

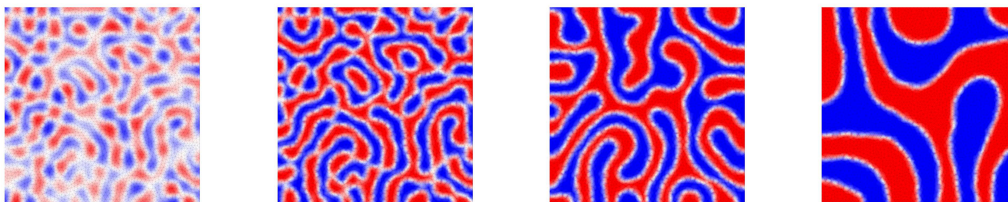
PROPOSITION DE STAGE

Modélisation Mathématique et Simulation

Numérique d'Interfaces Diffuses

1. Motivation

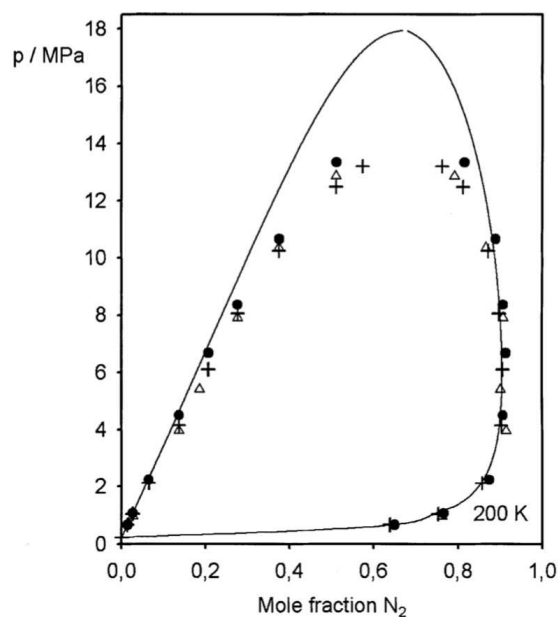
Les modèles d'interfaces diffuses permettent de représenter *continûment* les zones de transition entre diverses phases d'un fluide. Ces phases apparaissent en présence d'instabilités thermodynamiques lorsque l'entropie perd sa concavité. On peut ainsi décrire des interfaces liquide-vapeur ou entre deux espèces chimiques non miscibles dans un mélange avec des densités qui sont des fonctions régulières. Ces densités ont approximativement une structure en tangente hyperbolique à travers l'interface.



Ces modèles sont particulièrement intéressants pour la simulation d'interfaces dont la géométrie est complexe comme dans la figure ci-dessus ou pour étudier les transitions entre des régimes souscritique et supercritique, c'est-à-dire lorsqu'on passe d'un régime diphasique à un régime monophasique. Les écoulements réactifs multiphasiques interviennent enfin dans de nombreux domaines scientifiques et industriels comme le spatial, l'aéronautique, l'énergie, l'automobile ou l'environnement.

2. Thermodynamique non idéale

Afin de décrire les instabilités des mélanges fluides, il est tout d'abord nécessaire d'utiliser une thermodynamique non idéale. Ces thermodynamiques sont obtenues à partir de lois d'état cubiques grâce à leur structure Gibbsienne et en utilisant pour condition à la limite aux basses densités la thermodynamique des mélanges idéaux [1]. On peut ensuite cartographier les domaines d'instabilité mécanique liquide-vapeur et d'instabilités chimiques des mélanges en étudiant les changements de signe des valeurs propres de la matrice Hessienne de l'entropie. On peut également définir précisément les points critiques au delà desquels la pression est suffisamment haute pour qu'il n'y ait plus qu'une seule phase. Dans le cadre de ce stage, on s'intéressera aux mélanges binaires entre de l'azote N_2 et de l'éthane C_2H_6 .



Il faudra cartographier les diverses zones d'instabilités où l'entropie perd sa concavité. Ces instabilités peuvent être de type mécanique ou chimique selon la structure du Hessian et on utilisera des méthodes de continuation [1]. On comparera les résultats des simulations à divers résultats expérimentaux concernant ces mélanges d'azote N_2 et d'éthane C_2H_6 comme dans la figure ci-dessus. Dans cette figure, pour différentes pressions, après séparation du fluide en deux phases, on présente la fraction molaire d'azote mesurée dans chaque phase.

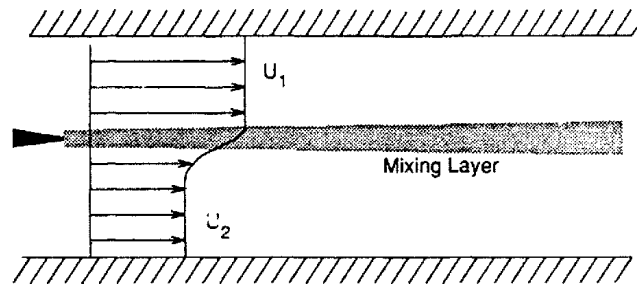
3. Modélisation mathématique

Les équations qui régissent les fluides avec interfaces diffuses seront obtenues à partir de celles régissant les mélanges gazeux. En partant de la thermodynamique non idéale mise au point précédemment, il faut alors ajouter à l'énergie libre classique du fluide des termes quadratiques en les gradients. Ces termes supplémentaires dans l'énergie libre représentent physiquement une énergie additionnelle associée aux zones à forts gradients.

Après avoir écrit une équation de bilan pour l'entropie, on obtiendra la structure des flux de masse, quantité de mouvement et d'énergie. On dérivera ainsi les équations complètes des fluides avec interfaces diffuses avec une attention particulière pour les modèles du type Cahn-Hilliard et Van der Waals/Korteweg. On s'intéressera à la structure mathématique des systèmes d'équations aux dérivées partielles obtenus.

4. Simulation numérique

On s'intéressera à la simulation numérique de couches de mélanges binaires au voisinage d'instabilités thermodynamiques, c'est-à-dire entre des fluides peu miscibles [2].



Les couches de mélange ont une structure comme dans la figure ci-dessus. Il faudra tout d'abord mettre en place des schémas numériques pour les interfaces diffuses et les couches de mélange auto-similaires [2,3]. On considèrera dans un premier temps des solutions simplifiées auto-similaires et on résoudra numériquement les équations des couches de mélanges en utilisant les moyens informatiques du Centre de Mathématiques Appliquées. Les applications numériques pour les couches de mélange concerneront les mélanges d'azote N_2 et d'éthane C_2H_6 .

L'orientation de la suite du stage dépendra bien sûr très fortement des conclusions issues de la recherche bibliographique initiale et également du goût du candidat.e pour telle ou telle partie du sujet.

Nombre d'étudiant.e souhaité.e : 1

Encadrement : Vincent Giovangigli et Flore Nabet (CMAP)

vincent.giovangigli@polytechnique.edu, flore.nabet@polytechnique.edu

Lieu du stage : École Polytechnique CMAP

Perspectives : Thèse financée par une bourse ANR

- [1] V. Giovangigli and L. Matuszewski, Mathematical Modeling of Supercritical Multicomponent Reactive Fluids, *Math. Mod. Meth. App. Sci.*, **23**, (2013), pp. 2193–2251.
- [2] P. Gaillard, V. Giovangigli and L. Matuszewski, Nonmixing Layers, *Physical Review Fluids*, **1**, (2016), 084001.
- [3] F. Nabet, Convergence of a finite-volume method for the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions, *IMA J. Num. Anal.*, **36**, (2018), pp. 1898–1942.