

Formulation variationnelle de la relaxation constitutive à vitesse finie de l'état mécanique en milieu multiphasique

T. Heuzé¹, N. Favrie²

¹ Univ Brest, Bretagne INP, Institut de Recherche Dupuy de Lôme, UMR CNRS 6027 F-29200 Brest, France, thomas.heuze@enib.fr

² Aix-Marseille Université, CNRS, IUSTI UMR 7343, 13543, Marseille, France, nicolas.favrie@univ-amu.fr

Résumé — On présente dans ce travail une formulation variationnelle de la relaxation à vitesse finie des états mécaniques de différentes phases cohabitant au sein d'un même point matériel, via leur équations constitutives. L'objectif à terme est de pouvoir conduire des simulations numériques d'écoulements compressibles multiphasiques comprenant des phases solide et/ou fluide. En première approche, et pour des raisons de simplicité, la présentation est ici effectuée sur un milieu fluide. On s'attache dès lors à décrire la relaxation d'une pression d'interface.

Mots clés — Relaxation à vitesse finie, Milieu multiphasique, Formulation variationnelle.

1 Introduction

La modélisation eulérienne d'écoulements compressibles multiphasiques, comprenant des phases potentiellement solide et/ou fluide, est d'une grande importance pour la simulation numérique d'applications de l'ingénieur pour des milieux fluides (cavitation au voisinage de pale, lithotripsie) comme pour des milieux solides (compaction de milieux hétérogènes poreux [1]). Elle nécessite aussi bien de pouvoir suivre des interfaces au cours du temps, que de traiter des mélanges au sein d'un maillage de calcul fixe. Parmi les différentes approches existantes, la méthode des interfaces diffuses [2] permet de considérer les interfaces et les mélanges avec les mêmes modèle et schéma numérique dans tout le domaine de calcul, les interfaces étant considérées comme des zones de mélange.

Pendant, les interfaces sont autorisées à diffuser numériquement, et s'étalent donc sur plusieurs mailles au cours de la simulation. La simulation numérique de chocs sur ces interfaces étalées ou dans les mélanges peut faire apparaître un phénomène de piégeage d'onde résultant d'une vitesse du son du mélange plus faible de celle de chaque phase, conduisant à des problèmes de convergence du calcul. À une échelle microscopique, la géométrie des interfaces entre phases joue un rôle important sur l'interaction des ondes, et notamment avec celles dont la longueur d'onde est de l'ordre de grandeur de la taille caractéristique de formes particulières de type bulles, pores. En particulier ces interactions locales font apparaître à l'échelle macroscopique des effets dissipatifs d'amortissement et d'atténuation, dont il est important de rendre compte dans les simulations numériques multiphasiques. Une étape de relaxation résolue après l'étape de convection sur le maillage de calcul [2] permet de modéliser ces effets, et a montré entre autres sa capacité à limiter le phénomène de piégeage d'onde, et améliore donc la convergence des calculs.

On propose dans ce travail une modélisation mathématique du processus de relaxation à vitesse finie des états mécaniques de chaque phase à l'échelle locale, via leur équations constitutives, c'est-à-dire avec un ensemble d'équations différentielles ordinaires. Cette modélisation est thermodynamiquement cohérente, incluant des potentiels d'état et de dissipation. Cette modélisation peut se réécrire comme un principe variationnel, c'est-à-dire un problème d'optimisation d'une fonctionnelle. Afin de montrer la généralité de l'approche tout en gardant une certaine simplicité dans la présentation, on considère ici un milieu fluide multiphasique dont on souhaite décrire l'évolution d'une pression d'interface au cours du processus de relaxation. Ceci pose quelques bases avant une extension future vers des milieux solides multiphasiques ou des couplages fluide/solide.

2 Modélisation d'écoulements compressibles multiphasiques

2.1 Modélisation à un champ de vitesse

La modélisation d'écoulements compressibles multiphasiques à un champ de vitesse présentée dans [2] s'écrit pour N phases avec les équations suivantes

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \alpha_k \cdot \mathbf{u} &= (\dot{\alpha}_k)_s, \\
 \frac{\partial (\alpha_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{u}) &= 0, \\
 \frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbf{1}) &= \mathbf{0}, \\
 \frac{\partial (\alpha_k \rho_k e_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k e_k \mathbf{u}) + \alpha_k p_k \nabla \cdot \mathbf{u} &= \dot{s},
 \end{aligned} \tag{1}$$

où $\alpha_k, \rho_k, p_k, e_k$ sont les fractions volumiques, masses volumiques, pression et énergie interne spécifiques de chaque phase k . Les masse volumique, pression et énergie interne spécifique de mélange s'écrivent alors

$$\rho = \sum_{k=1}^N \alpha_k \rho_k, \quad p = \sum_{k=1}^N \alpha_k p_k, \quad e = \sum_{k=1}^N Y_k e_k \tag{2}$$

avec les fractions massiques Y_k de chaque phase vérifiant

$$Y_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho}, \quad \frac{dY_k}{dt} = 0. \tag{3}$$

Le système est par ailleurs fermé en se donnant une équation d'état

$$e_k = e_k^h(\rho_k, \eta_k). \tag{4}$$

Les pressions, entropies, températures de chaque phase k ne sont pas supposées *a priori* être en équilibre local dans le système d'équations (1). En revanche, ces grandeurs sont censées tendre vers un équilibre à une vitesse finie, d'où l'introduction de termes sources $\{(\dot{\alpha}_k)_s, \dot{s}\}$ sur les équations de fraction volumique et d'énergie interne du système (1). Ces termes sources représentent les contributions régissant à l'échelle locale l'évolution des fractions volumiques ainsi que les échanges d'énergie entre les phases pendant la phase de relaxation.

2.2 Modélisation du processus de relaxation à vitesse finie

On suppose que la résolution numérique du système (1) est faite de façon étagée, en résolvant la partie homogène dans une première étape, puis en résolvant un ensemble d'équations différentielles ordinaires tenant compte des termes sources dans un second temps, avec comme conditions initiales la solution de la première étape. L'étape de relaxation revient à résoudre le système suivant

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} &= (\dot{\alpha}_k)_s \\
 \frac{\partial (\alpha_k \rho_k)}{\partial t} &= 0 \\
 \frac{\partial (\alpha_k \rho_k e_k)}{\partial t} &= \dot{s}
 \end{aligned} \tag{5}$$

On suppose dans ce travail que l'évolution de la fraction volumique α_k est un processus dissipatif au cours de l'étape de relaxation. Cela correspond à l'échelle locale, et à l'intérieur d'une cellule élémentaire, au mouvement des interfaces entre phases tendant vers un équilibre thermodynamique. Ce processus dissipatif peut avantageusement être décrit dans le cadre des matériaux standards [3], en postulant l'existence d'un potentiel de dissipation $\phi_k^*(\xi_k)$, convexe de la variable ξ_k , positif et nul à l'origine, tel que le système

(5) se réécrite

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} = \frac{\partial \phi_k^*(\xi_k)}{\partial \xi_k} \quad (6)$$

$$\frac{\partial (\alpha_k \rho_k)}{\partial t} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial (\alpha_k \rho_k e_k)}{\partial t} = -P_I \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} \quad (8)$$

$$T_k \dot{\eta}_k = \frac{\partial \phi_k^*(\xi_k)}{\partial \xi_k} \xi_k \quad (9)$$

$$\dot{e}_k = T_k \dot{\eta}_k - \frac{p_k}{\alpha_k \rho_k} \dot{\alpha}_k \quad (10)$$

où les termes sources $(\dot{\alpha}_k)_s = \partial \phi_k^* / \partial \xi_k$ et $s = -P_I \dot{\alpha}_k$ ont été définis, avec P_I une pression d'interface, ajoutée comme inconnue auxiliaire. Par ailleurs, les équations d'entropie (9) et de Gibbs (10) ont été ajoutées. La combinaison des équations (7) et (8) donne

$$\dot{e}_k = -\frac{P_I}{\alpha_k \rho_k} \dot{\alpha}_k. \quad (11)$$

D'un autre côté, l'introduction de l'équation (9) dans (10), tenant compte de (6), donne

$$\dot{e}_k = \frac{\partial \phi_k^*(\xi_k)}{\partial \xi_k} \left(\xi_k - \frac{p_k}{\alpha_k \rho_k} \right). \quad (12)$$

La compatibilité entre les équations (11) et (12) nécessite alors l'égalité suivante

$$\xi_k = \frac{p_k - P_I}{\alpha_k \rho_k}. \quad (13)$$

Donc la force thermodynamique ξ_k pilotant l'avancée de la fraction volumique α_k dépend de la différence entre la pression de la phase k et la pression d'interface P_I . En calculant la somme $\sum_{k=1}^N (\alpha_k \rho_k \dot{e}_k)$ à partir de l'équation (11), il vient

$$\sum_{k=1}^N (\alpha_k \rho_k \dot{e}_k) = -P_I \sum_{k=1}^N \dot{\alpha}_k, \quad (14)$$

puisque P_I est une inconnue indépendante ici, qui ne dépend explicitement d'aucune phase k . On observe donc qu'en imposant la contrainte

$$\sum_{k=1}^N \dot{\alpha}_k = 0, \quad (15)$$

alors (14) s'annule, et conduit à la conservation de l'énergie interne, et donc de l'énergie totale pendant le processus de relaxation locale. Aussi, la pression d'interface P_I apparaît comme énergétiquement conjuguée avec la contrainte (15).

3 Formulation variationnelle du processus de relaxation à vitesse finie

Dans l'esprit de [4], on introduit la fonctionnelle suivante

$$\mathcal{P}(\dot{\mathcal{X}}; \mathcal{X}) = \sum_{k=1}^N Y_k \mathcal{L}_k(\dot{\mathcal{X}}_k; \mathcal{X}_k) + \frac{\lambda}{\rho} \sum_{k=1}^N \dot{\alpha}_k \quad (16)$$

avec $\mathcal{L}_k = \dot{e}_k(\rho_k, \eta_k, \alpha_k) - T_k \dot{\eta}_k + \phi_k \left(\frac{T_k}{\theta_k} \dot{\alpha}_k; \alpha_k \right)$

dont la première contribution est une combinaison linéaire des fonctionnelles \mathcal{L}_k associée à chaque phase k au travers des fractions massiques Y_k . Chaque fonctionnelle \mathcal{L}_k somme une puissance réversible massique $(\dot{e}_k - T_k \dot{\eta}_k)$ reçue par le système, et un potentiel de dissipation $\phi_k \left(\frac{T_k}{\theta_k} \dot{\alpha}_k; \alpha_k \right)$, dual du précédent

introduit en section 2.2. Ce dernier est une fonction de la vitesse d'évolution de la fraction volumique de phase $\dot{\alpha}_k$, pondéré avec un ratio T_k/θ_k de façon analogue à [4], T_k étant une température externe et θ_k une température interne d'équilibre définie telle que

$$\theta_k = \frac{\partial e_k}{\partial \eta_k}. \quad (17)$$

Pour chaque phase k , le vecteur d'état $\mathcal{X}_k = \{\rho_k, \eta_k, T_k, \alpha_k\}$ est supposé *connu et fixé*. Rassemblant toutes les contributions de chaque phase, il vient

$$\mathcal{X} = \{\mathcal{X}_1, \dots, \mathcal{X}_N\}. \quad (18)$$

Au cours du processus de relaxation, ρ_k et α_k ne sont pas indépendants, puisque liés par la conservation de la masse (5)₂, de sorte qu'on puisse écrire

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial \alpha_k} = -\frac{\rho_k}{\alpha_k}. \quad (19)$$

Par ailleurs, toutes les fractions volumiques α_k , $1 \leq k \leq N$ sont contraintes à être sommées à l'unité. Sous forme de taux, cette contrainte est donnée par l'équation (15), et est imposée par un multiplicateur de Lagrange λ dans la fonctionnelle (16), lequel s'identifie en réalité à la pression d'interface P_I , voir l'équation (14). L'optimisation s'écrit

$$\mathcal{W} = \text{stat}_{(\dot{\eta}, \mathbf{T}, \lambda)} \inf_{\dot{\alpha}} \mathcal{P}, \quad (20)$$

où le vecteurs des variables s'écrit

$$\boldsymbol{\eta} = \{\eta_1, \dots, \eta_N\}; \quad \mathbf{T} = \{T_1, \dots, T_N\}; \quad \boldsymbol{\alpha} = \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\}. \quad (21)$$

Les équations d'Euler-Lagrange associées au problème d'optimisation (20), sont obtenues en prenant les premières variations de la fonctionnelle (16) par rapport aux quantités λ and $(\dot{\eta}_k, \dot{\alpha}_k, T_k)_{1 \leq k \leq N}$, et s'écrivent

$$\text{stat}_{\lambda} \mathcal{P} \Leftrightarrow \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^N \dot{\alpha}_k = 0 \quad (22)$$

$$\text{stat}_{\dot{\eta}_k} \mathcal{P} \Leftrightarrow Y_k(\theta_k - T_k) = 0 \quad (23)$$

$$\inf_{\dot{\alpha}_k} \mathcal{P} \Leftrightarrow Y_k \left(-\frac{p_k}{\alpha_k \rho_k} + \frac{T_k}{\theta_k} \frac{\partial \phi_k}{\partial \dot{\alpha}_k} \right) + \frac{\lambda}{\rho} = 0 \quad (24)$$

$$\text{stat}_{T_k} \mathcal{P} \Leftrightarrow Y_k \left(-\dot{\eta}_k + \frac{1}{T_k} \frac{T_k}{\theta_k} \frac{\partial \phi_k}{\partial \dot{\alpha}_k} \dot{\alpha}_k \right) = 0 \quad (25)$$

$$(26)$$

avec l'équation d'état donnant la pression dans la phase k

$$p_k = \rho_k^2 \frac{\partial e_k}{\partial \rho_k}. \quad (27)$$

L'équation (22) donne la contrainte imposée par le multiplicateur, (23) impose l'égalité entre les deux températures, (24) pilote l'évolution de la k ième fraction volumique α_k , et (25) donne l'évolution de la densité d'entropie.

4 Illustration numérique

On considère un mélange air/hélium, chaque phase étant gouvernée par une loi des gaz parfaits, dont l'expression de l'énergie interne spécifique s'écrit :

$$e_k(\rho_k, \eta_k) = T_0 C_v \left(\frac{\rho_k}{\rho_{k0}} \right)^{\gamma_k - 1} \exp \left(\frac{\eta_k - \eta_{k0}}{C_v} \right), \quad (28)$$

où (T_0, η_0, ρ_0) sont des valeurs initiales de température, entropie spécifique et masse volumique, et C_v est une chaleur spécifique massique.

On considère par ailleurs l'expression suivante pour le potentiel de dissipation associé à chaque phase k

$$\phi_k(\dot{\alpha}_k; \alpha_k, \rho_k) = \frac{M_k}{(M_k + 1)} \frac{\chi_k \dot{\alpha}_{k_0}}{\alpha_k \rho_k} |\dot{\alpha}_{k_*}|^{\frac{1}{M_k} + 1}, \quad (29)$$

où $\dot{\alpha}_{k_*} = \dot{\alpha}_k / \dot{\alpha}_{k_0}$ est un taux d'évolution adimensionnalisé de fraction volumique, et $\dot{\alpha}_{k_0}$ est une vitesse d'évolution de référence de la fraction volumique de l'espèce k . L'expression (29) de ϕ_k donne une force thermodynamique ξ_k qui est une fonction impaire de $\dot{\alpha}_k$. Les paramètres $(\chi_k, M_k, \dot{\alpha}_{k_0})$ sont liés à chacune des phases, dont en réalité seulement deux sont indépendants. Pour des raisons de simplicité, mais sans perte de généralité, on considère ici les exposants M_k et les paramètres $\dot{\alpha}_{k_0}$ égaux à l'unité, et les coefficients χ_k sont homogènes à des pressions, dont les valeurs sont regroupées dans la table 1.

Gaz	γ_k	$C_v (J.kg^{-1}.K^{-1})$	$\dot{\alpha}_{k_0} (s^{-1})$	$\chi_k (Pa)$	M_k
Air	1.4	10^3	1	0.1	1
Hélium	1.666667	5195	1	1	1

TABLE 1 – Paramètres constitutifs.

Gaz	Pression (Pa)	Fraction volumique	Masse volumique ($kg.m^{-3}$)
Air	10^5	0.3	1
Hélium	10^6	0.7	0.1785

TABLE 2 – États initiaux des variables pour chaque phase.

On considère l'état initial des phases résumé dans la table 2. La figure 1 montre l'évolution des différentes variables au cours du processus de relaxation entre les phases d'air et d'hélium, à partir des états initiaux et des paramètres constitutifs donnés dans les tables ci-dessus. En particulier, on observe une relaxation des pressions qui tendent vers une pression d'équilibre. L'évolution de la pression de mélange donnée par l'équation (2) est bien différente de celle de la pression d'interface $P_I \equiv \lambda$, laquelle tient compte des écarts à l'équilibre de chacune des phases au cours de la relaxation.

La figure 1 montre aussi les évolutions des fractions volumiques, températures, entropies spécifiques, énergie interne spécifiques et masses volumiques de chaque phase. On observe au cours de cette relaxation des aspects nécessaires de la consistance requise pour l'intégration numérique temporelle, à savoir une masse volumique du mélange constante, la contrainte de sommation nulle des taux de fractions volumiques (voir l'équation (15)) vérifiée à la précision machine, et une énergie interne spécifique de mélange -calculée avec l'équation (2)- conservée au cours du temps, à une erreur consistante près.

5 Conclusion

On a proposé dans ce travail une modélisation mathématique thermodynamiquement cohérente du processus de relaxation à vitesse finie des états mécaniques de plusieurs phases cohabitant à une échelle locale, sur la base d'une loi des mélanges et d'effets hors équilibres décrits par des potentiels de dissipation. Pour montrer la généricité de l'approche tout en gardant une certaine simplicité dans la présentation, un milieu multiphasique uniquement constitué de phases fluides a été considéré. La modélisation proposée peut se réécrire comme un principe variationnel sous contrainte de type égalité pour assurer que les fractions volumiques des espèces sont sommées à l'unité. Ce principe variationnel fait apparaître une pression d'interface, identifiée comme le multiplicateur de Lagrange permettant d'imposer la contrainte de type égalité. Il est montré que l'évolution de cette pression d'interface qui tient compte des descripteurs d'écart à l'équilibre de chaque phase, est bien différente d'une pression basiquement calculée avec une simple loi des mélanges. L'approche suivie dans ce travail a vocation à être étendue à des phases solides incluant les différents effets dissipatifs afférents, l'objectif à terme étant de pouvoir conduire des simulations numériques d'écoulements compressibles multiphasiques comprenant des phases solide et/ou fluide.

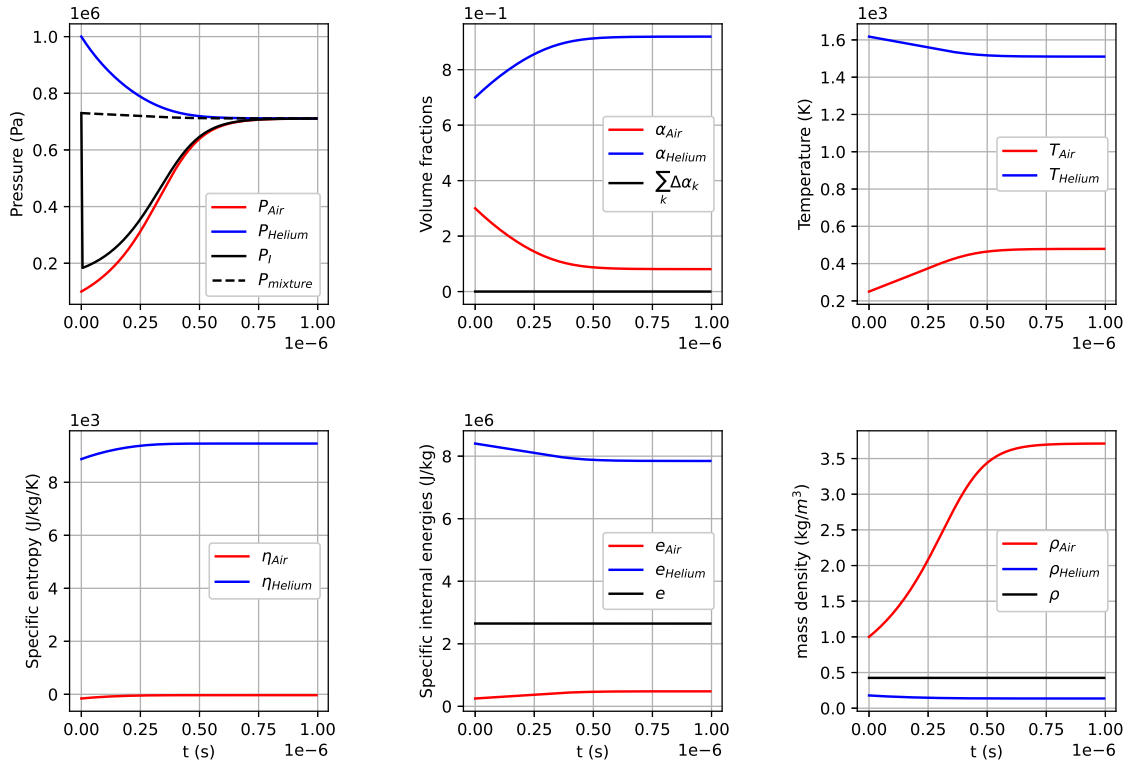


FIGURE 1 – Évolution des différentes variables au cours du processus de relaxation entre les phases d’air et d’hélium, à partir des états initiaux donnés dans la table 2, et des paramètres constitutifs résumés dans la table 1.

Références

- [1] N. Favrie, K. Schmidmayer, J. Massoni. *A multiphase irreversible-compaction model for granular-porous materials*. Continuum Mechanics and Thermodynamics, 34(1), 217-241, 2022.
- [2] K. Schmidmayer, J. Cazé, F. Petitpas, E. Daniel, N. Favrie. *Modelling interactions between waves and diffused interfaces*. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 95(2), 215- 241, 2023.
- [3] B. Halphen, Q.S. NGuyen. *Sur les matériaux standards généralisés*. Journal de mécanique, 14, 39- 63, 1975.
- [4] Q. Yang, L. Stainier, M. Ortiz. *A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids 54, 401-424, 2006.