{ls} \cdot k_s \nabla s_{li}^s, \quad s_{li}^\ell = s_{li}^s + 1, \quad \text{at } A_{ls} \quad (\text{C.5})$$

$$0 = k_s \nabla^2 s_{li}^s - \varepsilon_s^{-1} (h_{li}^{sg} + h_{li}^{s\ell}), \quad \text{in the } s\text{-phase} \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned} \text{Periodicity : } s_{li}^\ell(\mathbf{r} + l_i) &= s_{li}^\ell(\mathbf{r}), & s_{li}^g(\mathbf{r} + l_i) &= s_{li}^g(\mathbf{r}) \\ s_{li}^s(\mathbf{r} + l_i) &= s_{li}^s(\mathbf{r}), & i &= 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

$$\text{Average : } \langle s_{li}^\ell \rangle^\ell = 0, \quad \langle s_{li}^g \rangle^g = 0, \quad \langle s_{li}^s \rangle^s = 0 \quad (\text{C.8})$$

avec :

$$h_{li}^{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla s_{li}^g dA, \quad h_{li}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla s_{li}^g dA \quad (\text{C.9})$$

$$h_{li}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{lg}} \mathbf{n}_{lg} \cdot \nabla s_{li}^\ell dA, \quad h_{li}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{ls}} \mathbf{n}_{ls} \cdot \nabla s_{li}^\ell dA \quad (\text{C.10})$$

$$h_{li}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla s_{li}^s dA = -h_{li}^{gs}, \quad h_{li}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla s_{li}^s dA = -h_{li}^{\ell s} \quad (\text{C.11})$$

**Problème II** problème associé à  $(\langle T_g \rangle^g - T^{sat})$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla s_{gi}^g = k_g \nabla^2 s_{gi}^g - \varepsilon_g^{-1} (h_{gi}^{g\ell} + h_{gi}^{gs}), \quad \text{in the } g\text{-phase} \quad (\text{C.12})$$

$$s_{gi}^g = 1, \quad s_{gi}^\ell = 0, \quad \text{at } A_{lg} \quad (\text{C.13})$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla s_{gi}^s = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla s_{gi}^g, \quad s_{gi}^g = s_{gi}^s + 1, \quad \text{at } A_{gs} \quad (\text{C.14})$$

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla s_{gi}^\ell = k_\ell \nabla^2 s_{gi}^\ell - \varepsilon_\ell^{-1} (h_{gi}^{\ell g} + h_{gi}^{\ell s}), \quad \text{in the } \ell\text{-phase} \quad (\text{C.15})$$

$$\mathbf{n}_{ls} \cdot k_\ell \nabla s_{gi}^\ell = \mathbf{n}_{ls} \cdot k_s \nabla s_{gi}^s, \quad s_{gi}^\ell = s_{gi}^s, \quad \text{at } A_{ls} \quad (\text{C.16})$$

$$0 = k_s \nabla^2 s_{gi}^s - \varepsilon_s^{-1} (h_{gi}^{sg} + h_{gi}^{s\ell}), \quad \text{in the } s\text{-phase} \quad (\text{C.17})$$

$$\begin{aligned} \text{Periodicity : } s_{gi}^\ell(\mathbf{r} + l_i) &= s_{gi}^\ell(\mathbf{r}), & s_{gi}^g(\mathbf{r} + l_i) &= s_{gi}^g(\mathbf{r}) \\ s_{gi}^s(\mathbf{r} + l_i) &= s_{gi}^s(\mathbf{r}), & i &= 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

$$\text{Average : } \langle s_{gi}^\ell \rangle^\ell = 0, \quad \langle s_{gi}^g \rangle^g = 0, \quad \langle s_{gi}^s \rangle^s = 0 \quad (\text{C.19})$$

avec :

$$h_{gi}^{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla s_{gi}^g dA \quad , \quad h_{gi}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla s_{gi}^g dA \quad (C.20)$$

$$h_{gi}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla s_{gi}^\ell dA \quad , \quad h_{gi}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla s_{gi}^\ell dA \quad (C.21)$$

$$h_{gi}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla s_{gi}^s dA = -h_{gi}^{gs} \quad , \quad h_{gi}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla s_{gi}^s dA = -h_{gi}^{\ell s} \quad (C.22)$$

**Problème III** problème associé à  $\langle (T_s)^s - T^{sat} \rangle$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla s_{si}^g = k_g \nabla^2 s_{si}^g - \varepsilon_g^{-1} (h_{si}^{g\ell} + h_{si}^{gs}) \quad , \quad \text{in the } g\text{-phase} \quad (C.23)$$

$$s_{si}^g = 0, \quad s_{si}^\ell = 0, \quad \text{at } A_{\ell g} \quad (C.24)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla s_{si}^s = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla s_{si}^g, \quad s_{si}^g = s_{si}^s - 1, \quad \text{at } A_{gs} \quad (C.25)$$

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla s_{si}^\ell = k_\ell \nabla^2 s_{si}^\ell - \varepsilon_\ell^{-1} (h_{si}^{\ell g} + h_{si}^{\ell s}) \quad , \quad \text{in the } \ell\text{-phase} \quad (C.26)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla s_{si}^\ell = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla s_{si}^s, \quad s_{si}^\ell = s_{si}^s - 1, \quad \text{at } A_{\ell s} \quad (C.27)$$

$$0 = k_s \nabla^2 s_{si}^s - \varepsilon_s^{-1} (h_{si}^{sg} + h_{si}^{s\ell}) \quad , \quad \text{in the } s\text{-phase} \quad (C.28)$$

$$\text{Periodicity : } s_{si}^\ell(\mathbf{r} + l_i) = s_{si}^\ell(\mathbf{r}), \quad s_{si}^g(\mathbf{r} + l_i) = s_{si}^g(\mathbf{r})$$

$$s_{si}^s(\mathbf{r} + l_i) = s_{si}^s(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (C.29)$$

$$\text{Average : } \langle s_{si}^\ell \rangle^\ell = 0, \quad \langle s_{si}^g \rangle^g = 0, \quad \langle s_{si}^s \rangle^s = 0 \quad (C.30)$$

avec :

$$h_{si}^{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla s_{si}^g dA \quad , \quad h_{si}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla s_{si}^g dA \quad (C.31)$$

$$h_{si}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla s_{si}^\ell dA \quad , \quad h_{si}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla s_{si}^\ell dA \quad (C.32)$$

$$h_{si}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla s_{si}^s dA = -h_{si}^{gs} \quad , \quad h_{si}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla s_{si}^s dA = -h_{si}^{\ell s} \quad (C.33)$$

**Problème IV** problème associé à  $\nabla \langle T_g \rangle^g$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \mathbf{b}_{gg} + (\rho C_p)_g \tilde{\mathbf{v}}_g = k_g \nabla^2 \mathbf{b}_{gg} - \varepsilon_g^{-1} (\mathbf{c}_{gg}^{g\ell} + \mathbf{c}_{gg}^{gs}) \quad , \quad \text{in the } g\text{-phase} \quad (C.34)$$

$$\mathbf{b}_{gg} = 0, \quad \mathbf{b}_{\ell g} = 0, \quad \text{at } A_{\ell g} \quad (C.35)$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{sg} = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla \mathbf{b}_{gg} + \mathbf{n}_{gs} k_g, \quad \mathbf{b}_{gg} = \mathbf{b}_{sg}, \quad \text{at } A_{gs} \quad (C.36)$$

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell g} = k_\ell \nabla^2 \mathbf{b}_{\ell g} - \varepsilon_\ell^{-1} (\mathbf{c}_{\ell g}^{\ell g} + \mathbf{c}_{\ell g}^{\ell s}) \quad , \quad \text{in the } \ell\text{-phase} \quad (C.37)$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla \mathbf{b}_{\ell g} = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{sg}, \quad \mathbf{b}_{\ell g} = \mathbf{b}_{sg}, \quad \text{at } A_{\ell s} \quad (C.38)$$

$$0 = k_s \nabla^2 \mathbf{b}_{sg} - \varepsilon_s^{-1} (\mathbf{c}_{sg}^{s\ell} + \mathbf{c}_{sg}^{sg}) \quad , \quad \text{in the } s\text{-phase} \quad (C.39)$$

$$\text{Periodicity : } \mathbf{b}_{\ell g}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{\ell g}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{b}_{gg}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{gg}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{b}_{sg}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{sg}(\mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3 \quad (C.40)$$

$$\text{Average : } \langle \mathbf{b}_{\ell g} \rangle^\ell = 0, \quad \langle \mathbf{b}_{gg} \rangle^g = 0, \quad \langle \mathbf{b}_{sg} \rangle^s = 0 \quad (C.41)$$

avec :

$$\mathbf{c}_{gg}^{gl} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gl}} \mathbf{n}_{gl} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gg} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{gg}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gg} dA = -\mathbf{c}_{sg}^{sg} - \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} dA \quad (\text{C.42})$$

$$\mathbf{c}_{\ell g}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell g} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{\ell g}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell g} dA = -\mathbf{c}_{sg}^{s\ell} \quad (\text{C.43})$$

$$\mathbf{c}_{sg}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla \mathbf{b}_{sg} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{sg}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla \mathbf{b}_{sg} dA \quad (\text{C.44})$$

**Problème V** problème associé à  $\nabla \langle T_\ell \rangle^\ell$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \mathbf{b}_{gl} = k_g \nabla^2 \mathbf{b}_{gl} - \varepsilon_g^{-1} \left( \mathbf{c}_{gl}^{g\ell} + \mathbf{c}_{gl}^{gs} \right) \quad , \quad \text{in the } g\text{-phase} \quad (\text{C.45})$$

$$\mathbf{b}_{gl} = 0, \quad \mathbf{b}_{\ell\ell} = 0, \quad \text{at } A_{\ell g} \quad (\text{C.46})$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{sl} = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla \mathbf{b}_{gl} \quad , \quad \mathbf{b}_{gl} = \mathbf{b}_{sl} \quad , \quad \text{at } A_{gs} \quad (\text{C.47})$$

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell\ell} + (\rho C_p)_\ell \tilde{\mathbf{v}}_\ell = k_\ell \nabla^2 \mathbf{b}_{\ell\ell} - \varepsilon_\ell^{-1} \left( \mathbf{c}_{\ell\ell}^{\ell g} + \mathbf{c}_{\ell\ell}^{\ell s} \right) \quad , \quad \text{in the } \ell\text{-phase} \quad (\text{C.48})$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla \mathbf{b}_{\ell\ell} = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{sl} - \mathbf{n}_{\ell s} k_\ell \quad , \quad \mathbf{b}_{\ell\ell} = \mathbf{b}_{sl} \quad , \quad \text{at } A_{\ell s} \quad (\text{C.49})$$

$$0 = k_s \nabla^2 \mathbf{b}_{sl} - \varepsilon_s^{-1} \left( \mathbf{c}_{sl}^{s\ell} + \mathbf{c}_{sl}^{sg} \right) \quad , \quad \text{in the } s\text{-phase} \quad (\text{C.50})$$

$$\text{Periodicity : } \mathbf{b}_{\ell\ell}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{\ell\ell}(\mathbf{r}) \quad , \quad \mathbf{b}_{gl}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{gl}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{b}_{sl}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{sl}(\mathbf{r}) \quad , \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{C.51})$$

$$\text{Average : } \langle \mathbf{b}_{\ell\ell} \rangle^\ell = 0 \quad , \quad \langle \mathbf{b}_{gl} \rangle^g = 0 \quad , \quad \langle \mathbf{b}_{sl} \rangle^s = 0 \quad (\text{C.52})$$

avec :

$$\mathbf{c}_{gl}^{gl} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gl}} \mathbf{n}_{gl} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gl} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{gl}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gl} dA = -\mathbf{c}_{sl}^{sg} \quad (\text{C.53})$$

$$\mathbf{c}_{\ell\ell}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell\ell} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{\ell\ell}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell\ell} dA = -\mathbf{c}_{sl}^{s\ell} - \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} dA \quad (\text{C.54})$$

$$\mathbf{c}_{sl}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla \mathbf{b}_{sl} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{sl}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla \mathbf{b}_{sl} dA \quad (\text{C.55})$$

**Problem VI** problème associé à  $\nabla \langle T_s \rangle^s$

$$(\rho C_p)_g \mathbf{v}_g \cdot \nabla \mathbf{b}_{gs} = k_g \nabla^2 \mathbf{b}_{gs} - \varepsilon_g^{-1} \left( \mathbf{c}_{gs}^{g\ell} + \mathbf{c}_{gs}^{gs} \right) \quad , \quad \text{in the } g\text{-phase} \quad (\text{C.56})$$

$$\mathbf{b}_{gs} = 0, \quad \mathbf{b}_{\ell s} = 0, \quad \text{at } A_{\ell g} \quad (\text{C.57})$$

$$\mathbf{n}_{gs} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{ss} = \mathbf{n}_{gs} \cdot k_g \nabla \mathbf{b}_{gs} - \mathbf{n}_{gs} k_s \quad , \quad \mathbf{b}_{gs} = \mathbf{b}_{ss} \quad , \quad \text{at } A_{gs} \quad (\text{C.58})$$

$$(\rho C_p)_\ell \mathbf{v}_\ell \cdot \nabla \mathbf{b}_{\ell s} = k_\ell \nabla^2 \mathbf{b}_{\ell s} - \varepsilon_\ell^{-1} \left( \mathbf{c}_{\ell s}^{\ell g} + \mathbf{c}_{\ell s}^{\ell s} \right) \quad , \quad \text{in the } \ell\text{-phase} \quad (\text{C.59})$$

$$\mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_\ell \nabla \mathbf{b}_{\ell s} = \mathbf{n}_{\ell s} \cdot k_s \nabla \mathbf{b}_{ss} + \mathbf{n}_{\ell s} k_s \quad , \quad \mathbf{b}_{\ell s} = \mathbf{b}_{ss} \quad , \quad \text{at } A_{\ell s} \quad (\text{C.60})$$

$$0 = k_s \nabla^2 \mathbf{b}_{ss} - \varepsilon_s^{-1} \left( \mathbf{c}_{ss}^{s\ell} + \mathbf{c}_{ss}^{sg} \right) \quad , \quad \text{in the } s\text{-phase} \quad (\text{C.61})$$

$$\text{Periodicity : } \mathbf{b}_{\ell s}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{\ell s}(\mathbf{r}) \quad , \quad \mathbf{b}_{gs}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{gs}(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{b}_{ss}(\mathbf{r} + l_i) = \mathbf{b}_{ss}(\mathbf{r}) \quad , \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{C.62})$$

$$\text{Average : } \langle \mathbf{b}_{\ell s} \rangle^\ell = 0 \quad , \quad \langle \mathbf{b}_{gs} \rangle^g = 0 \quad , \quad \langle \mathbf{b}_{ss} \rangle^s = 0 \quad (\text{C.63})$$

avec :

$$\mathbf{c}_{gs}^{g\ell} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{g\ell}} \mathbf{n}_{g\ell} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gs} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{gs}^{gs} = \frac{k_g}{V} \int_{A_{gs}} \mathbf{n}_{gs} \cdot \nabla \mathbf{b}_{gs} dA = -\mathbf{c}_{ss}^{sg} - \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} dA \quad (\text{C.64})$$

$$\mathbf{c}_{ls}^{\ell g} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell g}} \mathbf{n}_{\ell g} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ls} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{ls}^{\ell s} = \frac{k_\ell}{V} \int_{A_{\ell s}} \mathbf{n}_{\ell s} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ls} dA = -\mathbf{c}_{ss}^{s\ell} - \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} dA \quad (\text{C.65})$$

$$\mathbf{c}_{ss}^{s\ell} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{s\ell}} \mathbf{n}_{s\ell} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ss} dA \quad , \quad \mathbf{c}_{ss}^{sg} = \frac{k_s}{V} \int_{A_{sg}} \mathbf{n}_{sg} \cdot \nabla \mathbf{b}_{ss} dA \quad (\text{C.66})$$

## Annexe D

# Rappels de thermodynamique classique des mélanges

L'objet de cette annexe est de faire quelques rappels de thermodynamique classique des mélanges. La thermodynamique est dite classique dans le sens où les relations thermodynamiques sont dérivées dans le cadre de la théorie du premier gradient, c'est-à-dire sans prise en compte des gradients de densité. Une grande partie des résultats présentés dans cette annexe est issue des travaux de Chevalier [42] et Papon et Leblond [112]. Ces rappels sont effectués dans le but de mieux suivre les développements qui sont faits au chapitre 4 et dans la prochaine annexe sur la théorie du second gradient pour les mélanges.

On se limitera ici au cas des mélanges composés de deux constituants et on notera  $\rho_k$  la masse volumique du constituant  $k$  définie par  $\rho_k = M_k/V$  où  $M_k$  est la masse du constituant  $k$  contenue dans le volume total  $V$ . On notera  $c_k$  la fraction massique du constituant  $k$  définie par  $\rho_k = \rho c_k$ , où  $\rho$  est la masse volumique du mélange :  $\rho = \rho_1 + \rho_2$ , et on posera  $c = c_2$ .

### D.1 Potentiels thermodynamiques

#### D.1.1 Energie interne

L'énergie interne volumique  $E^o$  du mélange est une fonction des densités  $\rho_1$  et  $\rho_2$  et des entropies spécifiques  $s_1^o$  et  $s_2^o$ . La différentielle  $dE^o$  est donnée par :

$$dE^o = \sum_k (h_k^o d\rho_k + \rho_k T_k ds_k^o) \quad (\text{D.1})$$

où  $h_k^o$  et  $T_k$  désignent respectivement l'enthalpie spécifique et la température du constituant  $k$  et sont définies par :

$$h_k^o = \left( \frac{\partial E^o}{\partial \rho_k} \right)_{s_k^o}, \quad T_k = \frac{1}{\rho_k} \left( \frac{\partial E^o}{\partial s_k^o} \right)_{\rho_k} \quad (\text{D.2})$$

Si  $\mu_k^o$  désigne le potentiel chimique du constituant  $k$ ,  $h_k^o = \mu_k^o + T_k s_k^o$ , l'identité (D.1) s'écrit sous la forme équivalente :

$$dE^o = \sum_k (\mu_k^o d\rho_k + T_k d(\rho_k s_k^o)) \quad (\text{D.3})$$

L'énergie interne spécifique  $e^o$  du mélange étant définie par  $E^o = \rho e^o$ , sa différentielle  $de^o$  s'obtient facilement à partir de (D.1) et, en notant que  $d\rho_1 + d\rho_2 = d\rho$ , celle-ci s'écrit :

$$de^o = \frac{1}{\rho} \sum_k ((h_k^o - e^o) d\rho_k + \rho_k T_k ds_k^o) \quad (\text{D.4})$$

Si  $p_k^o$  désigne la pression du constituant  $k$ , il vient à partir de (D.4) :

$$p_k^o = \rho \rho_k \left( \frac{\partial e^o}{\partial \rho_k} \right)_{s_k^o} = \rho_k h_k^o - \rho_k e^o \quad (\text{D.5})$$

L'identité (D.4) correspond à l'identité de Gibbs pour le mélange dont l'état est décrit par les variables  $\rho_k$  et  $s_k^o$ . On peut dériver une deuxième forme pour la différentielle  $de^o$  si on décide de décrire l'état du système à partir de la densité du mélange  $\rho$ , la fraction massique  $c$  et les entropies spécifiques  $s_k^o$ . A partir des relations  $\rho_k = \rho c_k$ , on a  $d\rho_k = c_k d\rho + \rho dc_k$  et on peut écrire le premier terme du second membre de l'identité de Gibbs (D.4) sous la forme :

$$\sum_k \frac{p_k^o}{\rho \rho_k} d\rho_k = \sum_k \left( \frac{p_k^o}{\rho^2} d\rho + \frac{p_k^o}{\rho_k} dc_k \right) = \sum_k \left( \frac{p_k^o}{\rho^2} d\rho + (h_k^o - e^o) dc_k \right) \quad (\text{D.6})$$

On rappelle que  $c$  désigne la fraction massique du deuxième constituants  $c_2 = c$  et par suite  $c_1 = 1 - c$ . On peut ainsi écrire (D.6) sous la forme :

$$\sum_k \frac{p_k^o}{\rho \rho_k} d\rho_k = \frac{p^o}{\rho^2} d\rho + (h_2^o - h_1^o) dc \quad (\text{D.7})$$

où  $p^o$  désigne la pression du mélange définie par :  $p^o = p_1^o + p_2^o$ . A partir de (D.7), l'identité de Gibbs (D.4) s'écrit sous la forme équivalente :

$$de^o = \frac{p^o}{\rho^2} d\rho + (h_2^o - h_1^o) dc + (1 - c) T_1 ds_1^o + c T_2 ds_2^o \quad (\text{D.8})$$

Si on suppose qu'il n'existe qu'une seule entropie pour le mélange  $s = s_1 = s_2$  et par conséquent une seule température  $T = T_1 = T_2$ , l'enthalpie spécifique du constituant  $k$  étant définie par  $h_k^o = \mu_k^o + T_k s_k^o$ , la différence  $h_2^o - h_1^o$  s'identifie à  $\mu_2^o - \mu_1^o$  et l'identité (D.8) devient :

$$de^o = \frac{p^o}{\rho^2} d\rho + \mu^o dc + T ds^o \quad (\text{D.9})$$

où  $\mu^o$  désigne le potentiel chimique du mélange défini par  $\mu^o = \mu_2^o - \mu_1^o$ . On se placera par la suite dans le cadre des mélanges pour lesquels il n'existe qu'une seule entropie.

### D.1.2 Energie libre

On peut définir l'énergie libre spécifique  $f^o$  comme la transformée de Legendre de  $e^o$  par rapport à la variable  $s^o$ , c'est-à-dire :

$$f^o = e^o - s^o \left( \frac{\partial e^o}{\partial s^o} \right)_{\rho, c} \quad (\text{D.10})$$

On obtient ainsi à partir de (D.9) la relation classique :

$$f^o = e^o - T s^o \quad (\text{D.11})$$

La relation (D.11) permet à partir de (D.9) d'obtenir la différentielle  $df^o$  :

$$df^o = \frac{p^o}{\rho^2} d\rho + \mu^o dc - s^o dT \quad (\text{D.12})$$

La relation (D.11) permet également d'écrire une relation particulière pour la pression du mélange. En effet, en partant de  $p_k^o = \rho_k h_k^o - \rho_k e^o$ , on peut écrire la pression du mélange sous la forme :

$$p^o = \rho h_1^o - \rho e^o + \rho c \mu^o \quad (\text{D.13})$$

On obtient ainsi, à partir de  $h_1^o = \mu_1^o + Ts^o$  et de la relation (D.11), l'expression suivante pour la pression du mélange :

$$p^o = \rho\mu_1^o - \rho f^o + \rho c\mu^o \quad (\text{D.14})$$

Les identités (D.14) et (D.12) permettent d'obtenir facilement la différentielle de l'énergie libre volumique  $F^o$  à partir de la relation  $dF^o = \rho df^o + f^o d\rho$  :

$$dF^o = (\mu_1^o + c\mu^o) d\rho + \rho\mu^o dc - \rho s^o dT \quad (\text{D.15})$$

Soit, à partir des variables  $\rho_k$ , ou, de manière équivalente, des variables  $\rho$  et  $\rho c$  :

$$dF^o = \mu_1^o d\rho + \mu^o d\rho c - \rho s^o dT \quad (\text{D.16})$$

### D.1.3 Enthalpie libre

On peut définir l'enthalpie libre spécifique  $g^o$ , ou énergie libre de Gibbs, comme la transformée de Legendre de  $f^o$  par rapport à la variable  $v$ , où  $v = \rho^{-1}$  est le volume spécifique du mélange, c'est-à-dire :

$$g^o = f^o - v \left( \frac{\partial f^o}{\partial v} \right)_{c,T} = f^o + \rho \left( \frac{\partial f^o}{\partial \rho} \right)_{c,T} \quad (\text{D.17})$$

On obtient ainsi à partir de (D.12) :

$$g^o = f^o + \frac{p^o}{\rho} \quad (\text{D.18})$$

Et à partir de (D.14), on a également l'identité :

$$g^o = \mu_1^o + c\mu^o \quad (\text{D.19})$$

La relation (D.18) permet à partir de (D.12) d'obtenir la différentielle  $dg^o$  :

$$dg^o = \frac{1}{\rho} dp^o + \mu^o dc - s^o dT \quad (\text{D.20})$$

## D.2 Conditions d'équilibre des phases

On considère dans cette partie un mélange de deux constituants en équilibre sous deux phases différentes notées  $\alpha$  et  $\beta$  et on se propose d'étudier les conditions d'équilibre. Pour une interface plane, les conditions d'équilibre des phase sont [42] :

$$\left[ \left( \frac{\partial F^o}{\partial \rho_1} \right)_{\rho_2} \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.21})$$

$$\left[ \left( \frac{\partial F^o}{\partial \rho_2} \right)_{\rho_1} \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.22})$$

$$\left[ F^o - \rho_1 \frac{\partial F^o}{\partial \rho_1} - \rho_2 \left( \frac{\partial F^o}{\partial \rho_2} \right) \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.23})$$

A partir de (D.21)-(D.23), on cherche à écrire les conditions d'équilibre à partir de l'énergie libre spécifique  $f^o$  et des variables  $\rho$  et  $c$ . On rappelle pour cela les relations :

$$\left( \frac{\partial F^o}{\partial \rho_k} \right) = \rho \left( \frac{\partial f^o}{\partial \rho_k} \right) + f^o, \quad \left( \frac{\partial f^o}{\partial \rho_k} \right) = \left( \frac{\partial f^o}{\partial \rho} \right)_c + \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho_2}{\partial \rho_k} - c \right) \left( \frac{\partial f^o}{\partial c} \right)_\rho \quad (\text{D.24})$$

A partir de (D.24), les conditions (D.21)-(D.23) peuvent s'écrire sous la forme équivalente :

$$\left[ -\rho^2 \left( \frac{\partial f^o}{\partial \rho} \right)_c \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.25})$$

$$\left[ \left( \frac{\partial f^o}{\partial c} \right)_{\rho} \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.26})$$

$$\left[ f^o + \rho \left( \frac{\partial f^o}{\partial \rho} \right)_c - c \left( \frac{\partial f^o}{\partial c} \right)_{\rho} \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.27})$$

Finalement, à partir des relations (D.17) et (D.19) et des différentielles (D.12) et (D.20), on peut écrire les conditions (D.25)-(D.27) à partir de l'enthalpie libre :

$$[p^o]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.28})$$

$$\left[ \left( \frac{\partial g^o}{\partial c} \right)_{p^o} \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.29})$$

$$\left[ g^o - c \left( \frac{\partial g^o}{\partial c} \right)_{p^o} \right]_{\alpha}^{\beta} = 0 \quad (\text{D.30})$$

La condition (D.28) montre que la pression du mélange  $p^o$  est la même dans chaque phase et la condition (D.29) conduit à l'égalité du potentiel chimique du mélange  $\mu^o$  dans chaque phase. La dernière condition (D.30) conduit à l'égalité du potentiel chimique  $\mu_1^o$  dans chaque phase. Les conditions d'équilibre se résument donc en l'égalité des potentiels chimiques pour chaque constituant et de la pression du mélange dans chaque phase.

## Annexe E

# Mélange de deux fluides du second gradient

L'objet de cette annexe est d'établir les équations de conservation d'un mélange de deux fluides du second gradient dans le cas où seule la fraction massique de l'un des constituants joue le rôle de paramètre d'ordre. D'une manière générale, ces modèles sont appelés dans la littérature modèles de Cahn-Hilliard. Pour cela, nous reprenons dans un premier temps les développements de Gouin [63] et Chevalier [42] pour établir les équations de conservation dans le cas général où les densités des deux fluides en présence jouent le rôle de paramètre d'ordre. Ces développements sont repris en détail dans cette annexe car les résultats obtenus sont à la base des développements menés dans le cas où seule la fraction massique joue le rôle du paramètre d'ordre et il nous a semblé pour cela important de montrer clairement comment ces résultats pouvaient être obtenus. En particulier, les développements présentés offrent un cadre théorique et thermodynamique clair et rigoureux pour les modèles dits de Cahn-Hilliard et montrent que ces modèles ne sont qu'une conséquence de la généralisation aux mélanges de la théorie du second gradient pour un fluide pur. Cette annexe peut également être vue comme une illustration du formalisme Lagrangien dans le cadre de la théorie du second gradient.

Nous avertissons le lecteur que de nombreuses notations ne figurent pas dans la nomenclature générale du mémoire, elles sont cependant introduites au fur et à mesure des développements d'une manière naturelle et sont définies clairement lors de leur introduction.

### E.1 Description Lagrangienne

Dans la description de Lagrange du mouvement des particules fluides d'un fluide pur, les trajectoires fluides sont définies de la manière suivante :  $\Omega_0$  étant le domaine occupé par l'ensemble des particules fluides à un instant de référence  $t_0$ , on se donne une application  $\Phi$  de  $\Omega_0$  dans  $\Omega$  telle que  $\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{X}, t)$ . Dans cette expression,  $\mathbf{x}$  est la position occupée par la particule fluide à l'instant  $t$  dans le domaine  $\Omega$  et  $\mathbf{X}$  sa position à l'instant  $t_0$  dans le domaine  $\Omega_0$ . On dit aussi que  $\mathbf{x}$  est la variable Eulérienne ou spatiale, et  $\mathbf{X}$  est la variable Lagrangienne ou matérielle. L'application  $\Phi$  vérifie l'identité  $\mathbf{X} = \Phi(\mathbf{X}, t_0)$ . On peut également définir l'application réciproque  $\psi$  de  $\Phi$  :  $\mathbf{X} = \psi(\mathbf{x}, t)$ . Dans le cas où l'espace est rapporté à un repère fixe, le domaine  $\Omega_0$  désigne le domaine de référence et le mouvement est décrit par rapport à cette configuration de référence. La vitesse de la particule fluide, qui à l'instant  $t_0$  se trouvait en  $\mathbf{X}$  et qui à l'instant  $t$  se trouve en  $\mathbf{x}$ , s'obtient en dérivant la fonction  $\Phi(\mathbf{X}, t)$  par rapport au temps  $t$ ,  $\mathbf{X}$  étant considérée comme constante :

$$\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial \Phi(\mathbf{X}, t)}{\partial t} \quad (\text{E.1})$$

Pour un mélange composé de deux constituants, chaque constituant  $k$  est supposé avoir un mouvement indépendant [18] pouvant être décrit par l'application  $\Phi_k$  de  $\Omega_{0k}$  dans  $\Omega$  telle que  $\mathbf{x} = \Phi_k(\mathbf{X}_k, t)$ .  $\Omega_{0k}$  est le domaine occupé par la particule fluide du constituant  $k$  à un instant de référence et  $\Omega$  est le domaine occupé par le milieu à l'instant  $t$ . On peut également définir les applications réciproques  $\psi_k$  de  $\Phi_k$   $\mathbf{X}_k = \psi_k(\mathbf{x}, t)$ . Les vitesses  $\mathbf{v}_k$  de chaque constituant sont définies par :

$$\mathbf{v}_k = \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial \Phi_k(\mathbf{X}_k, t)}{\partial t}, \quad k = 1, 2 \quad (\text{E.2})$$

Si  $d\mathbf{X}_k$  désigne un vecteur matériel élémentaire reliant deux particules fluides voisines dans le domaine de référence  $\Omega_{0k}$ , l'évolution de ce vecteur matériel élémentaire au cours du mouvement est donné par la relation tensorielle :

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}_k \cdot d\mathbf{X}_k, \quad (\mathbf{F}_k)_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial (X_k)_j}, \quad k = 1, 2 \quad (\text{E.3})$$

Le tenseur  $\mathbf{F}_k$  est l'application linéaire tangente ou tenseur gradient de déformation en  $\mathbf{X}_k$ .

Avant d'aborder les équations de conservation et en particulier le principe de moindre action de Hamilton, il est utile de rappeler deux lemmes de calcul différentiel [42]. Le premier lemme est la différentielle d'un déterminant, ou identité d'Euler-Jacobi. Si  $\mathbf{A}$  est une application linéaire bijective et  $d$  une différentielle alors :

$$d(\det[\mathbf{A}]) = \det[\mathbf{A}] \text{Tr}[\mathbf{A}^{-1}d\mathbf{A}] \quad (\text{E.4})$$

Le deuxième lemme est la différentielle d'une dérivée partielle. Si  $\mathbf{a}$  est une fonction de la variable  $\mathbf{X}$  et  $\delta$  une différentielle quelconque, alors :

$$\delta \left( \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} \right) = \frac{\partial \delta \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} - \frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \delta \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}} \quad (\text{E.5})$$

## E.2 Conservation des masses

Soit  $d\Omega_{0k}$  un élément de volume du domaine de référence  $\Omega_{0k}$ , la masse de cet élément est  $\rho_{0k}d\Omega_{0k}$ . En l'absence de réaction chimique, la masse de cet élément se conserve : si  $d\Omega$  désigne l'élément de volume occupé par les particules fluides du constituant  $k$  à l'instant  $t$ , qui à l'instant  $t_0$  se trouvaient en  $d\Omega_{0k}$ , la conservation de la masse se traduit par la relation :

$$\rho_k d\Omega = \rho_{0k} d\Omega_{0k} \quad (\text{E.6})$$

La définition (E.3) du tenseur gradient de déformation conduit à la relation  $d\Omega = \det[\mathbf{F}_k] d\Omega_{0k}$ , et par suite (E.6) devient :

$$\rho_k \det[\mathbf{F}_k] = \rho_{0k} \quad (\text{E.7})$$

En différentiant par rapport au temps  $t$  la relation (E.7), il vient, compte tenu du lemme (E.4) :

$$\frac{d\rho_k}{dt} \det[\mathbf{F}_k] + \rho_k \frac{d}{dt} (\det[\mathbf{F}_k]) = \frac{d\rho_k}{dt} \det[\mathbf{F}_k] + \rho_k \det[\mathbf{F}_k] \text{Tr} \left[ \mathbf{F}_k^{-1} \frac{d\mathbf{F}_k}{dt} \right] = 0 \quad (\text{E.8})$$

A partir du lemme (E.5), on a dans le cas où  $\delta$  désigne une différentiation par rapport au temps et  $\mathbf{a}$  la position  $\mathbf{x}$  :

$$\frac{d\mathbf{F}_k}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial \mathbf{X}_k} \quad (\text{E.9})$$

On obtient ainsi à partir de (E.8) et (E.9) :

$$\frac{d\rho_k}{dt} + \rho_k \text{Tr} \left[ \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial \mathbf{x}} \right] = 0 \quad (\text{E.10})$$

En notant  $\nabla \cdot$  l'opérateur divergence en coordonnées Eulériennes, l'équation de conservation de la masse du constituant  $k$  s'écrit :

$$\frac{d_k \rho_k}{dt} + \rho_k \nabla \cdot \mathbf{v}_k = 0, \quad \frac{d_k}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v}_k \cdot \nabla) \quad (\text{E.11})$$

### E.3 Expression du Lagrangien

Le Lagrangien  $\mathcal{L}$  d'un mélange de deux fluides du second gradient s'écrit [56, 63] sous la forme :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \rho_1 \mathbf{v}_1^2 + \frac{1}{2} \rho_2 \mathbf{v}_2^2 - \mathcal{E}(\rho_1, \rho_2, s_1, s_2, \mathbf{w}, \nabla \rho_1, \nabla \rho_2) - \rho_1 \mathcal{G}_1 - \rho_2 \mathcal{G}_2 \quad (\text{E.12})$$

où  $\mathcal{G}_k$  et  $s_k$  sont respectivement le potentiel des forces extérieures s'exerçant sur le constituant  $k$  et l'entropie spécifique du constituant  $k$ .  $\mathcal{E}$  est un potentiel thermodynamique homogène à une énergie volumique et  $\mathbf{w}$  désigne la vitesse relative du mélange définie comme  $\mathbf{w} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1$ . On montre que l'énergie interne volumique du mélange peut être définie comme la transformée de Legendre du potentiel  $\mathcal{E}$  par rapport à la vitesse relative  $\mathbf{w}$ . Le potentiel  $\mathcal{E}$  et l'énergie interne volumique  $E$  du mélange sont reliés par la relation :

$$E = \mathcal{E} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \cdot \mathbf{w} \quad (\text{E.13})$$

On supposera que le potentiel  $\mathcal{E}$  s'écrit sous la forme :

$$\mathcal{E} = E(\rho_1, \rho_2, s_1, s_2, \nabla \rho_1, \nabla \rho_2) + \frac{1}{2} d\mathbf{w}^2 \quad (\text{E.14})$$

L'énergie interne du mélange étant une fonction des densités, des entropies et des gradients de densité, la relation de Gibbs pour un mélange de deux fluides du second gradient s'écrit localement sous la forme [63] :

$$de = \sum_k \left( \frac{p_k}{\rho \rho_k} d\rho_k + \frac{\rho_k}{\rho} T_k ds_k + \frac{\phi_k}{\rho} \cdot d(\nabla \rho_k) \right) \quad (\text{E.15})$$

avec les définitions :

$$p_k = \rho \rho_k \left( \frac{\partial e}{\partial \rho_k} \right)_{s_k, \nabla \rho_k}, \quad T_k = \frac{\rho}{\rho_k} \left( \frac{\partial e}{\partial s_k} \right)_{\rho_k, \nabla \rho_k}, \quad \phi_k = \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho_k} \right)_{\rho_k, s_k} \quad (\text{E.16})$$

Si  $e^o$  désigne la partie classique de l'énergie interne spécifique d'un mélange de deux fluides du second gradient, c'est-à-dire l'énergie qu'aurait le mélange en l'absence de capillarité, on peut particulariser l'énergie interne spécifique  $e$  à partir de la forme [42, 63, 134] :

$$e(\rho_1, \rho_2, s, \nabla \rho_1, \nabla \rho_2) = e^o(\rho_1, \rho_2, s) + \frac{\lambda_{11}}{2\rho} (\nabla \rho_1)^2 + \frac{\lambda_{12}}{\rho} \nabla \rho_1 \cdot \nabla \rho_2 + \frac{\lambda_{22}}{2\rho} (\nabla \rho_2)^2 \quad (\text{E.17})$$

Dans (E.17), il a été supposé pour simplifier qu'il n'existait qu'une seule entropie pour le mélange  $s = s_1 = s_2$ . Cette hypothèse implique l'existence d'une température unique  $T = T_1 = T_2$ . Les coefficients  $\lambda_{ij}$  désignent les coefficients de capillarité interne du mélange ou coefficients de cocapillarité des constituants  $i$  et  $j$  [135].

### E.4 Equations du mouvement

A partir de l'expression de la fonction de Lagrange du système (E.12), le principe de Hamilton ou principe de moindre action, qui correspond à la forme variationnelle du principe des puissances virtuelles [63], permet de dériver les équations du mouvement dans le cas conservatif.

### E.4.1 Principe de Hamilton : mouvements conservatifs

Le principe de Hamilton peut s'énoncer de la manière suivante : le mouvement d'un système est caractérisé par une fonction  $\mathcal{L}$  qui est la fonction de Lagrange du système, et il s'effectue de façon telle que le système occupant des positions connues aux instants  $t_1$  et  $t_2$  rende extrémale l'action Hamiltonienne  $\mathcal{A}$  définie par :

$$\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} \mathcal{L} d\Omega dt \quad (\text{E.18})$$

Géométriquement, cela signifie qu'il existe un chemin passant par les points  $t_1$  et  $t_2$  tel que l'action hamiltonienne  $\mathcal{A}$  soit extrémale. Pour un fluide pur, l'ensemble des chemins passant par  $t_1$  et  $t_2$  forme une famille à un paramètre  $\xi$  dont la valeur particulière  $\xi = 0$  correspond au chemin réel [137]. L'ensemble de ces chemins reliant les points  $t_1$  et  $t_2$  dans le domaine  $\Omega$  est décrit par l'application  $\mathbf{x} = \Phi(\mathbf{X}, t, \xi)$  telle que  $\Phi(\mathbf{X}, t, \xi = 0) = \Phi(\mathbf{X}, t)$ ,  $\Phi(\mathbf{X}, t_1, \xi) = \Phi(\mathbf{X}, t_1)$  et  $\Phi(\mathbf{X}, t_2, \xi) = \Phi(\mathbf{X}, t_2)$ . On définit alors un opérateur  $\delta$  comme la variation par rapport au paramètre  $\xi$  [137] et, à partir de cet opérateur, les déplacements virtuels  $\delta\mathbf{x}$  sur le domaine des mouvements  $\Omega$  sont définis par :

$$\delta\mathbf{x} = \left( \frac{d\Phi}{d\xi} \right)_{\xi=0} \quad (\text{E.19})$$

Réciproquement, on peut définir les déplacements virtuels dans l'espace de référence  $\Omega_0$  à partir de l'application réciproque  $\mathbf{X} = \psi(\mathbf{x}, t, \xi)$  telle que  $\psi(\mathbf{x}, t, \xi = 0) = \psi(\mathbf{x}, t)$ ,  $\psi(\mathbf{x}, t_1, \xi) = \psi(\mathbf{x}, t_1)$  et  $\psi(\mathbf{x}, t_2, \xi) = \psi(\mathbf{x}, t_2)$ . Les déplacements virtuels  $\delta\mathbf{X}$  sur l'espace de référence  $\Omega_0$  sont alors définis par :

$$\delta\mathbf{X} = \left( \frac{d\psi}{d\xi} \right)_{\xi=0} \quad (\text{E.20})$$

Puisque  $\psi(\mathbf{x}, t)$  rend  $\mathcal{A}$  extrémale, l'action  $\mathcal{A}(\xi)$  est extrémale pour  $\xi = 0$ . Le principe de Hamilton revient ainsi à annuler la variation de l'action Hamiltonienne  $\delta\mathcal{A}$ .

Pour un mélange de deux fluides, on définit les applications  $\psi_k(\mathbf{x}, t, \xi_k)$  pour chaque constituant  $k$  du mélange par  $\psi_k(\mathbf{x}, t, \xi_k = 0) = \psi_k(\mathbf{x}, t)$ ,  $\psi_k(\mathbf{x}, t_1, \xi_k) = \psi_k(\mathbf{x}, t_1)$  et  $\psi_k(\mathbf{x}, t_2, \xi_k) = \psi_k(\mathbf{x}, t_2)$ . Puisque  $\psi_k(\mathbf{x}, t)$  rend  $\mathcal{A}$  extrémale pour  $k = 1, 2$ , l'action  $\mathcal{A}(\xi_k)$  est extrémale pour  $\xi_k = 0$ , soit :

$$\delta_k \mathcal{A} = \left( \frac{d\mathcal{A}}{d\xi_k} \right)_{\xi_k=0} = 0, \quad k = 1, 2 \quad (\text{E.21})$$

Les positions  $t_1$  et  $t_2$  étant indépendantes de  $\xi_k$  et les variations étant définies sur les espaces de référence  $\Omega_{0k}$  (*i.e.* l'espace des mouvements est un domaine fixe pour les variations), la variation (E.21) devient à partir de (E.18) :

$$\delta_k \mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} \delta_k \mathcal{L} d\Omega dt \quad (\text{E.22})$$

Le Lagrangien  $\mathcal{L}$ , défini par (E.12), étant une fonction de  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, s_1, s_2, \rho_1, \rho_2, \nabla\rho_1$  et  $\nabla\rho_2$ , la variation de l'action Hamiltonienne relative au constituant  $k$  du mélange s'écrit :

$$\delta_k \mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}_k} \cdot \delta \mathbf{v}_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s_k} \delta s_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho_k} \delta \rho_k + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \rho_k} \cdot \delta \nabla \rho_k \right) d\Omega dt \quad (\text{E.23})$$

L'expression (E.12) du Lagrangien conduit aux relations :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}_k} = \rho_k \mathbf{v}_k - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{v}_k} = \rho_k \mathbf{v}_k - (-1)^k \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \quad (\text{E.24})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial s_k} = - \left( \frac{\partial E}{\partial s_k} \right)_{\rho_k, \nabla \rho_k} = -\rho_k T_k \quad (\text{E.25})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \rho_k} = \frac{1}{2} \mathbf{v}_k^2 - \mathcal{G}_k - \left( \frac{\partial E}{\partial \rho_k} \right)_{s_k, \nabla \rho_k} = \frac{1}{2} \mathbf{v}_k^2 - \mathcal{G}_k - h_k \equiv B_k \quad (\text{E.26})$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \rho_k} = - \left( \frac{\partial E}{\partial \nabla \rho_k} \right)_{\rho_k, s_k} = -\phi_k \quad (\text{E.27})$$

A partir de ces relations, la variation (E.23) devient :

$$\delta \mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} \left( \left( \rho_k \mathbf{v}_k - (-1)^k \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) \cdot \delta \mathbf{v}_k - \rho_k T_k \delta s_k + B_k \delta \rho_k - \phi_k \cdot \delta \nabla \rho_k \right) d\Omega dt \quad (\text{E.28})$$

où on a posé pour simplifier  $\delta = \delta_k$ . A ce stade, il reste à calculer les variations  $\delta \mathbf{v}_k$ ,  $\delta s_k$ ,  $\delta \rho_k$  et  $\delta \nabla \rho_k$  en fonction des déplacements virtuels  $\delta \mathbf{X}_k$ . Pour calculer  $\delta \mathbf{v}_k$ , il faut dans un premier temps noter que la conservation de l'identité des particules fluides se traduit par [137] :

$$\frac{d_k \mathbf{X}_k}{dt} = 0, \quad \frac{d_k}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v}_k \cdot \nabla) \quad (\text{E.29})$$

Du fait de la définition des mouvements virtuels, les opérateurs  $\nabla$  et  $\delta$  commutent [62], et l'application de  $\delta$  à (E.29) conduit à la relation :

$$\frac{\partial \delta \mathbf{X}_k}{\partial t} + (\delta \mathbf{v}_k \cdot \nabla) \mathbf{X}_k + (\mathbf{v}_k \cdot \nabla) \delta \mathbf{X}_k = 0 \quad (\text{E.30})$$

A partir de la définition (E.3) de l'application linéaire tangente  $\mathbf{F}_k$ , (E.30) permet d'obtenir une expression pour la variation  $\delta \mathbf{v}_k$  en fonction des déplacements virtuels  $\delta \mathbf{X}_k$  :

$$\delta \mathbf{v}_k = -\mathbf{F}_k \cdot \frac{d_k \delta \mathbf{X}_k}{dt} \quad (\text{E.31})$$

Pour calculer  $\delta s_k$ , on rappelle que dans le cadre du principe de Hamilton le mouvement est supposé conservatif et par conséquent on peut légitimement admettre que l'entropie spécifique de chaque constituant reste constante dans l'écoulement :  $s_k = s_{0k}(\mathbf{X}_k)$ . On obtient ainsi directement :

$$\delta s_k = \frac{\partial s_{0k}}{\partial \mathbf{X}_k} \cdot \delta \mathbf{X}_k = \frac{\partial s_k}{\partial \mathbf{X}_k} \cdot \delta \mathbf{X}_k \quad (\text{E.32})$$

Pour calculer  $\delta \rho_k$ , on remarque que l'opérateur  $\delta$  appliqué à (E.7) conduit à la relation :

$$(\delta \rho_k) \det [\mathbf{F}_k] + \rho_k \delta (\det [\mathbf{F}_k]) = \frac{\partial \rho_{0k}}{\partial \mathbf{X}_k} \cdot \delta \mathbf{X}_k \quad (\text{E.33})$$

A partir du lemme (E.4), la relation précédente s'écrit :

$$\delta \rho_k = -\rho_k \text{Tr} [\mathbf{F}_k^{-1} \delta \mathbf{F}_k] + \frac{1}{\det [\mathbf{F}_k]} \frac{\partial \rho_{0k}}{\partial \mathbf{X}_k} \cdot \delta \mathbf{X}_k \quad (\text{E.34})$$

A partir de la définition (E.3) de l'application linéaire tangente  $\mathbf{F}_k$ , du lemme (E.5) et en notant  $\nabla_0 \cdot$  l'opérateur divergence relatif aux variables de Lagrange  $\mathbf{X}_k$  dans  $\Omega_{0k}$  [62], (E.34) devient :

$$\delta \rho_k = \rho_k \nabla_0 \cdot \delta \mathbf{X}_k + \frac{1}{\det [\mathbf{F}_k]} \frac{\partial \rho_{0k}}{\partial \mathbf{X}_k} \cdot \delta \mathbf{X}_k \quad (\text{E.35})$$

Enfin, à partir de (E.7), (E.35) permet d'obtenir une expression pour la variation  $\delta\rho_k$  en fonction des déplacements virtuels  $\delta\mathbf{X}_k$  :

$$\delta\rho_k = \rho_k \nabla_0 \cdot \delta\mathbf{X}_k + \frac{\rho_k}{\rho_{0k}} (\nabla_0 \rho_{0k}) \cdot \delta\mathbf{X}_k \quad (\text{E.36})$$

Pour calculer  $\delta\nabla\rho_k$ , on rappelle que les opérateurs  $\nabla$  et  $\delta$  commutent et que  $\delta\rho_k$  est donnée par (E.36).

A partir des relations (E.31), (E.32) et (E.36), la variation de l'action Hamiltonienne (E.28) s'écrit en intégrant par parties le terme en  $\nabla\delta\rho_k$  :

$$\delta\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega} \rho_k \left( -\mathbf{K}_k \cdot \mathbf{F}_k \cdot \frac{d\delta\mathbf{X}_k}{dt} + R_k D_k - T_k (\nabla_0 s_k) \delta\mathbf{X}_k \right) d\Omega dt \quad (\text{E.37})$$

où on a posé :

$$\mathbf{K}_k = \mathbf{v}_k - \frac{(-1)^k}{\rho_k} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}}, \quad R_k = B_k + \nabla \cdot \phi_k, \quad D_k = \nabla_0 \cdot \delta\mathbf{X}_k + \frac{\nabla_0 \rho_{0k}}{\rho_{0k}} \cdot \delta\mathbf{X}_k \quad (\text{E.38})$$

On rappelle que pour toute fonction  $f(\mathbf{x}, t)$ , on a [137] :

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}, t) d\Omega = \int_{\Omega_{0k}} f(\mathbf{X}_k, t) \det[\mathbf{F}_k] d\Omega_{0k} = \int_{\Omega_{0k}} \frac{\rho_{0k}}{\rho_k} f(\mathbf{X}_k, t) d\Omega_{0k} \quad (\text{E.39})$$

A partir du changement de variable (E.39), la variation (E.37) devient :

$$\delta\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega_{0k}} \rho_{0k} \left( -\mathbf{K}_k \cdot \mathbf{F}_k \cdot \frac{d\delta\mathbf{X}_k}{dt} + R_k D_k - T_k (\nabla_0 s_k) \delta\mathbf{X}_k \right) d\Omega_{0k} dt \quad (\text{E.40})$$

Pour tout vecteur  $\delta\mathbf{X}_k$  et pour tous scalaires  $\rho_{0k}$  et  $R_k$ , on peut écrire l'identité [63] :

$$\nabla_0 \cdot (\rho_{0k} R_k \delta\mathbf{X}_k) = R_k (\nabla_0 \rho_{0k}) \cdot \delta\mathbf{X}_k + \rho_{0k} (\nabla_0 R_k) \cdot \delta\mathbf{X}_k + \rho_{0k} R_k \nabla_0 \cdot \mathbf{X}_k \quad (\text{E.41})$$

On rappelle que par définition, les déplacements virtuels  $\delta\mathbf{X}_k$  sont nuls pour  $t = t_1$  et  $t = t_2$ . Ainsi, si les déplacements virtuels s'annulent sur le bord de  $\Omega_{0k}$ , une intégration par parties de (E.40) à partir de (E.41) et de l'expression de  $D_k$  conduit finalement à la variation :

$$\delta\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Omega_{0k}} \rho_{0k} \left( \frac{\partial \mathbf{K}_k \cdot \mathbf{F}_k}{\partial t} - \nabla_0 R_k - T_k \nabla_0 s_k \right) \cdot \delta\mathbf{X}_k d\Omega_{0k} dt \quad (\text{E.42})$$

Le principe de Hamilton  $\delta\mathcal{A} = 0$  permet alors d'obtenir les équations du mouvement de chaque constituant  $k$  du mélange en variables de Lagrange :

$$\frac{\partial \mathbf{K}_k \cdot \mathbf{F}_k}{\partial t} - \nabla_0 R_k - T_k \nabla_0 s_k = 0, \quad k = 1, 2 \quad (\text{E.43})$$

Afin d'obtenir les équations du mouvement en variables d'Euler, on peut écrire à partir du lemme (E.5), de la définition (E.3) du tenseur gradient de déformation et de la relation (E.29) :

$$\frac{d_k \mathbf{F}_k}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial \mathbf{X}_k} = \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}_k} = (\nabla \mathbf{v}_k) \cdot \mathbf{F}_k \quad (\text{E.44})$$

soit :

$$\frac{\partial \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{F}_k}{\partial t} = \frac{d_k \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{F}_k}{dt} = \left( \frac{d_k \mathbf{v}_k}{dt} + \mathbf{v}_k \cdot \nabla \mathbf{v}_k \right) \cdot \mathbf{F}_k \quad (\text{E.45})$$

A partir de la relation de passage  $\nabla_0(\cdot) = \nabla(\cdot) \cdot \mathbf{F}_k$ , les équations du mouvement (E.43) en variables d'Euler s'écrivent sous la forme :

$$\frac{d_k \mathbf{K}_k}{dt} + \mathbf{K}_k \cdot \nabla \mathbf{v}_k = \nabla R_k + T_k \nabla s_k, \quad k = 1, 2 \quad (\text{E.46})$$

Afin d'obtenir une forme plus classique des équations du mouvement (E.46), on peut écrire compte tenu de l'expression (E.38) de  $\mathbf{K}_k$

$$\frac{d_k \mathbf{K}_k}{dt} = \frac{d_k \mathbf{v}_k}{dt} - (-1)^k \frac{d_k}{dt} \left( \frac{1}{\rho_k} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) = \frac{d_k \mathbf{v}_k}{dt} - (-1)^k \left( \frac{d_k}{dt} \left( \frac{1}{\rho_k} \right) \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} + \frac{1}{\rho_k} \frac{d_k}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) \right) \quad (\text{E.47})$$

A partir des équations de conservation des masses (E.11) et de la définition de la dérivée partielle le long de  $\mathbf{v}_k$ , on a les relations :

$$\frac{d_k}{dt} \left( \frac{1}{\rho_k} \right) = -\frac{1}{\rho_k^2} \frac{d_k \rho_k}{dt} = \frac{1}{\rho_k} \nabla \cdot \mathbf{v}_k \quad (\text{E.48})$$

$$\frac{d_k}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + (\mathbf{v}_k \cdot \nabla) \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \quad (\text{E.49})$$

En notant que pour tous vecteurs  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{b}$  on a l'identité :  $\nabla \cdot (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) = \mathbf{b} \nabla \cdot \mathbf{a} + \nabla \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$ , la deuxième relation (E.49) peut s'écrire :

$$\frac{d_k}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \nabla \cdot \left( \mathbf{v}_k \otimes \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \nabla \cdot \mathbf{v}_k \quad (\text{E.50})$$

De sorte que (E.47) s'écrit :

$$\frac{d_k \mathbf{K}_k}{dt} = \frac{d_k \mathbf{v}_k}{dt} - \frac{(-1)^k}{\rho_k} \left( \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \nabla \cdot \left( \mathbf{v}_k \otimes \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) \right) \quad (\text{E.51})$$

A partir de (E.51) et de l'expression (E.38) de  $R_k$ , les équations du mouvement (E.46) pour  $k = 1, 2$  s'écrivent finalement sous la forme :

$$\begin{aligned} \rho_k \mathbf{\Gamma}_k &= (-1)^k \left( \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \nabla \cdot \left( \mathbf{v}_k \otimes \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \cdot \nabla \mathbf{v}_k \right) \\ &\quad - \rho_k \nabla \mathcal{G}_k - \rho_k \nabla (h_k - \nabla \cdot \phi_k) + \rho_k T_k \nabla s_k \end{aligned} \quad (\text{E.52})$$

où  $\mathbf{\Gamma}_k$  est l'accélération du constituant  $k$  définie par :

$$\mathbf{\Gamma}_k = \frac{d_k \mathbf{v}_k}{dt} = \frac{\partial \mathbf{v}_k}{\partial t} + (\mathbf{v}_k \cdot \nabla) \mathbf{v}_k \quad (\text{E.53})$$

### E.4.2 Effets dissipatifs

Les équations du mouvement (E.52) constituent les équations du mouvement pour chaque constituant d'un mélange de deux fluides du second gradient non dissipatifs. Ces équations ont été obtenues dans le cadre du principe de Hamilton. L'introduction des effets dissipatifs permet de passer des mouvements conservatifs aux mouvements dissipatifs.

Les forces dissipatives sont de nature visqueuse et diffusive [42]. Les forces visqueuses peuvent être représentées par un tenseur des contraintes irréversibles  $\boldsymbol{\tau}_k$  pour chaque constituant  $k$  du mélange [42, 63]. Les forces de diffusion traduisant les frottements entre les constituants du mélange sont modélisées par une force de frottement  $\mathbf{f}$  de type Stokes [42, 57] :

$$\mathbf{f} = \varsigma \mathbf{w} = \varsigma (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \quad (\text{E.54})$$

où  $\varsigma$  est un coefficient associé à l'intensité de la force de frottement. Ce coefficient de frottement peut dépendre dans le cas général de la densité et la composition du mélange ainsi que de la vitesse relative.

Dans le cas dissipatif, les équations du mouvement (E.52) deviennent :

$$\begin{aligned} \rho_1 \Gamma_1 &= -\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) - \nabla \cdot \left( \mathbf{v}_1 \otimes \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \cdot \nabla \mathbf{v}_1 \\ &\quad - \rho_1 \nabla \mathcal{G} - \rho_1 \nabla (h_1 - \nabla \cdot \phi_1) + \rho_1 T_1 \nabla s_1 + \mathbf{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_1 \end{aligned} \quad (\text{E.55})$$

$$\begin{aligned} \rho_2 \Gamma_2 &= \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \nabla \cdot \left( \mathbf{v}_2 \otimes \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \cdot \nabla \mathbf{v}_2 \\ &\quad - \rho_2 \nabla \mathcal{G} - \rho_2 \nabla (h_2 - \nabla \cdot \phi_2) + \rho_2 T_2 \nabla s_2 - \mathbf{f} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_2 \end{aligned} \quad (\text{E.56})$$

On a supposé ici que  $\mathcal{G}_1 = \mathcal{G}_2$ . C'est effectivement le cas si la gravité est la seule force extérieure. Notons que dans le cas isotherme, l'enthalpie spécifique s'identifie au potentiel chimique  $\mu_k$  du constituant  $k$  et les équations du mouvement (E.55)-(E.56) ne font plus intervenir les entropies spécifiques de chaque constituant.

## E.5 Equations de transport du mélange

### E.5.1 Equation de conservation de la masse

Soit  $\rho = \rho_1 + \rho_2$  la densité du mélange et  $\mathbf{v}$  la vitesse barycentrique du mélange définie par  $\rho \mathbf{v} = \rho_1 \mathbf{v}_1 + \rho_2 \mathbf{v}_2$ . L'addition des équations de conservation des masses (E.11) conduit à l'équation de conservation de la masse du mélange :

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (\text{E.57})$$

avec la définition classique pour la dérivée particulaire :

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

### E.5.2 Equation de Cahn-Hilliard

On se propose ici de reprendre les développements de Boyer [27] et Fouillet [55] conduisant à l'équation d'évolution de la fraction massique  $c$  plus connue sous le nom de l'équation de Cahn-Hilliard dans le cadre des méthodes à interfaces diffuses.

Soit  $c_k$  la concentration massique du constituant  $k$  :  $\rho_k = \rho c_k$ , on pose  $c_2 = c$  et  $c_1 = 1 - c$ . La définition de la vitesse barycentrique  $\rho \mathbf{v} = \rho_1 \mathbf{v}_1 + \rho_2 \mathbf{v}_2$  conduit à la relation  $\mathbf{v}_2 = \mathbf{v} + (\rho_1/\rho) \mathbf{w}$ , et, à partir de cette relation, l'équation de conservation de la masse (E.11) du deuxième constituant  $\rho_2 = \rho c$  s'écrit :

$$\frac{d\rho c}{dt} + \rho c \nabla \cdot \mathbf{v} = -\nabla \cdot \left( \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \mathbf{w} \right) \quad (\text{E.58})$$

A ce stade, il reste à déterminer une expression pour la vitesse relative  $\mathbf{w}$ . En multipliant l'équation de conservation de l'impulsion  $\rho_1 \Gamma_1$  (E.55) par  $\rho_2$  et l'équation de  $\rho_2 \Gamma_2$  (E.56) par  $\rho_1$ , puis en retranchant les équations obtenues, il vient :

$$\frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} (\Gamma_2 - \Gamma_1) = -\mathbf{f} - \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \nabla (\mu_2 - \mu_1 - \nabla \cdot (\phi_2 - \phi_1)) \quad (\text{E.59})$$

Cette relation a été obtenue en supposant qu'il n'existait qu'une seule entropie pour le mélange et en négligeant les termes associés au potentiel  $\mathcal{E}$  ainsi que les effets visqueux dans (E.55)-(E.56).

A ce stade, on introduit le potentiel chimique  $\mu$  du mélange défini par  $\mu = \mu_2 - \mu_1$  et le potentiel chimique  $\tilde{\mu}$  dit *généralisé* :

$$\tilde{\mu} = \mu_2 - \mu_1 - \nabla \cdot (\phi_2 - \phi_1) = \mu - \nabla \cdot (\phi_2 - \phi_1) \quad (\text{E.60})$$

A partir de ces définitions, la relation (E.59) devient, en explicitant la force de frottement :

$$\mathbf{w} = -\frac{\rho_1 \rho_2}{\varsigma \rho} ((\mathbf{\Gamma}_2 - \mathbf{\Gamma}_1) + \nabla \tilde{\mu}) \quad (\text{E.61})$$

Si on fait l'hypothèse que les vitesses  $\mathbf{v}_k$  des deux constituants du mélange sont suffisamment proches pour que l'on puisse considérer  $\mathbf{\Gamma}_1 - \mathbf{\Gamma}_2 \ll \nabla \tilde{\mu}$  dans (E.61), l'équation de conservation de  $\rho c$  (E.58) devient :

$$\frac{d\rho c}{dt} + \rho c \nabla \cdot \mathbf{v} = \nabla \cdot \left( \frac{1}{\varsigma} \left( \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \right)^2 \nabla \tilde{\mu} \right) \quad (\text{E.62})$$

On peut aussi écrire l'équation d'évolution de la fraction massique  $c$  à partir de (E.61) et de l'équation de conservation de la masse du mélange (E.57) :

$$\rho \frac{dc}{dt} = \nabla \cdot \left( \frac{1}{\varsigma} \left( \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \right)^2 \nabla \tilde{\mu} \right) \quad (\text{E.63})$$

### E.5.3 Equations de conservation de l'impulsion

#### Première forme

On définit l'accélération  $\mathbf{\Gamma}$  du mélange par  $\rho \mathbf{\Gamma} = \rho_1 \mathbf{\Gamma}_1 + \rho_2 \mathbf{\Gamma}_2$ . Une telle définition est reliée au fait que l'impulsion  $\rho \mathbf{\Gamma}$  a la dimension d'une force volumique et est une quantité additive au même titre que les forces de volume ou les divergences des tenseurs des contraintes [63]. A partir de cette définition, l'addition des équations du mouvement (E.55)-(E.56) conduit à l'équation de conservation de l'impulsion du mélange :

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{\Gamma} &= \nabla \cdot \left( \mathbf{w} \otimes \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \cdot \nabla \mathbf{w} - \rho \nabla \mathcal{G} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2) \\ &\quad - \rho_1 \nabla (h_1 - \nabla \cdot \phi_1) - \rho_2 \nabla (h_2 - \nabla \cdot \phi_2) + \rho_1 T_1 \nabla s_1 + \rho_2 T_2 \nabla s_2 \end{aligned} \quad (\text{E.64})$$

A partir de la relation de Gibbs pour le mélange (E.15), on peut écrire :

$$\nabla e = \sum_k \left( \frac{p_k}{\rho \rho_k} \nabla \rho_k + \frac{\rho_k}{\rho} T_k \nabla s_k + \frac{\phi_k}{\rho} \cdot \nabla \nabla \rho_k \right) \quad (\text{E.65})$$

A ce stade, on note les identités :

$$\frac{\phi_k}{\rho} \cdot \nabla \nabla \rho_k = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\phi_k \otimes \nabla \rho_k) - \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \phi_k) \nabla \rho_k \quad (\text{E.66})$$

$$\frac{\rho_k}{\rho} \nabla (\nabla \cdot \phi_k) = \frac{1}{\rho} \nabla (\rho_k \nabla \cdot \phi_k) - \frac{1}{\rho} (\nabla \cdot \phi_k) \nabla \rho_k \quad (\text{E.67})$$

Les identités (E.66)-(E.67) permettent d'écrire la relation de Gibbs (E.65) sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \sum_k (-\rho_k \nabla (h_k - \nabla \cdot \phi_k) + \rho_k T_k \nabla s_k) &= \frac{1}{\rho} \sum_k (\nabla (\rho_k \nabla \cdot \phi_k) - \nabla \cdot (\phi_k \otimes \nabla \rho_k)) \\ &\quad - \frac{1}{\rho} \sum_k \left( \rho_k \nabla h_k + \frac{p_k}{\rho_k} \nabla \rho_k \right) + \nabla e \end{aligned} \quad (\text{E.68})$$

Dans (E.68), on peut écrire l'identité :

$$\frac{p_k}{\rho\rho_k}\nabla\rho_k = \frac{\rho_k}{\rho}\nabla\left(\frac{p_k}{\rho_k}\right) - \frac{1}{\rho}\nabla p_k \quad (\text{E.69})$$

Et à partir de la définition de l'enthalpie spécifique  $h_k$  et de la pression  $p_k$ , on a :

$$h_k = \frac{\partial\rho e}{\partial\rho_k} = e + \rho\frac{\partial e}{\partial\rho_k} = e + \frac{p_k}{\rho_k} \quad (\text{E.70})$$

Les relations (E.69) et (E.70) permettent d'écrire (E.68) sous la forme :

$$\sum_k (-\rho_k\nabla(h_k - \nabla\cdot\phi_k) + \rho_k T_k\nabla s_k) = -\sum_k (\nabla(p_k - \rho_k\nabla\cdot\phi_k) + \nabla\cdot(\phi_k \otimes \nabla\rho_k)) \quad (\text{E.71})$$

La relation (E.71) permet alors d'écrire l'équation de conservation de l'impulsion d'un mélange de deux fluides du second gradient (E.64) sous la forme :

$$\begin{aligned} \rho\mathbf{\Gamma} &= \nabla\cdot\left(\mathbf{w} \otimes \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\mathbf{w}}\right) + \frac{\partial\mathcal{E}}{\partial\mathbf{w}}\cdot\nabla\mathbf{w} - \rho\nabla\mathcal{G} + \nabla\cdot(\boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2) \\ &\quad - \nabla(p - \rho_1\nabla\cdot\phi_1 - \rho_2\nabla\cdot\phi_2) - \nabla\cdot(\phi_1 \otimes \nabla\rho_1 + \phi_2 \otimes \nabla\rho_2) \end{aligned} \quad (\text{E.72})$$

où  $p$  désigne la pression du mélange [63] définie par la relation  $p = p_1 + p_2$ .

## Deuxième forme

Les équations (E.72) constituent une première forme des équations de conservation de l'impulsion du mélange dans le sens où les grandeurs  $\rho_k$  ont été choisies pour décrire l'état du système. On peut dériver une deuxième forme des équations (E.72) si on décide de décrire l'état du système à partir de la densité du mélange  $\rho = \rho_1 + \rho_2$  et de la fraction massique  $c$  du deuxième constituant  $\rho_2 = \rho c$ . Nous verrons par la suite qu'il est très facile à partir de cette forme de dériver la classe des modèles dits de Cahn-Hilliard.

La première étape consiste à écrire la relation de Gibbs (E.15) non pas à partir de  $\rho_k$  et  $\nabla\rho_k$  mais  $\rho$ ,  $c$ ,  $\nabla\rho$  et  $\nabla c$ . On se place ici, pour simplifier, dans le cas où il n'existe qu'une seule entropie pour le mélange  $s = s_1 = s_2$ , et par conséquent une seule température  $T = T_1 = T_2$ . En suivant les développements présentés dans l'annexe précédente, on montre dans un premier temps que la relation de Gibbs pour le mélange (E.15) s'écrit sous la forme équivalente :

$$de = \frac{p}{\rho^2}d\rho + \mu dc + Tds + \sum_k \frac{\phi_k}{\rho} \cdot d(\nabla\rho_k) \quad (\text{E.73})$$

Il reste désormais à développer le dernier terme de (E.73). Pour cela, on note qu'à partir de  $\rho_k = \rho c_k$ , on a  $\nabla\rho_k = c_k\nabla\rho + \rho\nabla c_k$ , de sorte que :

$$\sum_k \frac{\phi_k}{\rho} \cdot d(\nabla\rho_k) = \sum_k \frac{\phi_k}{\rho} \cdot (d(c_k\nabla\rho) + d(\rho\nabla c_k)) \quad (\text{E.74})$$

En développant  $d(c_k\nabla\rho) = (\nabla\rho)dc_k + c_k d(\nabla\rho)$  et  $d(\rho\nabla c_k) = (\nabla c_k)d\rho + \rho d(\nabla c_k)$ , il vient pour (E.74) :

$$\begin{aligned} \sum_k \frac{\phi_k}{\rho} \cdot d(\nabla\rho_k) &= \frac{1}{\rho}((\phi_2 - \phi_1) \cdot \nabla c) d\rho + \frac{1}{\rho}(\phi_1 + c(\phi_2 - \phi_1)) \cdot d(\nabla\rho) \\ &\quad + \frac{1}{\rho}((\phi_2 - \phi_1) \cdot \nabla\rho) dc + (\phi_2 - \phi_1) \cdot d(\nabla c) \end{aligned} \quad (\text{E.75})$$

A partir de (E.75), la relation de Gibbs (E.73) s'écrit finalement sous la forme :

$$\begin{aligned} de &= \left( \frac{p}{\rho^2} + \frac{1}{\rho} (\phi_2 - \phi_1) \cdot \nabla c \right) d\rho + \frac{1}{\rho} (\phi_1 + c(\phi_2 - \phi_1)) \cdot d(\nabla\rho) \\ &\quad + Tds + \left( \mu + \frac{1}{\rho} (\phi_2 - \phi_1) \cdot \nabla\rho \right) dc + (\phi_2 - \phi_1) \cdot d(\nabla c) \end{aligned} \quad (\text{E.76})$$

La relation (E.76) correspond à l'identité de Gibbs d'un mélange de deux fluides du second gradient dans le cas où  $\rho$ ,  $c$ ,  $s$ ,  $\nabla\rho$  et  $\nabla c$  désignent les variables principales décrivant l'état du système. On peut de plus écrire  $\phi_k$ , à partir de sa définition (E.16), sous la forme :

$$\phi_k = \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho_k} \right) = \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \frac{\partial \nabla c}{\partial \nabla \rho_k} + \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) \frac{\partial \nabla \rho}{\partial \nabla \rho_k} \quad (\text{E.77})$$

En remarquant que :

$$\frac{\partial \nabla c}{\partial \nabla \rho_k} = \frac{\partial \nabla (\rho_2 \rho^{-1})}{\partial \nabla \rho_k} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \nabla \rho_k} (\nabla \rho_2 - c \nabla (\rho_1 + \rho_2)), \quad \frac{\partial \nabla \rho}{\partial \nabla \rho_k} = 1 \quad (\text{E.78})$$

On obtient à partir de (E.77) et (E.78) les relations :

$$\phi_1 = \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) - c \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \quad (\text{E.79})$$

$$\phi_2 = \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) + (1 - c) \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \quad (\text{E.80})$$

A partir des relations (E.79)-(E.80), on peut écrire dans les équations de conservation de l'impulsion du mélange (E.72) :

$$\begin{aligned} \phi_1 \otimes \nabla \rho_1 + \phi_2 \otimes \nabla \rho_2 &= -c \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \otimes \nabla \rho + \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) \otimes \nabla \rho + \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \otimes \nabla \rho_2 \\ &= \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) \otimes \nabla \rho + \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \otimes \nabla c \end{aligned} \quad (\text{E.81})$$

De même, on peut écrire à partir de (E.79)-(E.80) et des relations  $\rho_1 = \rho(1 - c)$ ,  $\rho_2 = \rho c$  :

$$\begin{aligned} \rho_1 \nabla \cdot \phi_1 + \rho_2 \nabla \cdot \phi_2 &= \rho \nabla \cdot \phi_1 + \rho c \nabla \cdot (\phi_2 - \phi_1) \\ &= \rho \nabla \cdot \left( \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) \right) - \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \cdot \nabla c \end{aligned} \quad (\text{E.82})$$

A partir des relations (E.81) et (E.82), les équations de conservation de l'impulsion du mélange (E.72) s'écrivent finalement :

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{\Gamma} &= \nabla \cdot \left( \mathbf{w} \otimes \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \right) + \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathbf{w}} \cdot \nabla \mathbf{w} - \rho \nabla \mathcal{G} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_1 + \boldsymbol{\tau}_2) \\ &\quad - \nabla \left( p - \rho \nabla \cdot \left( \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) \right) + \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \cdot \nabla c \right) \\ &\quad - \nabla \cdot \left( \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla \rho} \right) \otimes \nabla \rho + \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \otimes \nabla c \right) \end{aligned} \quad (\text{E.83})$$

## E.6 Modèles de Cahn-Hilliard pour les mélanges

On se propose dans cette partie de dériver les équations de transport et les conditions d'équilibre pour un mélange de deux fluides du second gradient dans le cas particulier où seule la fraction

massique joue le rôle de paramètre d'ordre. En d'autres termes, la dépendance en  $\nabla\rho$  de l'énergie interne n'est plus prise en compte et l'énergie interne du mélange dépend de  $\rho$ ,  $c$ ,  $s$  et  $\nabla c$ . Nous rappelons que cette classe de modèles est assimilée aux modèles dits de Cahn-Hilliard. Les développements présentés dans ce paragraphe conduisent à un résultat général dans le sens où nous ne précisons pas une forme particulière pour l'énergie interne, nous nous plaçons seulement dans le cas où seul  $c$  joue le rôle de paramètre d'ordre.

### E.6.1 Relation de Gibbs

Dans le cas général, la relation de Gibbs pour un mélange dont l'énergie interne dépend de  $\rho$ ,  $c$ ,  $s$ ,  $\nabla\rho$  et  $\nabla c$  est donnée par la relation (E.76). Dans le cas où l'énergie interne du mélange ne dépend pas de  $\nabla\rho$ , les expressions (E.79) et (E.80) pour  $\phi_1$  et  $\phi_2$  se simplifient et deviennent :

$$\phi_1 = -c \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \quad (\text{E.84})$$

$$\phi_2 = (1 - c) \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \quad (\text{E.85})$$

Les relations (E.84) et (E.85) sont cohérentes avec l'identité de Gibbs (E.76) puisque la relation  $\phi_1 + c(\phi_2 - \phi_1) = 0$  est vérifiée quelle que soit l'expression de l'énergie interne du mélange. A partir des relations (E.84) et (E.85), l'identité de Gibbs pour le mélange (E.76) s'écrit sous la forme :

$$de = \left( \frac{p}{\rho^2} + \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \cdot \nabla c \right) d\rho + Tds + \left( \mu + \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \cdot \nabla \rho \right) dc + \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \cdot d(\nabla c) \quad (\text{E.86})$$

On rappelle que  $p$  et  $\mu$  ont respectivement la signification d'une pression et d'un potentiel chimique mais ne correspondent pas à la définition classique (*i.e.* thermodynamique) de la pression et du potentiel chimique du mélange.

### E.6.2 Système d'équations

Dans le cas où l'énergie interne du mélange dépend de  $\rho$ ,  $c$ ,  $s$ ,  $\nabla\rho$  et  $\nabla c$ , les équations de transport sont données par (E.57), (E.62) et (E.83). Dans le cas où l'énergie interne ne dépend pas de  $\nabla\rho$ , le système complet des équations de transport d'un mélange de deux fluides du second gradient devient :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (\text{E.87})$$

$$\frac{d\rho c}{dt} = -\rho c \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot \left( \frac{1}{\varsigma} \left( \frac{\rho_1 \rho_2}{\rho} \right)^2 \nabla \tilde{\mu} \right) \quad (\text{E.88})$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla \left( p + \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \cdot \nabla c \right) - \nabla \cdot \left( \rho \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \otimes \nabla c \right) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \rho \nabla \mathcal{G} \quad (\text{E.89})$$

Dans (E.89), on a négligé les termes associés au potentiel  $\mathcal{E}$  et on a supposé pour simplifier que les contributions visqueuses  $\boldsymbol{\tau}_1$  et  $\boldsymbol{\tau}_2$  pouvaient être regroupées sous la forme d'un tenseur des contraintes visqueuses unique  $\boldsymbol{\tau}$  pour le mélange.

Dans (E.88), on rappelle que  $\varsigma$  est un coefficient de frottement qui dépend dans le cas général des fluides en présence et  $\tilde{\mu}$  est le potentiel chimique généralisé du mélange défini par (E.60) :

$$\tilde{\mu} = \mu - \nabla \cdot (\phi_2 - \phi_1) = \mu - \nabla \cdot \left( \frac{\partial e}{\partial \nabla c} \right) \quad (\text{E.90})$$

### E.6.3 Conditions d'équilibre

On reprend dans cette partie les travaux de Gouin et Gavriljuk [64] sur les conditions d'équilibre pour un mélange de deux fluides du second gradient et on particularise leur développements dans le cas où l'énergie interne du mélange dépend de  $\rho$ ,  $c$ ,  $s$  et  $\nabla c$ . Les conditions d'équilibre sont dérivées dans le cas isotherme et les développements seront donc menés à partir de l'énergie libre plutôt qu'à partir de l'énergie interne.

Dans le cas isotherme, l'énergie libre volumique  $F$  d'un mélange de deux fluides du second gradient dépend dans le cas général des densités et des gradients de densité. Pour un système  $\Omega$ , dont la frontière  $\partial\Omega$  est porteuse d'une énergie surfacique  $F_s$  telle que  $F_s = F_s(\rho_1, \rho_2)$ , l'énergie libre totale  $\mathcal{F}$  s'écrit :

$$\mathcal{F} = \int_{\Omega} F(\rho_1, \rho_2, \nabla\rho_1, \nabla\rho_2) d\Omega + \oint_{\partial\Omega} F_s(\rho_1, \rho_2) d\sigma \quad (\text{E.91})$$

Les conditions d'équilibre pour le mélange peuvent être obtenues à partir de (E.91) en annulant les variations  $\delta_k \mathcal{F}$  pour chaque constituant  $k$  du mélange, c'est à dire :

$$\delta_k \mathcal{F} = \int_{\Omega} \left( \left( \frac{\partial F}{\partial \rho_k} \right)_{\nabla \rho_k} \delta_k \rho_k + \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla \rho_k} \right)_{\rho_k} \cdot \delta_k (\nabla \rho_k) \right) d\Omega + \oint_{\partial\Omega} \left( \frac{\partial F_s}{\partial \rho_k} \right) \delta_k \rho_k d\sigma = 0 \quad (\text{E.92})$$

où les variations  $\delta_k$  sont définies sur les espaces de référence  $\Omega_{0k}$  (relation (E.21)). Pour simplifier, on posera par la suite  $\delta_k = \delta$  si aucune confusion n'est possible.

A partir de (E.92), Gouin et Gavriljuk ont dérivé les conditions d'équilibre et on se propose ici de reprendre une partie de leurs développements dans le cas particulier où l'énergie libre dépend de  $\rho$ ,  $c$  et  $\nabla c$ . Dans ce cas, les conditions d'équilibre (E.92) deviennent à partir de la définition générale (E.16) de  $\phi_k$  :

$$\delta_k \mathcal{F} = \int_{\Omega} \left( \left( \frac{\partial F}{\partial \rho_k} \right)_{\nabla c} \delta \rho_k + \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla c} \right)_{\rho_k} \cdot \delta_k (\nabla c) \right) d\Omega + \oint_{\partial\Omega} \left( \frac{\partial F_s}{\partial \rho_k} \right) \delta \rho_k d\sigma = 0 \quad (\text{E.93})$$

On rappelle que les opérateurs  $\delta_k$  et  $\nabla$  commutent puisque ils ne sont pas définis sur les mêmes espaces. On obtient ainsi dans (E.93)  $\delta_k \nabla c = \nabla \delta_k c$ . On rappelle également que  $\rho_1 = \rho(1 - c)$  et  $\rho_2 = \rho c$  soit :

$$\delta_1 c = -\frac{c}{\rho} \delta \rho_1, \quad \delta_2 c = \frac{1-c}{\rho} \delta \rho_2 \quad (\text{E.94})$$

A partir des relations (E.94), on peut poser  $\delta_k c = a_k \delta \rho_k$  et à partir d'une intégration par parties et du théorème de Green, les variations (E.93) deviennent :

$$\begin{aligned} \delta_k \mathcal{F} &= \int_{\Omega} \left( \left( \frac{\partial F}{\partial \rho_k} \right)_{\nabla c} - a_k \nabla \cdot \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla c} \right)_{\rho_k} \right) \delta \rho_k d\Omega \\ &+ \oint_{\partial\Omega} \left( \left( \frac{\partial F_s}{\partial \rho_k} \right) + \mathbf{n} \cdot a_k \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla c} \right)_{\rho_k} \right) \delta \rho_k d\sigma \end{aligned} \quad (\text{E.95})$$

A partir de (E.95), on peut suivre les mêmes développements que ceux menés par Gouin et Gavriljuk et on montre que les conditions d'équilibre pour  $k = 1, 2$  sont :

$$\nabla \left( \left( \frac{\partial F}{\partial \rho_k} \right)_{\nabla c} - a_k \nabla \cdot \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla c} \right)_{\rho_k} \right) = 0, \quad \text{dans } \Omega \quad (\text{E.96})$$

$$\left( \frac{\partial F_s}{\partial \rho_k} \right) + \mathbf{n} \cdot a_k \left( \frac{\partial F}{\partial \nabla c} \right)_{\rho_k} = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (\text{E.97})$$

Les conditions (E.96)-(E.97) sont les conditions d'équilibre, dans le cas isotherme, d'un mélange de deux fluides du second gradient pour lequel l'énergie libre a une dépendance en  $\nabla c$ , elles constituent un cas particulier des conditions dérivées par Gouin et Gavriluyk pour les mélanges de deux fluides du second gradient et un résultat général pour les modèles de Cahn-Hilliard.

On peut encore développer les conditions (E.96) sans toutefois préciser une forme particulière pour l'énergie libre ou, de manière équivalente, de l'énergie interne. On rappelle pour cela les relations :

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \rho_k}\right)_{\nabla c} = \rho \left(\frac{\partial f}{\partial \rho_k}\right)_{\nabla c} + f, \quad \left(\frac{\partial f}{\partial \rho_k}\right)_{\nabla c} = \left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)_{c, \nabla c} + \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial \rho_k} - c\right) \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)_{\rho, \nabla c}$$

On note également l'identité :

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \nabla c}\right)_{\rho_k} = \rho \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla c}\right)_{\rho, c}$$

Les conditions d'équilibre (E.96) sont alors données par :

$$\rho \left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)_{c, \nabla c} - c \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)_{\rho, \nabla c} + f + \frac{c}{\rho} \nabla \cdot \left(\rho \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla c}\right)_{\rho, c}\right) = C_1 \quad (\text{E.98})$$

$$\rho \left(\frac{\partial f}{\partial \rho}\right)_{c, \nabla c} + (1-c) \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)_{\rho, \nabla c} + f - \frac{(1-c)}{\rho} \nabla \cdot \left(\rho \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla c}\right)_{\rho, c}\right) = C_2 \quad (\text{E.99})$$

où  $C_1$  et  $C_2$  sont deux constantes d'intégration. Enfin, les conditions d'équilibre sur le bord  $\partial\Omega$  du domaine sont données par :

$$\left(\frac{\partial F_s}{\partial \rho}\right)_c - \frac{c}{\rho} \left(\frac{\partial F_s}{\partial c}\right)_\rho - \mathbf{n} \cdot c \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla c}\right)_{\rho, c} = 0 \quad (\text{E.100})$$

$$\left(\frac{\partial F_s}{\partial \rho}\right)_c + \frac{1-c}{\rho} \left(\frac{\partial F_s}{\partial c}\right)_\rho + \mathbf{n} \cdot (1-c) \left(\frac{\partial f}{\partial \nabla c}\right)_{\rho, c} = 0 \quad (\text{E.101})$$

# Bibliographie

- [1] A. Ahmadi, A. Aigueperse, and M. Quintard. Calculation of the effective properties describing active dispersion in porous media : from simple to complex unit cells. *Advances in Water Resources*, 24 :423–438, 2001.
- [2] A. Ahmadi, M. Quintard, and S. Whitaker. Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media V. Two-equation model for solute transport with adsorption. *Advances in Water Resources*, 22(1) :59–86, 1998.
- [3] W.H. Amarasooriya and T.G. Theofanous. Premixing of steam explosions : A three-fluid model. *Nuclear Engineering and Design*, 126 :23–39, 1991.
- [4] D.M. Anderson, G.B. McFadden, and A.A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 30 :139–165, 1998.
- [5] D.M. Anderson, G.B. McFadden, and A.A. Wheeler. A Phase-Field model of solidification with convection. *Physica D*, 135 :175–194, 2000.
- [6] S. Angelini, W.W. Yuen, and T.G. Theofanous. Premixing-related behavior of steam explosions. *Nuclear Engineering and Design*, 155 :115–157, 1995.
- [7] P. Angot, C.H. Bruneau, and P. Fabrie. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows. *Numerische Mathematik*, 81(4) :497–520, 1999.
- [8] T. Arbogast. Analysis of the simulation of single phase flow through a naturally fractured reservoir. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 26(1) :12–29, 1989.
- [9] T. Arbogast, J. Douglas, and U. Hornung. Derivation of the double porosity model of single phase flow via homogenization theory. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 21 :823–836, 1990.
- [10] K. Atkhen and G. Berthoud. Experimental and numerical investigations on debris bed co-olability in a 3D homogeneous configuration. In *Proceedings of ICON9, 9<sup>th</sup> International Conference on Nuclear Engineering*, Nice Acropolis, France, 8-12 April 2001.
- [11] J.L. Auriault. Nonsaturated deformable porous media : Quasistatics. *Transport in Porous Media*, 2 :45–64, 1987.
- [12] J.L. Auriault and J. Lewandowska. Modelling of pollutant migration in porous media with interfacial transfer : local equilibrium/non-equilibrium. *Mechanics of Cohesive-Frictional Materials*, 2 :205–221, 1997.
- [13] J.L. Auriault and P. Royer. Double conductivity media : A comparison between phenomenological and homogenization approaches. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 36(10) :2613–2621, 1993.
- [14] S. Azizi, C. Moyne, and A. Degiovanni. Approche expérimentale et théorique de la conductivité thermique des milieux poreux humides –I. Expérimentation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(11) :2305–2317, 1988.

- [15] J.W. Barrett, J.F. Blowey, and H. Garcke. Finite element approximation of the Cahn-Hilliard equation with degenerate mobility. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 37(1) :286–318, 1999.
- [16] C. Béchaud, F. Duval, F. Fichot, M. Quintard, and M. Parent. Debris bed coolability using a 3-D two phase model in a porous medium. In *Proceedings of ICONE 9, 9<sup>th</sup> International Conference on Nuclear Engineering*, Nice Acropolis, France, April 2001.
- [17] G. Beckett, J.A. Mackenzie, and M.L. Robertson. A moving mesh finite element method for the solution of two-dimensional Stefan problems. *Journal of Computational Physics*, 168 :500–518, 2001.
- [18] A. Bedford and D.S. Drumheller. Theories of immiscible and structured mixtures. *International Journal of Engineering Science*, 21(8) :863–960, 1983.
- [19] G. Berthoud and M. Valette. Development of a multidimensional model for the premixing phase of a fuel-coolant interaction. *Nuclear Engineering and Design*, 149 :409–418, 1994.
- [20] H. Bertin, M. Panfilov, and M. Quintard. Two types of transient phenomena and full relaxation macroscale model for single phase flow through double porosity media. *Transport in Porous Media*, 39(1) :73–96, 2000.
- [21] J.F. Bloch and J.L. Auriault. Heat transfer in nonsaturated porous media : Modelling by homogenisation. *Transport in Porous Media*, 30 :301–321, 1998.
- [22] A. Bouddour, J.L. Auriault, and M. Mhamdi-Alaoui. Heat and mass transfer in wet porous media in presence of evaporation-condensation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 41(15) :2263–2277, 1998.
- [23] A. Bourgeat, M. Quintard, and S. Whitaker. Eléments de comparaison entre la méthode d’homogénéisation et la méthode de prise de moyenne avec fermeture. *C. R. Acad. Sci. II*, 306 :463–466, 1988.
- [24] P. Bousquet-Mélou. *Modélisation Macroscopique et Simulation Numérique de la Solidification des Mélanges Binaires*. Mécanique-Energétique, Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, 2000.
- [25] P. Bousquet-Mélou, A. Nocolae, B. Goyeau, and M. Quintard. Averaged solute transport during solidification of a binary mixture : active dispersion in dendritic structures. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 33B(3) :365–376, 2002.
- [26] F. Boyer. *Ecoulements Diphasiques de Type Cahn-Hilliard*. Mathématiques Appliqués, Université Bordeaux 1, 2001.
- [27] F. Boyer. A theoretical and numerical model for the study of incompressible mixture flows. *Computers & Fluids*, 31 :41–68, 2002.
- [28] J.U. Brackbill, D.B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100 :335–354, 1992.
- [29] J.M. Broughton, P. Kuan, D.A. Petti, and E.L. Tolman. A scenario of the Three Mile Island unit 2 accident. *Nuclear Technology*, 87 :34–53, 1989.
- [30] J.W. Cahn. On spinodal decomposition. *Acta Metallurgica*, 9 :795–801, September 1961.
- [31] J.W. Cahn and J.E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy. *Journal of Chemical Physics*, 28(2) :258–267, February 1958.
- [32] M.L. Carboneau, V.T. Berta, and M.S. Modro. Experiment analysis and summary report for OECD LOFT project fission product experiment LP-FP-2. Technical Report OECD LOFT-T-3806, 1989.

- [33] R.G. Carbonell and S. Whitaker. Heat and mass transfer in porous media. In J. Bear and M.Y. Corapcioglu, editors, *Fundamentals of Transport Phenomena in Porous Media*, pages 123–198. Martinus Nijhoff Publishers, 1984.
- [34] P. Casal. La théorie du second gradient et de la capillarité. *C. R. Acad. Sc*, 274(A) :1571–1574, Mai 1972. Note présentée par Paul Germain.
- [35] D. Celentano, E. Onate, and S. Oller. A temperature-based formulation for finite element analysis of generalized phase-change problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 37 :3441–3465, 1994.
- [36] S. Chandrasekhar. *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability*. Oxford University Press, 1961.
- [37] H.C. Chang. Effective diffusion and conduction in two-phase media : a unified approach. *AIChE Journal*, 29(5) :846–853, 1983.
- [38] Y.C. Chang, T.Y. Hou, and S. Osher. A Level Set formulation of eulerian capturing methods for incompressible fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 124 :449–464, 1996.
- [39] R. Chella, D. Lasseux, and M. Quintard. Multiphase, multicomponent fluid flow in homogeneous and heterogeneous porous media. *Revue de l’Institut Français du Pétrole*, 53(3) :335–346, 1998.
- [40] R. Chella and J. Viñals. Mixing of a two-phase fluid by cavity flow. *Physical Review E*, 53(3), March 1996.
- [41] F. Cherblanc, A. Ahmadi, and M. Quintard. Two-medium description of dispersion in heterogeneous porous media : Calculation of macroscopic properties. *preprint*, 2002.
- [42] O. Chevalier. *Dynamique des Transitions de Phases dans les Mélanges de Fluides au Voisinage des Points Critiques*. Mécanique des Fluides, Ecole Supérieure de Mécanique de Marseille, Novembre 1998.
- [43] A.J. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comput.*, 22 :745–762, 1968.
- [44] M. Chung and I. Catton. Post-dryout heat transfer in a multi-dimensional porous bed. *Nuclear Engineering and Design*, 128 :289–304, 1991.
- [45] X. Coré. *Méthode adaptative de raffinement local multi-niveaux pour le calcul d’écoulements réactifs à faible nombre de Mach*. Mathématiques Appliquées, Université de Provence - Centre de Mathématiques et d’Informatique, Février 2002.
- [46] X. Coré, P. Angot, and J.C. Latché. A multilevel local mesh refinement projection method for low Mach number flows. *submitted to Mathematics and Computers in Simulation*, 2002.
- [47] E. Décossin. Numerical investigations on particulate debris bed coolability : Critical analysis of the Silfide experimental project. In *Ninth International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-9)*, October 1999. San Francisco, California.
- [48] A. de Swann. Analytic solutions for determining naturally fractured reservoir properties by well testing. *SPE J.*, pages 117–122, 1976.
- [49] A. Degiovanni and C. Moyne. Conductivité thermique de matériaux poreux humides : évaluation théorique et possibilité de mesure. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30(11) :2225–2245, 1987.
- [50] F. Dell’Isola, H. Gouin, and G. Rotoli. Nucleation of spherical shell-like interfaces by second gradient theory : Numerical simulations. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 15(4) :545–568, 1996.

- [51] F. Dell’Isola, H. Gouin, and P. Seppecher. Radius and surface tension of microscopic bubbles by second gradient theory. *C. R. Acad. Sc*, 320(IIb) :211–216, 1995.
- [52] A. Dervieux, L. Fezoui, and F. Loriot. On high resolution extensions of Lagrange-Galerkin finite-element schemes. Rapport de Recherche RR-1703, INRIA, Juin 1992.
- [53] P.W. Egolf and H. Manz. Theory and modeling of phase change materials with and without mushy regions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 37(8) :2917–2924, 1994.
- [54] I.A. Evdokimov and V.V. Likhanskii. Critical thermal fluxes in boiling in a thin hemispherical porous bed. *Atomic Energy*, 85(4) :714–721, 1998.
- [55] C. Fouillet. Etude d’une stratégie de modélisation des écoulements diphasiques à plusieurs constituants dans le cadre de la théorie du second gradient. Rapport de DEA, CEA Grenoble, DRN/DTP/SMT/LDTA, Juin 2000.
- [56] S. Gavriljuk, H. Gouin, and Y. Perepechko. A variational principle for two-fluid models. *C. R. Acad. Sc*, 324(II b) :483–490, 1997.
- [57] S. Gavriljuk and R. Saurel. Mathematical and numerical modeling of two-phase compressible flows with micro-inertia. *Journal of Computational Physics*, 175 :326–360, 2002.
- [58] P. Germain. Sur l’application de la méthode des puissances virtuelles en mécanique des milieux continus. *C. R. Acad. Sc*, 274(A) :1051–1055, 1972.
- [59] P. Germain. *Mécanique Tome II*. Ellipses. Ecole Polytechnique, 1986.
- [60] C. Gobbé and M. Quintard. Macroscopic description of unsteady heat transfer in heterogeneous media. *High Temperatures-High Pressures*, 26 :1–14, 1994.
- [61] F. Golfier, M. Quintard, and S. Whitaker. Heat and mass transfer in tubes : An analysis using the method of volume averaging. *to appear in Journal of Porous Media*, 2002.
- [62] H. Gouin. Equations du mouvement des fluides parfaits de grade  $n$  exprimée sous une forme thermodynamique. *C. R. Acad. Sc*, 305(II) :833–838, 1987.
- [63] H. Gouin. Variational theory of mixtures in continuum mechanics. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 9(5) :469–491, 1990.
- [64] H. Gouin and S. Gavriljuk. Wetting problem for multi-component fluid mixtures. *Physica A*, 268 :291–308, 1999.
- [65] B. Goyeau, T. Benihaddadene, D. Gobin, and M. Quintard. Averaged momentum equation for flow through a nonhomogeneous porous structure. *Transport in Porous Media*, 28 :19–50, 1997.
- [66] G. Grangeot, M. Quintard, and S. Whitaker. Heat transfer in packed beds : Interpretation of experiments in terms of one- and two-equation models. In *10th International Heat Transfer Conference, Brighton*, volume 5, pages 291–296, 1994.
- [67] W.G. Gray. A derivation of the equations for multi-phase transport. *Chemical Engineering Science*, 30 :229–233, 1975.
- [68] W.G. Gray and S.M. Hassanizadeh. Macroscale continuum mechanics for multiphase porous-media flow including phases, interfaces, common lines and common points. *Advances in Water Resources*, 21 :261–281, 1998.
- [69] K. Grosser, R.G. Carbonell, A. Cavero, and A.E. Sáez. Lateral thermal dispersion in gas-liquid cocurrent downflow through packed beds. *AIChE Journal*, 42(10) :2977–2983, 1996. R&D Notes.
- [70] J.L. Guermond. Some implementations of projection methods for Navier-Stokes equations. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 30(5) :637–667, 1996.

- [71] H. Guillard and C. Viozat. On the behaviour of upwind schemes in the low mach number limit. *Computers and Fluids*, 28(1) :63–86, 1999.
- [72] J. Hager and S. Whitaker. Vapor-liquid jump conditions within a porous medium : Results for mass and energy. *Transport in Porous Media*, 40 :73–111, 2000.
- [73] J. Hager, R. Wimmerstedt, and S. Whitaker. Steam drying a bed of porous spheres : Theory and experiment. *Chemical Engineering Science*, 55 :1675–1698, 2000.
- [74] N. Hanniet-Girault and G. Repetto. PHEBUS PF final FPT0 report. Technical Report SEA 1/99, Note PHEBUS IP/99/423, 1999.
- [75] T.Y. Hou, J.S. Lowengrub, and M.J. Shelley. Boundary integral methods for multicomponent fluids and multiphase materials. *Journal of Computational Physics*, 169 :302–362, 2001.
- [76] T.J.R. Hughes, M. Mallet, and A. Mizukami. A new finite element formulation for computational fluid dynamics : II. beyond SUPG. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 54 :341–355, 1986.
- [77] D. Jacqmin. An energy approach to the continuum surface tension method : Application to droplet coalescence and droplet/wall interactions. In *ASME IMECE*, San Francisco, 1995.
- [78] D. Jacqmin. An energy approach to the continuum surface tension method. *AIAA 96-0858*, pages 357–366, 1996. presented at the 34th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, NV.
- [79] D. Jacqmin. Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling. *Journal of Computational Physics*, 155 :96–127, 1999.
- [80] D. Jacqmin. Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface. *Journal of Fluid Mechanics*, 402 :57–88, 2000.
- [81] D. Jamet. *Etude des Potentialités de la Théorie du Second Gradient pour la Simulation Numérique Directe des Écoulements Liquide-Vapeur avec Changement de Phase*. Mécanique Energétique, Ecole Centrale, Paris, Octobre 1998.
- [82] D. Jamet and C. Fouillet. Communication personnelle. 2002.
- [83] D. Jamet, O. Lebaigue, N. Coutris, and J.M. Delhay. The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase-change. *Journal of Computational Physics*, 169 :624–651, 2001.
- [84] D. Jamet, D. Torres, and J.U. Brackbill. On the theory and computation of surface tension : The elimination of parasitic currents through energy conservation in the second gradient method. *Journal of Computational Physics*, in press, 2002.
- [85] D. Jasnow and J. Viñals. Coarse-grained description of thermo-capillary flow. *Physics of Fluids*, 8(3) :660–669, 1996.
- [86] D.D. Joseph. Fluid dynamics of two miscible liquids with diffusion and gradient stresses. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 9(6) :565–596, 1990.
- [87] D. Juric and G. Tryggvason. Computations of boiling flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 24(3) :387–410, 1998.
- [88] M. Kaviany. *Principles of Heat Transfer in Porous Media*. Mechanical Engineering Series. Springer, second edition, 1995.
- [89] R. Keck. *Reinitialization for Level Set Methods*. PhD thesis, University of Kaiserslautern, Department of Mathematics, Laboratory of Technomathematics, June 1998.

- [90] D.J. Korteweg. Sur la forme que prennent les équations du mouvement des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais continues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. *Archives Néerlandaises des Sciences exactes et naturelles*, 6(2) :1–24, 1901.
- [91] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski, and G. Zanetti. Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. *Journal of Computational Physics*, 113 :134–147, 1994.
- [92] P. Landereau. *Modèles Macroscopiques pour les Ecoulements Monophasiques en Milieux Poreux Fracturé : Application aux Tests de Puits*. Mécanique, ENSAM, Décembre 2000.
- [93] P. Landereau, B. Noetinger, and M. Quintard. Quasi-steady two-equation models for diffusive transport in fractured porous media : large-scale properties for densely fractured systems. *Advances in Water Resources*, 24 :863–876, 2001.
- [94] D. Lasseux, M. Quintard, and S. Whitaker. Determination of permeability tensors for two-phase flow in homogeneous porous media : Theory. *Transport in Porous Media*, 24 :107–137, 1996.
- [95] J. Levec and R.G. Carbonell. Longitudinal and lateral thermal dispersion in packed beds. Part I : Theory. *AIChE Journal*, 31(4) :581–590, 1985.
- [96] J. Levec and R.G. Carbonell. Longitudinal and lateral thermal dispersion in packed beds. Part II : Comparison between theory and experiment. *AIChE Journal*, 31(4) :591–602, 1985.
- [97] V.V. Likhanskii, A.I. Loboiko, and O.V. Khoruzhii. Critical heat fluxes when boiling occurs in a non-uniform heat-releasing porous medium. *Atomic Energy*, 84(4) :230–236, 1998.
- [98] R.J. Lipinski. A coolability model for post-accident nuclear reactor debris. *Nuclear Technology*, 65 :53–66, 1984.
- [99] J. Lowengrub and L. Truskinovsky. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 454 :2617–2654, 1998.
- [100] C.M. Marle. Les écoulements polyphasiques en milieux poreux : de l'échelle des pores à l'échelle macroscopique. *Annales des Mines*, pages 51–56, Mai-Juin 1984.
- [101] P. Mayr, M. Bürger, M. Buck, W. Schmidt, and G. Lohnert. Investigations on the coolability of debris in the lower head with WABE-2D and MESOCO-2D. *OECD/CSNI Workshop on In-Vessel Core Debris Retention and Coolability*, March 1998.
- [102] P. Mayr, M. Bürger, S.H. Kim, and A. Schatz. Boil-off transient and coolability limit of severely damaged core regions in LWR. In *Proceedings of ICONE 6, 6<sup>th</sup> International Conference on Nuclear Engineering*, Grenoble, France, October 1993.
- [103] C.T. Miller, G. Christakos, P.T. Imhoff, J.F. McBride, J.A. Pedit, and J.A. Trangenstein. Multiphase flow and transport modeling in heterogeneous porous media : challenges and approaches. *Advances in Water Resources*, 21(2) :77–120, 1998.
- [104] C. Moyne. Two-equation model for a diffusive process in porous media using the volume averaging method with an unsteady-state closure. *Advances in Water Resources*, 20(2-3) :63–76, 1997.
- [105] C. Moyne, J.C. Batsale, and A. Degiovanni. Approche expérimentale et théorique de la conductivité thermique des milieux poreux humides –II. Théorie. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(11) :2319–2330, 1988.

- [106] C. Moyne, S. Didierjean, A. Souto, and O.T. da Silveira. Thermal dispersion in porous media : one-equation model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 43 :3853–3867, 2000.
- [107] T. De Mulder. Stabilized finite element methods (SUPG, GLS, ...) for incompressible flows. In *28<sup>th</sup> CFD VKI Lecture Series*. von Karman Institute, von Karman Institute for Fluid Dynamics. 72, Chaussée de Waterloo. B-1640 Rhode Saint Genèse. Belgium, 1997.
- [108] B.T. Nadiga and S. Zaleski. Investigations of a two-phase fluid model. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 15(6) :885–896, 1996.
- [109] A.S. Naik and V.K. Dhir. Forced flow evaporative cooling of a volumetrically heated porous layer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 25(4) :541–552, 1982.
- [110] I. Nozad, R.G. Carbonell, and S. Whitaker. Heat conduction in multiphase systems—i theory and experiments for two-phase systems. *Chemical Engineering Science*, 40(5) :843–855, 1985.
- [111] S. Osher and R. Fedkiw. Level Set methods : An overview and some recent results. *Journal of Computational Physics*, 169 :463–502, 2001.
- [112] P. Papon and J. Leblond. *Thermodynamique des états de la matière*. Hermann Editeurs des Sciences et des Arts, 1990.
- [113] I.K. Park, G.C Park, and K.H. Bang. Multiphase flow modeling of molten material-vapor-liquid mixtures in thermal nonequilibrium. *KSME International Journal*, 14(5) :553–561, 2000.
- [114] J-N. Pernin. Deux modèles de transfert de chaleur en milieu poreux. *C.R. Acad. Sciences*, 299(2) :49–52, 1984.
- [115] F. Petit. *Ebullition en milieu poreux et renoyage d'un lit de débris de Réacteur Nucléaire*. Mécanique, ENSAM, Bordeaux, Avril 1998.
- [116] F. Petit, F. Fichot, and M. Quintard. Ebullition en milieu poreux : Expérimentation. In J. Pantaloni and R. Martin, editors, *Congrès SFT 1998 - Thermique et Environnement*, pages 452–457. Elsevier, Paris, 1998.
- [117] F. Petit, F. Fichot, and M. Quintard. Ecoulement diphasique en milieux poreux : modèle à non-équilibre local. *International Journal of Thermal Sciences*, 38 :239–249, 1999.
- [118] M. Quintard, F. Cherblanc, and S. Whitaker. Dispersion in heterogeneous porous media : One-equation non-equilibrium model. *Transport in Porous Media*, 44 :181–203, 2001.
- [119] M. Quintard, M. Kaviany, and S. Whitaker. Two-medium treatment of heat transfer in porous media : Numerical results for effective properties. *Advances in Water Resources*, 20 :77–94, 1997.
- [120] M. Quintard, B. Ladevie, and S. Whitaker. Effect of homogeneous and heterogeneous source terms on the macroscopic description of heat transfer in porous media. In *Symposium on Energy Engineering in the 21st Century*, volume 2, pages 482–489, Hong Kong, January 2000.
- [121] M. Quintard and S. Whitaker. Two-phase flow in heterogeneous porous media : The method of large-scale averaging. *Transport in Porous Media*, 3 :357–413, 1988.
- [122] M. Quintard and S. Whitaker. Two-phase flow in heterogeneous porous media. I : The influence of large spatial and temporal gradients. *Transport in Porous Media*, 5 :341–379, 1990.
- [123] M. Quintard and S. Whitaker. One- and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems. In *Advances in Heat Transfer*, volume 23, pages 369–464. Academic Press, New York, 1993.

- [124] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered porous media : volume-averaged equations, closure problems, and comparison with experiment. *Chemical Engineering Science*, 48(14) :2537–2564, 1993.
- [125] M. Quintard and S. Whitaker. Convection, dispersion, and interfacial transport of contaminants : Homogeneous porous media. *Advances in Water Resources*, 17 :221–239, 1994.
- [126] M. Quintard and S. Whitaker. Local thermal equilibrium for transient heat conduction : Theory and comparison with numerical experiments. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(15) :2779–2796, 1995.
- [127] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media. I : Theoretical development of region-averaged equations for slightly compressible single-phase flow. *Advances in Water Resources*, 19(1) :29–47, 1996.
- [128] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in chemically and mechanically heterogeneous porous media. II : Comparison with numerical experiments for slightly compressible single-phase flow. *Advances in Water Resources*, 19(1) :49–60, 1996.
- [129] M. Quintard and S. Whitaker. Dissolution of an immobile phase during flow in porous media. *Industrial and Engineering Chemical Research*, 38(3) :833–844, 1999.
- [130] M. Quintard and S. Whitaker. Theoretical analysis of transport in porous media. In H. Hadim, K. Vafai, and M. Decker, editors, *Handbook of Heat Transfer in Porous Media*, chapter 1, pages 1–52. Inc. New York, 2000.
- [131] L. Ramond, J.C. Batsale, and C. Gobbé. Mesure de coefficient d'échange thermique en milieux hétérogènes par thermographie infrarouge. Application d'un modèle à deux températures. *Int. J. Therm. Sci.*, 38 :250–257, 1999.
- [132] P. Rubiolo and J-M. Gatt. Modeling of the radiative contribution to heat transfer in porous media composed of spheres or cylinders. *International Journal of Thermal Sciences*, (41) :401–411, 2002.
- [133] T. Schulenberg and U. Müller. An improved model for two-phase flow through beds of coarse particles. *International Journal of Multiphase Flow*, 13(1) :87–97, 1987.
- [134] P. Seppecher. *Etude d'une Modélisation des Zones Capillaires Fluides : Interfaces et Lignes de Contact*. Mécanique, Université Paris VI, Avril 1987.
- [135] P. Seppecher. Thermodynamique des zones capillaires. *Annales de Physique*, 13(3) :13–22, 1988.
- [136] P. Seppecher. Etude des conditions aux limites en théorie du second gradient : Cas de la capillarité. *C. R. Acad. Sc*, 309(II) :497–502, 1989.
- [137] J. Serrin. Mathematical principles of classical fluid mechanics. In S. Flügge, editor, *Encyclopedia of Physics*, volume VIII/1, pages 125–263. Springer-Verlag, 1959.
- [138] G. Son, N. Ramanujapu, and V.K. Dhir. Numerical simulation of bubble merger process on a single nucleation site during pool nucleate boiling. *Journal of Heat Transfer*, 124 :51–62, 2002.
- [139] M. Sussman, A.S. Almgren, J.B. Bell, Colella P., L.H. Howell, and M.L. Welcome. An adaptive Level Set approach for incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 148 :81–124, 1999.
- [140] M. Sussman, P. Smereka, and S. Osher. A Level Set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, 114 :146–159, 1994.
- [141] M. Sözen and K. Vafai. Analysis of the non-thermal equilibrium condensing flow of a gas through a packed bed. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 33(6) :1247–1261, 1990.

- [142] D.J. Torres and J.U. Brackbill. The point-set method : Front-Tracking without connectivity. *Journal of Computational Physics*, 165 :620–644, 2000.
- [143] G. Tryggvason, B. Bunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, W. Tauber, J. Han, S. Nas, and Y.J. Jan. A front-tracking method for the computations of multiphase flow. *Journal of Computational Physics*, 169 :708–759, 2001.
- [144] N.K. Tutu, T. Ginsberg, and J.C. Chen. Interfacial drag for two-phase flow through high permeability porous bed. *Journal of Heat Transfer*, 106 :865–870, 1984.
- [145] K. Vafai and M. Sozen. Analysis of energy and momentum transport for fluid flow through a porous bed. *Journal of Heat Transfer*, 112 :690–699, 1990.
- [146] S. Vincent and J.P. Caltagirone. A one-cell local multigrid method for solving unsteady incompressible multiphase flows. *Journal of Computational Physics*, 163 :172–215, 2000.
- [147] C. Viozat. *Calcul d'écoulements stationnaires et instationnaires à petit nombre de Mach, et en maillages étirés*. Sciences de l'ingénieur, Université de Nice Sophia Antipolis, 1998.
- [148] J.A. Warren and W.J. Boettinger. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the Phase-Field method. *Acta metall. mater*, 43(2) :689–703, 1995.
- [149] S. Whitaker. Heat and mass transfer in granular porous media. In *Advances in Drying*, volume 1, pages 23–61. Hemisphere, New-York, 1980.
- [150] S. Whitaker. A simple geometrical derivation of the spatial averaging theorem. *Chemical Engineering Education*, 19 :18–21 and 50–52, 1985.
- [151] S. Whitaker. Flow in porous media II : The governing equations for immiscible, two-phase flow. *Transport in Porous Media*, 1 :105–125, 1986.
- [152] S. Whitaker. Improved constraints for the principle of local thermal equilibrium. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30 :983–997, 1991.
- [153] S. Whitaker. Coupled transport in multiphase systems : A theory of drying. *Advances in Heat Transfer*, 31 :1–102, 1998. Academic Press, New-York.
- [154] S. Whitaker. *The Method of Volume Averaging*, volume 13 of *Theory and Applications of Transport in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [155] A.W. Woods. Liquid and vapor flow in superheated rock. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31 :171–199, 1999.
- [156] F. Zanotti and R.G. Carbonell. Development of transport equations for multiphase systems—I general development for two phase systems. *Chemical Engineering Science*, 39(2) :263–278, 1984.
- [157] F. Zanotti and R.G. Carbonell. Development of transport equations for multiphase systems—III application to heat transfer in packed beds. *Chemical Engineering Science*, 39(2) :299–311, 1984.
- [158] H.Y. Zhang and X.Y. Huang. A two-equation analysis of convection heat transfer in porous media. *Transport in Porous Media*, 44 :305–324, 2001.



## Résumé

Ce travail porte sur la modélisation macroscopique des transferts de masse et de chaleur dans un milieu poreux surchauffé parcouru par un écoulement liquide-vapeur avec changement de phase. Dans le cadre du non équilibre thermique local entre les trois phases du système, un modèle macroscopique quasi-stationnaire à trois températures est établi par prise de moyenne volumique des équations de transport locales. Un des aspects attrayants de la technique de changement d'échelle réside ici dans le développement d'une forme fermée du taux d'évaporation à l'échelle macroscopique dépendant des températures moyennes et des propriétés effectives. Le modèle macroscopique résultant peut être vu comme une généralisation des modèles à trois températures existants obtenus dans le cadre d'une approche heuristique. Les principales différences sont la présence de termes de transport supplémentaires et un couplage entre les différents continus (phases et interface) qui semble plus complexe. L'intérêt majeur de l'approche développée ici est de proposer des problèmes de fermeture permettant de déterminer les coefficients de transport effectifs, tels que les tenseurs de dispersion et les coefficients d'échange, à partir d'une description locale sur une cellule représentative du milieu considéré. Ces problèmes ont été résolus pour des cellules unitaires simples pour obtenir une première estimation des propriétés effectives. Pour ces cellules et pour des problèmes de diffusion-évaporation, des comparaisons avec des solutions numériques du problème local ont permis d'illustrer l'intérêt pratique et les potentialités du modèle macroscopique. Pour des cellules unitaires plus complexes, une simulation numérique directe de l'écoulement diphasique à l'échelle locale a été effectuée permettant d'avoir accès au champ de vitesse et à la topologie des interfaces. L'outil de simulation numérique directe développé est basé sur une méthode à interface diffuse. Ces méthodes sont bien adaptées aux longueurs caractéristique à l'échelle locale du milieu poreux et les développements menés montrent que l'on peut envisager de prendre en compte le changement de phase dans le cadre des modèles de Cahn-Hilliard. Les résultats obtenus sur des cellules 2D soulignent le rôle important de la répartition des phases et indiquent que les corrélations pour les propriétés effectives, en fonction de la saturation et des nombres de Péclet, peuvent être relativement complexes.

**Mots clés :** ébullition, milieu poreux, transferts de chaleur et de masse, non équilibre thermique local, prise de moyenne volumique, modèle à trois températures, simulation numérique directe, Cahn-Hilliard, théorie du second gradient, propriétés effectives.

## Abstract

This work deals with the macroscopic modeling of heat and mass transfer in a superheated porous medium subjected to a liquid-vapor flow with phase change. Considering local thermal non-equilibrium between the three phases, a quasi-steady three-temperature macroscopic model is derived using the volume averaging method. An attractive feature of the scaling-up theory lies in the derivation of a closed form of the evaporation rate at the macroscopic level depending on the large scale temperatures and the effective properties. The resulting macroscopic model may be seen as a generalization of existing three-temperature models obtained from a heuristic approach. The main differences are the existence of additional transport terms and a coupling between the macroscopic continua (phases and interface) that seems to be more complex. The major interest of the proposed approach is to provide closure problems that allow to determine the effective transport coefficients, such as the thermal dispersion tensors and the heat exchange coefficients, from a local scale description over a representative cell of the porous medium under consideration. These problems have been solved for simple unit cells to provide first estimates of the effective properties. For these unit cells and for purely diffusive processes with phase change, comparisons with numerical solutions of the local problem have shown the practical interest and the potentialities of the macroscopic model. For more complex unit cells, a direct numerical simulation of the two-phase flow at the local scale has been performed to provide the required velocity field and the interface topology. The direct numerical simulation tool which has been developed is based on a diffuse interface method. These methods are well suited to the local scale characteristic lengths of the porous medium and the developments carried out show that it is possible to extend them to take into account phase change in the framework of Cahn-Hilliard models. Results obtained on 2D unit cells emphasize a strong impact of the pore-scale phase repartitions and indicate that correlations for the effective properties involving saturation and Péclet numbers can be relatively complex.

**Key words :** boiling, porous medium, heat and mass transfer, local thermal non equilibrium, volume averaging, three-temperature model, direct numerical simulation, Cahn-Hilliard, second gradient theory, effective properties.