Université de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :
Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Energétique et transferts

Présentée et soutenue par :
Clément INTROÏNI

le : vendredi 19 novembre 2010

Titre :

Interaction entre un fluide à haute température et un béton : contribution à la modélisation des échanges de masse et de chaleur

---

JURY
F. DUVAL, Ingénieur, IRSN Cadarache, Encadrant
C. GALUSINSKI, Professeur des Universités, Université du Sud Toulon Var, Rapporteur
D. GOBIN, Directeur de Recherche CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Président
B. GOYEAU, Professeur des Universités, Ecole Centrale Paris, Rapporteur
M. QUINTARD, Directeur de Recherche CNRS, IMFT-INP Toulouse, Directeur de thèse

---

Ecole doctorale :
Mécanique, Energétique, Génie civil et Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :
IMFT / IRSN

Directeur(s) de Thèse :

Michel QUINTARD

Rapporteurs :
Cédric GALUSINSKI
Benoît GOYEAU

à la mémoire de Daniel,
à Amandine et mes parents,
à Milouz ...

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé à l'Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire. A ce titre, je remercie Messieurs Richard Gonzalez et Jean-Michel Bonnet, chefs successifs du Service Etude et Modélisation de l'Incendie, du Corium et du confinement, pour m'avoir accueilli au sein de leur service et Madame Laurence Rigollet, chef du Laboratoire d'étude de l'Incendie et de développement de Méthodes pour la Simulation et les Incertitudes au sein duquel cette étude a été menée dans d'agréables conditions.

Je suis reconnaissant à Monsieur Michel Quintard, directeur de recherche CNRS à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, pour avoir accepté la direction scientifique de ce travail de thèse et pour la confiance qu'il m'a accordé au cours de notre collaboration. Ses conseils avisés et son expérience ont largement contribué à l'aboutissement de ce travail. Je le remercie également pour sa disponibilité et ses encouragements constants ont été d'un grand soutien, notamment lors de mon périple en Chine. Par ailleurs, chacune de nos visites Toulousaines a été l'occasion d'un agréable repas au bord de la Garonne au cours duquel j'ai pu apprécier davantage ses grandes qualités humaines et quelques bons vins du sud ouest.

Je remercie très chaleureusement Monsieur Fabien Duval, ingénieur à l'IRSN, pour avoir accepté l'encadrement de cette thèse et pour la confiance qu'il m'a accordé dès le début de mon stage de fin d'études. Durant toutes ces années, il a assuré un encadrement de très grande qualité avec enthousiasme, rigueur et une pédagogie exemplaire. Chacune de nos discussions et chacun de ses conseils avisés m'ont permis de progresser continuellement dans mon travail ("comme pour le calcul intégral de $1/\sqrt{2\pi t}\ldots$"). Sa générosité et son implication ont non seulement été une source permanente de motivation mais ont aussi fortement contribué à l'aboutissement de ce projet de thèse. Par ailleurs, j'ai pu apprécier sa patience, sa constante disponibilité, ses encouragements quotidiens ainsi que l'amitié qu'il m'a témoigné durant toutes ces années. Pour le temps qu'il m'a consacré et tout ce qu'il m'a apporté durant toutes ces années, je lui en suis très reconnaissant.

Je remercie vivement Monsieur Dominique Gobin, directeur de recherche CNRS à l'Université Pierre et Marie Curie, pour avoir assuré la présidence du jury de cette thèse. Je remercie vivement Monsieur Cédric Galusinski, professeur des universités à l'Université Sud Toulon Var, et Monsieur Benoît Goyeau, professeur des universités à l'Ecole Centrale Paris, pour avoir accepté d'être rapporteurs de ce travail de thèse auquel ils ont apporté une attention et une rigueur particulière.

Mes remerciements vont également à Monsieur Jean-Claude Latché, ingénieur à l'IRSN, pour le suivi et le vive intérêt qu'il a montré à ce travail de thèse. Les conseils et l'aide précieuse qu'il m'a apporté sur différents aspects de ce travail ont fortement contribué à l'avancement de cette thèse. Je le remercie également pour sa constante disponibilité ainsi que pour nos diverses discussions qui m'ont permis d'apprécier ses grandes qualités humaines.

Je remercie également Monsieur Marc Barrachin, ingénieur à l'IRSN, pour ses conseils et son aide, notamment en thermodynamique sur la structure des énergies libres. Malgré une attirance prononcée pour un certain club de football de la capitale, j'ai particulièrement apprécié la sympathie, l'enthousiasme et les bonnes blagues de cet expert en thermodynamique des milieux condensés entre 2000K et 3000K.

Je tiens à remercier mes deux collègues de bureau successifs, Messieurs Bruno Piar et Fabrice Babik, ingénieurs à l'IRSN, pour leur sympathie, leur soutien et leurs encouragements. Durant toutes ces années, j'ai pu apprécier l'amitié qu'ils m'ont témoigné ainsi que nos diverses discussions autour d'une tasse de thé ou de café. Je remercie plus particulièrement Bruno pour m'avoir fait profiter de son expérience à chacune de mes sollicitations et pour l'aide précieuse qu'il m'a apporté pour les développements menés à partir de la plate-forme PELICANS. Je le remercie également pour m'avoir laissé *squatter* plusieurs de ses livres durant toutes ces années.

Je souhaite remercier Monsieur Didier Vola, chef du Laboratoire d'Etude du corium et du Transfert des Radioéléments, pour m'avoir fait profiter de ses connaissances sur les méthodes de stabilisation numérique et pour l'aide qu'il m'a apporté dans certaines de mes démarches *post-doctorat*.

Je voudrais remercier l'ensemble du personnel du SEMIC pour leur accueil et leur gentillesse. Merci à Michel Cranga pour le vive intérêt qu'il a porté à ce travail. Merci à Marie-Claire, Caroline et Laetitia pour l'aide qu'elles m'ont apporté dans chacune de mes démarches administratives et plus particulièrement dans la préparation de mon voyage en Chine. Je remercie Jean-Paul, Jean-Claude, Christophe, Marc, Bruno, Fabien, Philippe, Roland, Jean, Samuel, Laura et Céline pour nos grandes discussions footballistiques dans lesquelles j'ai essayé tant bien que mal de rester objectif.... Je remercie l'ensemble des doctorants que j'ai pu côtoyer, Aurélien, Guillaume, Romain, Walid, Trung, Fanny et Raphaël pour leur sympathie. Merci à Sebastian pour ses encouragements et l'amitié qu'il m'a témoigné durant nos trois années de thèse. Un grand merci à Céline pour sa bonne humeur, son amitié et son soutien. Je n'oublie pas ses longues pauses à discuter à la machine à café (que je remercie par la même occasion !) au cours desquelles j'ai pu apprécier ses grandes qualités humaines. Merci à Haisan pour son amitié et pour m'avoir servi de guide sur Guangzhou.

Je tiens à remercier ma famille pour leur amour et leur soutien permanent. Je remercie enfin Amandine pour m'avoir soutenu et encouragé durant toutes ces années avec amour et beaucoup de patience. Pour tout ce qu'elle m'apporte au quotidien, je lui en suis très reconnaissant et lui dédicace ce travail.

Table des matières

Chapitre I Introduction générale 1

I.1 Problématique du corium hors-cuve . . . 2
I.2 Phénoménologie . . . 3
I.3 Description des échanges à l'interface du corium et du béton . . . 5
I.3.1 Modèles d'échange associés au dégazage . . . 7
I.3.2 Modèles d'échange associés à la convection compositionnelle . . . 9
I.3.3 Modèles d'échange globaux . . . 12
I.3.4 Discussion . . . 15
I.4 Stratégie de modélisation et description de l'étude . . . 16
I.4.1 Vers une description multi-échelle . . . 16
I.4.2 Simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation . . . 19
I.5 Objectifs de l'étude . . . 21

Chapitre II Construction de conditions aux limites effectives sur parois rugueuses 23

II.1 Introduction . . . 23
II.2 Effective surface modeling for momentum and heat transfers over rough surfaces . 24
II.2.1 Introduction . . . 27
II.2.2 Domain decomposition method . . . 30
II.3 Effective boundary conditions . . . 31
II.3.1 Momentum effective boundary condition . . . 32
II.3.2 Heat effective boundary conditions . . . 39
II.3.3 Application to a natural convection problem in a stamp shaped cavity . . . 43
II.3.4 Determination of the effective properties . . . 44
II.3.5 Effective calculations . . . 48
II.3.6 Conclusion . . . 56
II.3.A Derivation of the closure problems for the momentum transfer problem . . 57
II.3.B Derivation of the closure problems for the heat transfer problem . . . 58
II.4 Conclusion . . . 59

Chapitre III Simulation numérique directe d'écoulements diphasiques compositionnels 69

III.1 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique . . . 70
III.2 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel . . . 74
III.2.1 Description du système et hypothèses . . . 74
III.2.2 Fermeture thermodynamique . . . 76
III.2.3 Etablissement des équations de bilan . . . 79
III.2.4 Propriétés de consistance et fermetures des mobilités . . . 85
III.2.5 Formes alternatives du modèle . . . 88

III.3 Schéma numérique et résolution du problème discret . . . 90
III.3.1 Semi-discrétisation en temps . . . 91
III.3.2 Discrétisation en espace . . . 99
III.4 Stabilisation par viscosité entropique . . . 106
III.4.1 Principe de la méthode . . . 107
III.4.2 Application au modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel . . . 108
III.5 Traitement numérique des conditions aux limites de sortie . . . 111
III.5.1 Equations de Cahn-Hilliard . . . 111
III.5.2 Equations de Navier-Stokes . . . 113
III.6 Expériences numériques . . . 115
III.6.1 Test de Laplace compositionnel . . . 118
III.6.2 Montée d'une bulle dans un milieu semi-infini . . . 120
III.6.3 Injection de bulles dans un milieu semi-infini . . . 123
III.6.4 Injection de bulles dans un système bi-constituant . . . 125
III.7 Conclusions . . . 136

Chapitre IV Simulations directes à l'échelle du front d'ablation 139
IV.1 Cas purement compositionnels . . . 140
IV.1.1 Description de l'ablation par une méthode ALE . . . 142
IV.1.2 Lois de viscosité arithmétique et harmonique . . . 144
IV.1.3 Modèle de viscosité d'Urbain . . . 155
IV.2 Cas diphasiques compositionnels . . . 190
IV.2.1 Description de l'ablation dans le repère lié au front . . . 191
IV.2.2 Impact de la température d'ablation . . . 195
IV.2.3 Impact de la distribution des sites de relâchement de gaz . . . 207
IV.3 Conclusion et discussion des configurations étudiées . . . 220

Chapitre V Conclusion générale et perspectives 223

Annexe A Limite "sharp" du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel 231
A.1 Adimensionnement des équations . . . 231
A.2 Analyse asymptotique du modèle . . . 233
A.2.1 Développements extérieurs . . . 234
A.2.2 Développements intérieurs . . . 236
A.2.3 Conditions de saut à l'interface . . . 244

Annexe B Système de coordonnées généralisé 249
B.1 Définition d'un système de coordonnées lié à l'interface . . . 249
B.2 Développement des opérateurs de dérivées spatiale et temporelle . . . 250
B.2.1 Gradient d'un scalaire . . . 250
B.2.2 Gradient d'un vecteur . . . 250
B.2.3 Divergence d'un vecteur . . . 251
B.2.4 Divergence du gradient d'un champ scalaire . . . 251
B.2.5 Divergence d'un tenseur d'ordre deux . . . 251
B.2.6 Dérivée temporelle . . . 252

Annexe C Raccord asymptotique 253

Table des figures

I.1 Schéma simplifié d'un scénario d'accident grave : cas de l'interaction corium-béton. . . . 2
I.2 Configurations envisagées pour le bain de corium lors de l'interaction corium-béton. . . . 3
I.3 Diagramme de phases pseudo-binaires pour les mélanges UO_2-ZrO_2-béton. 6
I.4 Schéma de l'interface lors de l'ablation d'un substrat solide par un liquide. 10
I.5 Représentation de l'interface corium-béton proposée par Bradley [27] 12
I.6 Représentation de l'interface corium-béton proposée par Kao et Kazimi [95]. 13
I.7 Représentation de l'interface corium-béton proposée par Epstein [53]. 15
I.8 Une description multi-échelle des échanges pour l'interaction corium-béton. 17

II.1 Schematic representation of an incompressible laminar over a rough surface Γ_w. 29
II.2 Schematic domain decomposition principle 30
II.3 Schematic decomposition of the rough surface in two closed curves. 39
II.4 Schematic representation of the computational domain $\Omega = [0, L] \times [0, L]$ 43
II.5 Thinnest mesh used in the rough case. 44
II.6 Pseudo-periodic representative unit cell Ω_i 45
II.7 Plot of the ratio $C_f(\delta_0)/C_f(y)$ and the ratio $h(\delta_0)/h(y)$ for $\mathrm{Re}_\ell \leq 10^3$ and $\mathrm{Pr} = 1$. . . . 46
II.8 Plot of the quantity $[B_{11}(\delta_0) + \delta_0]/L_1$ and $[d(\delta_0) + \delta_0]/L_2$ in the pure diffusive case. . . . 47
II.9 Evolution of the ratio $h(0)$ in the pure diffusive case over $h(\mathrm{Re}_\ell)$ 48
II.10 Contour lines of the closure variable d for $\mathrm{Pr} = 1$. 48
II.11 Contour lines of T and $\mathbf{u}$ in the rough and effective no-slip cases ($\mathrm{Ra}_L = 10^6$). 50
II.12 Profiles of T and v on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ 51
II.13 Profiles of T and v on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ 52
II.14 Profiles of T and v on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ 53
II.15 Effective computational domain Ω_δ 54
II.16 Profiles of T on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = \{10^3, 10^4\}$ 61
II.17 Profiles of T on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = \{10^5, 10^6\}$ 62
II.18 Profiles of T on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = \{10^7, 10^8\}$ 63
II.19 Profiles of v on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = \{10^3, 10^4\}$ 64
II.20 Profiles of v on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = \{10^5, 10^6\}$ 65
II.21 Profiles of v on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = \{10^7, 10^8\}$ 66
II.22 Relative error between the averaged Nusselt numbers $< \mathrm{Nu}_r >$ and $< \mathrm{Nu}_{eff} >$. 67

III.1 Evolution du paramètre d'ordre φ pour un système diphasique. 71
III.2 Formes logarithmique et polynomiale du potentiel de Cahn-Hilliard. 74
III.3 Formes logarithmique et logarithmique-polynomiale du potentiel de Cahn-Hilliard. . . . 78
III.4 Schémas numériques : deux *vs.* trois équations (problème diphasique $\varphi_3 = 0$). 92
III.5 Schémas numériques : deux *vs.* trois équations (problème diphasique $\varphi_2 = 0$). 93
III.6 Discrétisations imp., lin. implicite et semi-implicite de $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ ($\Delta t = 10^{-4}$) 95
III.7 Discrétisations imp., lin. implicite et semi-implicite de $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ ($\Delta t = 2 \times 10^{-5}$) . . 96

III.8 Discrétisations imp., lin. implicite et semi-implicite de $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ ($\Delta t = 4 \times 10^{-6}$) . . 96
III.9 Instabilité de Rayleigh-Taylor avec At = 0.5 et Re = 10^3 : interface liquide-liquide 109
III.10 Instabilité de Rayleigh-Taylor avec At = 0.5 et Re = 10^3 : viscosité entropique 110
III.11 Domaine de calcul : traitement numérique des conditions aux limites de sortie 113
III.12 Comportement d'une bulle de gaz en sortie du domaine (vitesse imposée) 114
III.13 Composante verticale de la vitesse en sortie du domaine 115
III.14 Comportement d'une bulle de gaz en sortie du domaine 116
III.15 Pression $\tilde{\tilde{p}}$, pression dynamique p_{dyn} et pression capillaire p_{cap} 117
III.16 Domaines de calcul utilisés pour le test de Laplace compositionnel. 119
III.17 Modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel *vs.* modèle de Fick/Navier-Stokes. . 121
III.18 Profils du paramètre d'ordre φ_2 et de la concentration c en $y = 0$ à $t = \{0\,\mathrm{s}, 0.5\,\mathrm{s}, 1\,\mathrm{s}\}$. . . 122
III.19 Comparaison entre la loi de Laplace et le saut de pression calculé. 122
III.20 Décroissance de l'énergie cinétique au cours du temps. 123
III.21 Domaine de calcul : montée d'une bulle de gaz dans un milieu liquide semi-infini. 124
III.22 Instantanés de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ et évolution du nombre de Reynolds 125
III.23 Mobilité uniforme *vs.* mobilité fonction du Péclet d'interface. 126
III.24 Visualisation de la mobilité : uniforme et fonction du nombre de Péclet d'interface. . . . 126
III.25 Domaine de calcul : problème diphasique d'injection de gaz à travers un orifice. 127
III.26 Evolution de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ pour les angles de contact $\alpha = 70^\circ$ et $\alpha = 110^\circ$. 128
III.27 Domaine de calcul : injection de gaz dans un système bi-constituant. 129
III.28 Calcul de référence. 131
III.29 Calcul sans contraste de viscosité dans le liquide 132
III.30 Calcul sans contraste de densité dans le liquide 133
III.31 Calcul effectué avec un diffusion massique $D = 2 \times 10^{-5}\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$ 134
III.32 Calcul effectué avec les propriétés de référence et deux sites d'injection de gaz 135

IV.1 Représentation schématique de la structure de la couche limite 140
IV.2 Domaine de calcul utilisé pour l'étude des effets purement compositionnels. 142
IV.3 Comparaison entre les lois arithmétique, harmonique et d'Urbain. 145
IV.4 Evolution de la densité pour $t \in [0\mathrm{s}, 55\mathrm{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$; loi arithmétique. 147
IV.5 Evolution de la densité pour $t \in [0\mathrm{s}, 55\mathrm{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$; loi harmonique. 148
IV.6 Evolution de la densité pour $t \in [0\mathrm{s}, 55\mathrm{s}]$: cas $\mathcal{R} = 10^3$; loi arithmétique. 150
IV.7 Evolution de la densité pour $t \in [0\mathrm{s}, 55\mathrm{s}]$: cas $\mathcal{R} = 10^3$; loi harmonique. 151
IV.8 Evolution de la densité pour $t \in [0\mathrm{s}, 55\mathrm{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$; loi arithmétique. 153
IV.9 Evolution de la densité pour $t \in [0\mathrm{s}, 55\mathrm{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$; loi harmonique. 154
IV.10 Fraction de solide Φ_{sol} en fonction de la température et de l'enrichissement en béton . . 156
IV.11 Viscosité du mélange en fonction de la température et de l'enrichissement en béton . . . 157
IV.12 Schématisation du front d'ablation avec la prise en compte d'une zone pâteuse. 158
IV.13 Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\mathrm{s}]$: cas $T_f = 1600\mathrm{K}$, béton silico-calcaire. 162
IV.14 Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\mathrm{s}]$: cas $T_f = 1600\mathrm{K}$, béton siliceux. 163
IV.15 Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 1600\mathrm{K}$. Amplitude des rugosités. . . 164
IV.16 Champ de vitesse à l'instant $t = 150\mathrm{s}$ 165
IV.17 Evolution de la fraction de solide Φ_{sol} pour une température d'ablation $T_f = 1600\mathrm{K}$ . . . 166
IV.18 Evolution de la température T pour une température d'ablation $T_f = 1600\mathrm{K}$ 167
IV.19 Profil de température (en K) suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150\mathrm{s}$ 168
IV.20 Vitesse moyenne d'ablation (en $\mathrm{mm.s}^{-1}$) : $T_f = 1600\mathrm{K}$ 169
IV.21 Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\mathrm{s}]$: cas $T_f = 1700\mathrm{K}$, béton silico-calcaire. 172
IV.22 Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\mathrm{s}]$: cas $T_f = 1700\mathrm{K}$, béton siliceux. 173
IV.23 Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 1700\mathrm{K}$. Amplitude des rugosités. . . 174
IV.24 Champ de vitesse à l'instant $t = 150\mathrm{s}$ 175

IV.25 Evolution de la fraction de solide Φ_{sol} pour une température d'ablation $T_f = 1700$K . . . 176
IV.26 Evolution de la température T pour une température d'ablation $T_f = 1700$K 177
IV.27 Profil de température (en K) suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150$s 178
IV.28 Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) : $T_f = 1700$K 179
IV.29 Evolution de la densité pour $t \in [0, 70\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton silico-calcaire. 182
IV.30 Evolution de la densité pour $t \in [0, 26\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton siliceux. 183
IV.31 Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 2000$K. Amplitude des rugosités. . . 184
IV.32 Champ de vitesse aux instants $t = 70$s (béton silico-calcaire) et $t = 26$s (béton siliceux) . 185
IV.33 Evolution de la fraction de solide Φ_{sol} pour une température d'ablation $T_f = 2000$K . . . 186
IV.34 Evolution de la température T pour une température d'ablation $T_f = 2000$K 187
IV.35 Profil de température (en K) suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ 188
IV.36 Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) : $T_f = 2000$K. 189
IV.37 Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) : $T_f = 1700$K 192
IV.38 Comparaison des approches proposées pour décrire l'ablation du radier (silico-calcaire) . 193
IV.39 Comparaison des approches proposées pour décrire l'ablation du radier (siliceux) 194
IV.40 Domaine de calcul Ω utilisé pour l'étude des effets diphasiques compositionnels. 195
IV.41 Diffusion du mélange en fonction de la température et de l'enrichissement en béton . . . 197
IV.42 Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton silico-calcaire. 201
IV.43 Evolution de la densité pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton siliceux. 202
IV.44 Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton silico-calcaire.. 203
IV.45 Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton siliceux. 204
IV.46 Champ de vitesse dans le cas des bétons silico-calcaire et siliceux 205
IV.47 Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) 206
IV.48 Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton silico-calcaire. 208
IV.49 Evolution de la densité pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton siliceux. 209
IV.50 Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton silico-calcaire.. 210
IV.51 Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton siliceux. 211
IV.52 Champ de vitesse dans le cas des bétons silico-calcaire et siliceux 212
IV.53 Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) 213
IV.54 Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: béton silico-calcaire, $d \sim 70$mm. 214
IV.55 Evolution de la densité pour $t \in [0, 4\text{s}]$: béton siliceux, $d \sim 70$mm. 215
IV.56 Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: béton silico-calcaire, $d \sim 70$mm.. 216
IV.57 Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: béton siliceux, $d \sim 70$mm. 217
IV.58 Champ de vitesse dans le cas des bétons silico-calcaire et siliceux 218
IV.59 Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) 219
IV.60 Configurations horizontale et verticale de la structure de la couche limite 221

A.1 Décomposition de domaine au voisinage de l'interface 233

Liste des tableaux

II.1 Summary of physical parameters used for all numerical experiments 43
II.2 Average Nusselt number : smooth case *vs.* rough case for $10^3 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^8$. 49
II.3 Position of the effective surface Γ_δ. 55
II.4 Degree of freedoms (DOFs) involved in the numerical experiments. 55
II.5 Average Nusselt number : rough case *vs.* effective cases for $10^3 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^8$. 56
II.6 Relative percentage error observed between $< \mathrm{Nu}_r >$ and $< \mathrm{Nu}_{eff} >$ 56

III.1 Discrétisations possibles du terme non-linéaire $W_i'\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n\right)$ 94
III.2 Propriétés physiques : problème d'instabilités de Rayleigh-Taylor. 108
III.3 Paramètres numériques : problème d'instabilités de Rayleigh-Taylor 111
III.4 Propriétés physiques : traitement numérique des conditions aux limites de sorties 112
III.5 Paramètres numériques : traitement numérique des conditions aux limites de sorties. . . 113
III.6 Propriétés physiques : test de Laplace compositionnel 118
III.7 Paramètres numériques : test de Laplace compositionnel. 119
III.8 Propriétés physiques : montée de bulle dans un milieu semi-infini. 120
III.9 Paramètres numériques : montée de bulle dans un milieu semi-infini 123
III.10 Propriétés physique du système air-eau à 20°C. 124
III.11 Paramètres numériques : injection de bulles dans un milieu semi-infini. 125
III.12 Volume de gaz après le détachement de la bulle. 125
III.13 Propriétés physiques du calcul de référence diphasique compositionnel 129
III.14 Paramètres numériques utilisés pour les calculs diphasiques compositionnels 130

IV.1 Paramètres numériques utilisés pour l'ensemble des calculs de la section (IV.1) 144
IV.2 Propriétés thermo-physiques du mélange 145
IV.3 Composition des matériaux. 155
IV.4 Propriétés thermo-physiques des matériaux. 155
IV.5 Propriétés thermo-physiques du gaz. 195
IV.6 Tensions de surface des principaux constituants 196
IV.7 Paramètres numériques utilisés pour l'ensemble des calculs de la section (IV.1) 198

Chapitre I

Introduction générale

Devant la puissance croissante des calculateurs, les méthodes de simulation numérique directe se sont considérablement développées au cours de ces dernières années. Si elles restent encore généralement limitées à une classe réduite d'écoulements caractérisés, par exemple, par des nombres de Reynolds modérés pour les problèmes turbulents ou un nombre limité d'interfaces pour les problèmes multiphasiques, elles permettent d'obtenir des informations difficilement accessibles par l'expérience. Elles permettent d'avoir accès à la structure locale de l'écoulement et contribuent ainsi à une meilleure compréhension des phénomènes à la petite échelle. Les outils de simulation numérique directe sont ainsi de plus en plus utilisés pour venir renseigner les outils de simulation aux échelles de description supérieures mis en oeuvre pour les applications industrielles, par exemple les modèles RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) pour les problèmes turbulents ou les modèles bi-fluides pour les problèmes diphasiques.

Les difficultés associées aux modèles moyennés sont bien connues et concernent non seulement la fermeture des différents termes macroscopiques, comme les corrélations vitesse-température pour les problèmes turbulents ou les contributions de la force de traînée macroscopique pour les problèmes diphasiques, mais également le problème de la construction de conditions aux limites macroscopiques ou lois de parois. La première problématique a fait l'objet de nombreux travaux dans le contexte des écoulements turbulents selon une approche par simulation directe et une approche similaire commence également à être suivie pour les écoulements diphasiques. La deuxième problématique associée à la construction de lois de parois a essentiellement été abordée pour des problèmes d'écoulements turbulents sur parois lisses ou rugueuses et connait un regain d'intérêt d'un point de vue théorique pour des problèmes d'écoulements laminaires sur des surfaces hétérogènes (rugosités, matériaux composites, ...).

Ce travail de thèse s'inscrit dans cette problématique générale de description et de modélisation multi-échelle et se propose de contribuer à la description des échanges de masse et de chaleur entre un fluide à haute température et un béton.

Dans la première partie de ce chapitre (*cf.* (I.1)), nous précisons le contexte nucléaire de ce travail de thèse qui concerne les études de sûreté menées sur les accidents graves de réacteur à eau sous pression et, plus particulièrement, la problématique de l'interaction corium-béton. Après avoir décrit les principaux phénomènes potentiellement mis en jeu à l'interface du corium et du béton (*cf.* (I.2)), nous présentons dans une troisième partie (*cf.* (I.3)) une revue bibliographique des principaux modèles d'échanges proposés pour les codes d'évaluation réacteur. Cette présentation nous permet d'évoquer les différentes questions posées par ces modèles ainsi que les limites et les difficultés actuelles qui justifient la démarche entreprise dans ce travail de thèse. Nous présentons ensuite (*cf.* (I.4)) le contexte général dans lequel s'inscrit ce travail qui correspond à une description et une modélisation multi-échelle des échanges, c'est-à-dire de l'échelle locale jusqu'à l'échelle du code d'évaluation réacteur. Cela nous permet de préciser les deux contributions spécifiques de ce

travail qui concernent, d'une part, la construction de conditions aux limites effectives ou lois de paroi et, d'autre part, la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation entre le corium et le béton. A cet effet, nous présentons les caractéristiques des écoulements étudiés dans ce travail ainsi que le choix d'une méthode. Enfin, nous terminons ce chapitre par les objectifs de notre étude (*cf.* (I.5)).

I.1 Problématique du corium hors-cuve

Ce travail s'inscrit dans le cadre des études et des analyses de sûreté menées sur les accidents graves de réacteurs à eau sous pression (REP) actuels ou ceux de nouvelle génération de type EPR (European Pressurized Reactor). Un des scénarios possibles est la perte de réfrigérant dans

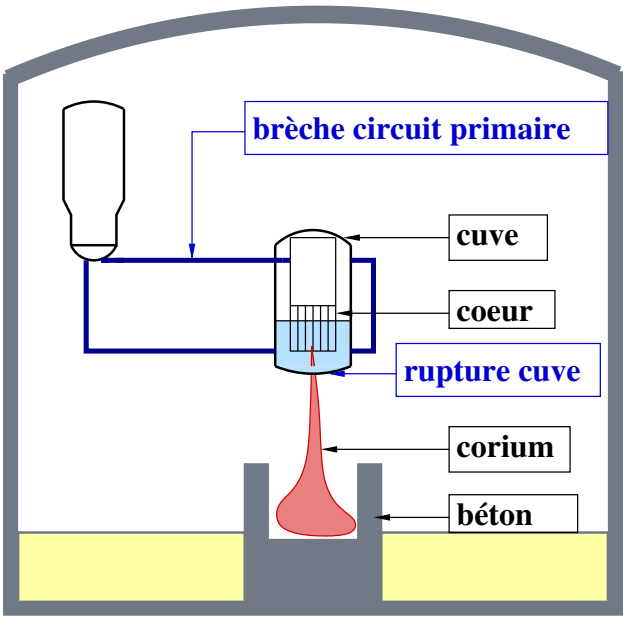


Fig. I.1: Schéma simplifié d'un scénario d'accident grave aboutissant à l'interaction corium-béton (cas des REP)

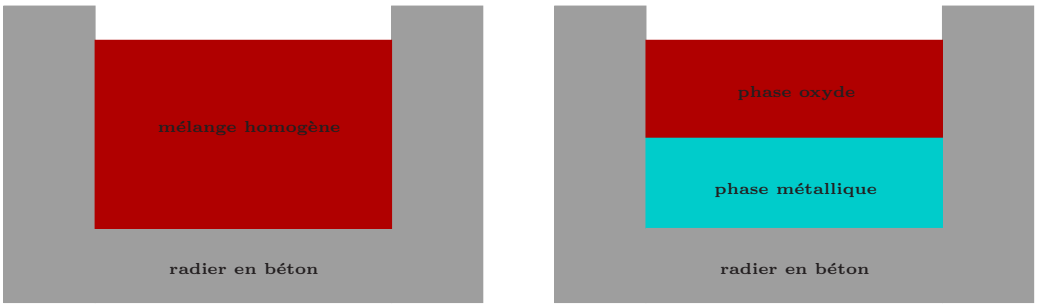
le circuit primaire provenant, par exemple, d'une brèche ou du défaut d'une pompe (*cf.* Fig.I.1). Dans ces conditions, si rien n'est fait, le coeur du réacteur peut être dénoyé et la température augmente sensiblement en raison de la puissance résiduelle générée par les réactions de fissions des noyaux d'uranium. Dès 1073K, le gainage en zirconium (Zr) des crayons de combustibles constituant le coeur du réacteur est oxydée en zircone (ZrO_2) par la vapeur d'eau. Les parties non oxydées commencent quant à elles à fondre dès 2073K et rentrent alors en contact avec le combustible constitué de dioxyde d'uranium (UO_2) pour former un système binaire UO_2-ZrO_2. Enfin, le combustible commence à fondre aux alentours de 3073K. Il se forme alors un mélange de matériaux fondus appelé *corium* constitué principalement de dioxyde d'uranium, de zircone ainsi que des produits de fusion des différentes structures en acier dont les principaux constituants sont le chrome (Cr), le nickel (Ni) et le fer (Fe). Ce mélange à haute température ($\sim$ 2700K) se relocalise vers le fond de cuve et peut entraîner plus ou moins rapidement la percée de la cuve par des contraintes thermiques (érosion thermique) et/ou mécaniques (*e.g.* fluage, rupture plastique,...). Dans ces conditions, le corium se relocalise dans le puits de cuve en béton qui constitue l'une des dernières barrières de confinement du réacteur (*cf.* Fig.I.1). Le béton se décompose alors en produits liquides (CaO, SiO_2, Al_2O, ...) et en produits gazeux tels que la vapeur d'eau (H_2O)

et le dioxyde de carbone (CO_2). Les constituants métalliques du bain de corium sont ensuite oxydés par le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau. Il se produit alors du monoxyde de carbone (CO) et du dihydrogène (H_2) qui, suite à leur dégagement, contribuent au risque de pressurisation de l'enceinte. La plupart de ces réactions d'oxydation étant fortement exothermiques [138], elles contribuent donc également à la production de chaleur au sein du bain de corium.

Cette étape de l'accident est appelée *interaction corium-béton* (ICB). Elle constitue l'un des enjeux majeurs des analyses de sûreté pour les réacteurs à eau sous pression du parc nucléaire actuel du fait de la perte de confinement et des éventuels rejets dans l'environnement qu'entraînerait une percée du radier. Pour les réacteurs de nouvelle génération de type EPR, la problématique de l'interaction corium-béton constitue également un enjeu majeur vis-à-vis des rôles du récupérateur et de la chambre d'étalement. Ce travail de thèse s'inscrit dans ce contexte et se propose de contribuer à la modélisation des échanges de masse et de chaleur dans le cadre de la problématique de l'interaction corium-béton.

I.2 Phénoménologie

L'interaction corium-béton se caractérise dans un premier temps par une étape transitoire associée au déversement et à l'impact de jets de corium sur le béton (*e.g.* choc thermique, phénomène de *spallation* [55], ...) qui peuvent altérer significativement la structure interne et externe du béton en provoquant la formation de fissures et/ou de fractures [66]. Dans ce travail, nous n'apportons pas de contribution à l'étude de ces phénomènes transitoires mais nous nous intéressons plus particulièrement à l'interaction proprement dite après le déversement total du corium sur le béton. Dans ce cas, on a l'habitude de distinguer deux configurations du bain de corium (*cf.* Fig.I.2) : une configuration dite *homogène* où le bain de corium est supposé être "macroscopiquement" bien mélangé par les gaz de décomposition du béton et une configuration dite *stratifiée* où il est communément admis que les principaux constituants du corium se séparent selon deux phases, l'une majoritairement oxyde et l'autre majoritairement métallique.



(a) configuration homogène (b) configuration stratifiée

Fig. I.2: Configurations envisagées pour le bain de corium lors de l'interaction corium-béton.

Dans le cadre de ce travail, on s'intéresse à la phase associée à une configuration dite homogène du bain de corium et on renvoie le lecteur intéressé aux travaux de Lapuerta [106] pour une étude des échanges entre les deux couches d'une configuration stratifiée. Même dans cette configuration, on s'attend à des comportements différents en fonction du type de béton mis en jeu lors de l'interaction. Il existe en effet plusieurs types de béton et leur comportement à haute température dépend essentiellement de la nature des agrégats minéraux qui les composent.

Le béton est un matériau composite principalement constitué d'agrégats minéraux (*e.g.* la silice SiO_2, le calcaire $CaCO_3$, ...) liés entre eux hydrauliquement par une matrice de pâte de ciment

durcie (*i.e.* le mortier). Cette pâte hautement poreuse est principalement composée d'alumine (Al_2O_3), d'hématite (Fe_2O_3), et de chaux vive (CaO), et nécessite une grande quantité d'eau, appelée eau de gâchage, pour lier les agrégats entre eux. On distingue alors deux types d'eau : l'eau liée chimiquement et l'eau évaporable. Cette dernière est retenue mécaniquement entre les agrégats ou dans le ciment tandis que la quantité d'eau liée est déduite de la différence entre l'eau de gâchage (*i.e.* l'apport initial) et l'eau évaporable. Généralement, la proportion en eau dans le ciment est de 70% d'eau libre et 30% d'eau liée [36]. Les bétons utilisés dans la conception des radiers des REP du parc nucléaire Français actuel peuvent être classés en trois principales catégories :

1. les bétons de type siliceux : majoritairement riche en agrégats de silice (SiO_2),
2. les bétons de type calcaire : majoritairement riche en agrégats de calcaire ($CaCO_3$),
3. les bétons de type silico-calcaire : contenant à la fois des agrégats de silice et de calcaire.

Pour les réacteurs de nouvelle génération de type EPR, le béton utilisé pour la conception du récupérateur de corium est un béton sacrificiel de type silico-calcaire dans lequel les agrégats de calcaire ont été remplacés par des agrégats de clinker (*i.e.* du silicate de calcium calciné) [60].

Comme nous l'avons évoqué précédemment, le comportement de ces bétons lors de l'interaction corium-béton dépend essentiellement des agrégats qui les composent, à savoir la silice, le calcaire et le clinker. Dans ce travail, même si nous ne nous intéressons pas aux hétérogénéités du béton, existantes ou engendrées lors de la première phase de l'interaction (*e.g.* fracture, ...), nous trouvons néanmoins intéressant de présenter certaines propriétés du béton lorsqu'il est soumis à de hautes températures. Cela nous permettra ensuite de souligner le rôle des différents agrégats au cours de l'interaction corium-béton. Lorsqu'un béton est soumis à de hautes températures, on distingue principalement les étapes suivantes [13] :

$\sim$ 373K : évaporation de l'eau libre contenue dans le ciment et les agrégats

$\sim$ 453K : déshydratation du ciment

$\sim$ 773K : décomposition des hydrates de calcium

$$Ca(OH)_2 \rightarrow CaO + H_2O$$

$\sim$ 973K $-$ 1173K : réaction de décarbonatation des agrégats de calcaire

$$CaCO_3 \rightarrow CaO + CO_2$$

$\sim$ 1423K $-$ 1473K : début de la fusion du ciment et des agrégats de calcaire

$\sim$ 1973K : début de la fusion des agrégats de silice

La décomposition du béton entraîne donc le relâchement d'espèces gazeuses telles que la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone issues respectivement des différentes étapes de déshydratation de la matrice de ciment et de la réaction de décarbonatation des agrégats de calcaires. Les bétons de types calcaire ou silico-calcaire sont plus riches en carbonates que les bétons siliceux. Par conséquent, lors de l'interaction corium-béton, ils vont relâcher une quantité nettement plus importante de dioxyde de carbone. En outre, comme le clinker ne contient pas de carbonates, le béton sacrificiel utilisé dans la conception du récupérateur d'EPR relâche beaucoup moins de dioxyde de carbone que les bétons de type calcaire ou silico-calcaire et se rapproche ainsi sur ce point des bétons de type siliceux. On rappelle également que l'étape transitoire associée au déversement du corium est susceptible de générer un réseau de fractures au sein du béton qui constitue alors des chemins préférentiels pour les gaz de décomposition. Ainsi, la distribution des sites de relâchement de gaz

dépend non seulement du type de béton mais aussi des fractures naturelles ou induites par la phase de déversement.

L'érosion thermique du béton provoque également sa décomposition en produits liquides (CaO, SiO_2, Al_2O, ...) miscibles avec les oxydes constituant le corium. Le mélange de béton fondu étant moins dense que le corium, celui-ci peut être éjecté partiellement ou totalement dans le bain de corium sous l'effet des forces de flottaison (instabilités de Rayleigh-Taylor). Les structures convectives associées contribuent ainsi au mélange compositionnel entre le corium et le béton. Les agrégats de silice sont susceptibles de jouer un rôle important sur les caractéristiques de mélange. En effet, la température des agrégats de silice étant bien supérieure à celle du mortier, ceux-ci peuvent éventuellement être éjectés (ablation mécanique) [94] et contribuer à une augmentation de la viscosité dans le bain (effet de la silice) ainsi qu'au voisinage du front d'ablation (effet des particules solides). Dans le cas contraire, en l'absence d'ablation mécanique, les agrégats de silice fondus ont pour effet d'augmenter fortement la viscosité au voisinage du front d'ablation. D'autres mécanismes sont susceptibles d'altérer le mélange compositionnel associé aux instabilités de Rayleigh-Taylor et la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation. Le relâchement des gaz de décomposition du béton peut par exemple conduire à la formation d'un film de gaz entre le béton fondu et le béton dégradé mais aussi provoquer l'entraînement partiel ou total du béton fondu dans le corium et donc contribuer au mélange compositionnel entre le corium et le béton. Enfin, la présence de *zones pâteuses* ou de croûtes, principalement dues au caractère réfractaire du corium, peut également venir modifier les structures d'écoulement au voisinage du front d'ablation. Le diagramme de phase associé au *pseudo-binaire* corium-béton présenté sur la figure (I.3) montre des différences importantes entre les températures de liquidus et de solidus, ce qui suggère effectivement la présence de zones *pâteuses* au voisinage du front d'ablation. Signalons ici que le mélange constitué par les différentes espèces constituant le corium et les produits de décomposition liquides du béton est communément assimilé à un *pseudo-binaire*, c'est-à-dire à un mélange de deux "corps purs" correspondant ici au corium et au béton, pour sa caractérisation thermodynamique [40] et les applications réacteurs.

I.3 Description des échanges à l'interface du corium et du béton

Les outils numériques utilisés dans la gestion de crise permettant, d'une part, de simuler la phénoménologie de l'interaction corium-béton et, d'autre part, d'estimer le temps de percement du radier sont des *codes à zones*. On cite en particulier le code d'évaluation réacteur MEDICIS (Model of Erosion Due to Interaction of CorIum with basemat Substrate) [42] qui est le module dédié à l'ICB du code ASTEC (Accident Source Term Evaluation Code) [147] développé par l'IRSN et son homologue allemand GRS (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH). De tels outils numériques sont basés sur une description à grande échelle des échanges de masse et de chaleur avec deux types de configuration du bain de corium (*cf.* Fig.I.2) : d'une part une configuration dite *homogène* dans laquelle le bain est assimilé à un mélange principalement constitué d'oxyde et, d'autre part, une configuration dite *stratifiée* avec une couche oxyde et une couche métallique. Comme nous l'avons précisé précédemment, on s'intéresse dans ce travail à la phase "bien mélangée" et donc à la modélisation des échanges entre ce mélange et le béton.

Le flux de chaleur à l'interface du corium et du béton q est généralement calculé par l'expression suivante [142]

$$q = h\,(T_c - T_i) \tag{I.1}$$

où T_c et T_i désignent respectivement la température moyenne du bain de corium et une température moyenne d'interface. Selon les modèles, T_i peut être assimilée à la température de liquidus du pseudo-binaire corium-béton (*e.g.* [136]), à une température de décomposition du béton (*e.g.* [27]) ou encore à une température intermédiaire entre la température de solidus et de liquidus (*e.g.* [42]).

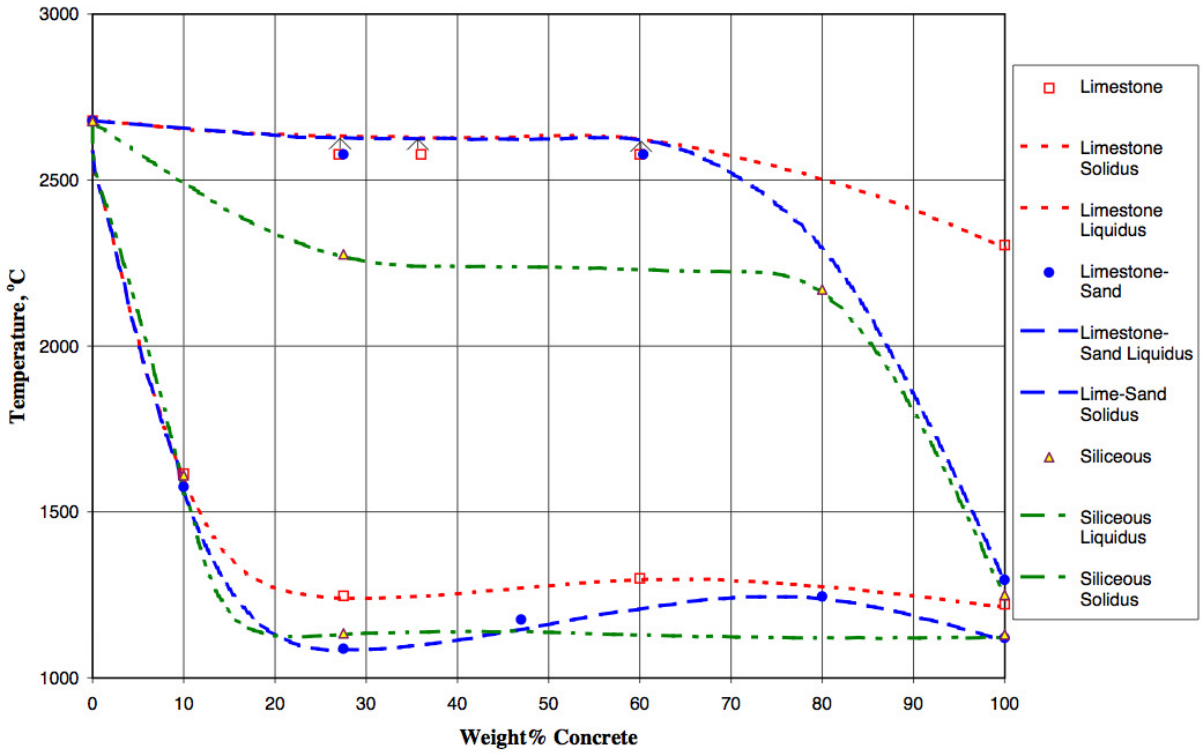


Fig. I.3: Diagramme de phases pseudo-binaires pour les mélanges UO_2-ZrO_2-béton (calcaire (*cf.* limestone), siliceux (*cf.* siliceous), silico-calcaire (*cf.* limestone-sand)) [129].

Cette température d'interface est donc un paramètre de modélisation dont la définition dépend principalement d'une représentation à priori connue de l'interface entre le corium et le béton. Dans (I.1), h désigne un coefficient de transfert de chaleur à l'échelle du code d'évaluation réacteur pour lequel de nombreux modèles ont été proposés.

Devant la complexité et le couplage des phénomènes potentiellement mis en jeu au voisinage du front d'ablation, la démarche habituellement retenue pour la modélisation des échanges consiste dans un premier temps à décrire les échanges associés à une partie des phénomènes, principalement les échanges associés au dégazage du béton et ceux associés aux effets compositionnels. Les modèles d'échange des codes d'évaluation réacteur sont ensuite construits sur la base d'une structure a priori connue de la couche limite à l'échelle du front d'ablation en privilégiant un phénomène particulier ou en tentant d'intégrer l'ensemble des phénomènes.

Les modèles d'échange sont présentés selon cette démarche et nous commençons par rappeler les principaux modèles proposés visant à décrire les échanges associés à une partie des phénomènes potentiellement mis en jeu. Les phénomènes considérés sont, d'une part, les échanges convectifs associés au dégazage du béton pour lesquels il existe une littérature abondante en raison des nombreuses problématiques associées à l'ébullition nucléée et, d'autre part, les échanges associés à la convection compositionnelle pour lesquels la littérature est principalement issue des travaux menés en volcanologie. Nous présentons ensuite les modèles d'échange dits globaux tentant d'intégrer l'ensemble des phénomènes et qui, en pratique, sont ceux utilisés dans les codes d'évaluation réacteur. Enfin, nous terminons cette partie par une discussion sur les questions posées par ces différents modèles.

I.3.1 Modèles d'échange associés au dégazage

Nous avons vu précédemment qu'au cours de l'interaction corium-béton la décomposition du béton provoquait un important dégagement gazeux au voisinage de l'interface.

De nombreux travaux expérimentaux simulant ce phénomène ont été réalisés pour étudier le transfert de chaleur entre un liquide à haute température et une plaque poreuse (ou percolée) traversée par du gaz. On cite par exemple les travaux de Kutateladze [103], Kutateladze et Malenkov [104], Duignan *& al.* [49] ou encore ceux de Bonnet réalisés dans le cadre du programme expérimental BALI [19]. Dans ces expériences, de nombreux paramètres ont été étudiés comme par exemple la viscosité du liquide et la vitesse superficielle du gaz. Les principaux résultats de ces travaux montrent qu'une augmentation de la viscosité du liquide entraîne une diminution du coefficient de transfert de chaleur tandis que ce dernier augmente lorsque la vitesse superficielle du gaz augmente. Certains auteurs (*e.g.* [54] pour une revue) ont établi notamment sur la base de résultats expérimentaux des corrélations reliant le nombre de Nusselt Nu (*i.e.* version adimensionnée du coefficient de transfert de chaleur) à d'autres nombres sans dimension tels que le nombre de Prandtl Pr, le nombre de Reynolds Re ou encore le nombre de Froude Fr. Cependant, comme le souligne Tourniaire [142], l'extrapolation de ces corrélations aux cas réacteurs caractérisés par des fluides de fortes viscosité reste à démontrer.

D'autres auteurs ont construit des modèles d'échanges de chaleur dits *à interface renouvelable* (ou "surface renewal models" pour la terminologie anglo-saxonne). Ces modèles supposent que le transfert de chaleur est principalement contrôlé par l'agitation locale des bulles qui viennent périodiquement perturber l'interface liquide-solide (*e.g.* corium-béton solide) et ainsi mettre en contact le solide froid avec le liquide chaud pendant un certain temps τ appelé temps de renouvellement d'interface. Lors de chaque contact, un phénomène de diffusion de chaleur transitoire prend place à l'interface du liquide et du solide. Ce phénomène peut être décrit par un problème instationnaire de diffusion de chaleur pour un système diphasique stratifié (*e.g.* [142]). La résolution de ce problème (*e.g.* [34]) permet de déterminer le flux de chaleur moyen à l'interface liquide-solide $\overline{q}$ au cours de chaque contact. Il s'écrit en effet

$$q = h\,(T_\ell - T_i) \tag{I.2}$$

où T_ℓ, T_i et h désignent respectivement la température du liquide chaud, la température d'interface entre le liquide et le solide, et le coefficient de transfert de chaleur. Ce dernier est défini en fonction du temps caractéristique de renouvellement d'interface τ sous la forme

$$h = 2\frac{\beta_\ell}{\sqrt{\tau\pi}} \tag{I.3}$$

où β_ℓ désigne l'effusivité thermique du béton. Toute la difficulté réside alors dans la détermination de ce temps caractéristique τ. Une estimation standard de ce temps caractéristique est donnée par le rapport entre le diamètre de bulle d_b et la vitesse superficielle du gaz j_g (*e.g.* [142]). Cette approche dimensionnelle du temps de renouvellement d'interface reste intuitive mais certains auteurs ont tenté d'enrichir cette approche avec des hypothèses sur les propriétés physiques du mécanisme de perturbation de l'interface. A cet effet et pour illustrer nos propos, on se propose ici de clore cette première partie en présentant les modèles de Deckwert [47] et de Lee *& al.* [109] qui sont basés sur une hypothèse similaire de perturbation de l'interface due au bullage et qui conduisent à deux estimations différentes du temps de renouvellement d'interface. Signalons que bien que le modèle de Deckwert ait été initialement introduit pour la détermination d'un coefficient de transfert de chaleur entre une paroi imperméable et un bain à bulles, ce modèle est également appliqué dans le cas de plaques poreuses traversées par du gaz [142].

Modèle de Deckwert [47]

Dans le cadre d'une étude du mécanisme de transfert de chaleur dans une colonne à bulles, Deckwert considère que des tourbillons circulent du volume de fluide à la paroi et réciproquement. L'agitation des bulles entre le bain de liquide et une paroi suggère un processus de diffusion pour le transfert de chaleur. Son étude du coefficient de transfert de chaleur est également basée sur la résolution d'un problème instationnaire de diffusion de chaleur pour un système diphasique stratifié. Il détermine ainsi le flux de chaleur moyen en fonction d'un temps caractéristique τ qui dans ce cas correspond au temps de contact des tourbillons avec la paroi. Deckwert propose alors d'utiliser la théorie de la turbulence isotrope de Kolmogorov pour estimer τ. Dans un écoulement turbulent, de grands tourbillons résultants de perturbations sont formés et contiennent la majorité de l'énergie. Toutefois, ils ne contribuent pas à la dissipation d'énergie visqueuse ε. Cette dissipation est effectuée par les petits tourbillons générés par le mouvement des grands tourbillons. Deux grandeurs caractéristiques dépendant uniquement de la viscosité cinématique η et de la dissipation d'énergie visqueuse ε sont corrélées à ces petits tourbillons :

1. la longueur caractéristique des petits tourbillons λ,

$$\lambda = \left(\frac{\eta^3}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{I.4}$$

2. la vitesse caractéristique des petits tourbillons,

$$v = (\eta\varepsilon)^{\frac{1}{4}} \tag{I.5}$$

Deckwert suggère que le bullage considéré dans son étude créée des petits tourbillons s'impactant sur la paroi. Sous cette hypothèse, il estime que le temps de contact des particules fluides avec la paroi est donné par

$$\tau = \frac{\lambda}{v} \tag{I.6}$$

De cette manière, le coefficient de transfert de chaleur h est définie en fonction de l'énergie de dissipation visqueuse. Cette dernière inconnue est estimée par Deckwert comme étant le produit de la vitesse superficielle du gaz j_g et de l'accélération gravitationnelle g.

Modèle de Lee *& al.* [109]

Lee *& al.* développent un modèle à interface renouvelable entre le béton et un bain de corium. Ce modèle suggère que l'interface entre le corium et le béton est perturbée par le passage d'une bulle de gaz qui détruit le gradient de température entre les deux phases (*i.e.* corium-béton solide). Après le passage de cette bulle, il existe un temps de contact entre le bain de corium et le béton. Le temps caractéristique τ dans le modèle de Lee *& al.* est défini comme le temps existant entre le passage de deux bulles successives. Afin d'estimer ce temps caractéristique, Lee *& al.* font les hypothèses suivantes :

1. la période entre chaque passage de bulle peut être identifiée comme étant le temps de contact de la bulle avec la surface en béton (*i.e.* le temps de détachement)
2. le taux de croissance d'une bulle est proportionnel au produit de la vitesse superficielle du gaz j_g et d'une surface d'une section de béton donnée comme étant le carré de la constante de Laplace A,
3. le rayon de départ de la bulle est donné par un équilibre entre les forces de flottaison et de tension de surface,

4. la vitesse superficielle du gaz j_g est reliée au flux de chaleur moyen q par la relation

$$\varrho_g L j_g = q = h\left(T_{corium} - T_f\right) \tag{I.7}$$

où ϱ_g, L et T_f désignent respectivement la masse volumique du gaz, la chaleur effective de fusion du béton incluant la chaleur latente du béton solide et la température de fusion du béton.

Sous ces hypothèses, la forme du temps caractéristique proposée par Lee *& al.* est donnée par

$$\tau \sim \frac{A\varrho_g L}{q} \tag{I.8}$$

Les derniers modèles d'échanges de chaleur présentés dans cette partie sont basés sur un concept d'interface renouvelable faisant l'hypothèse d'une perturbation périodique de l'interface liquide-solide par le bullage. Cette approche s'applique de manière plus générale à d'autres types de systèmes multiphasiques et/ou multiconstituants pour lesquels le renouvellement d'interface est régi par des perturbations autres que le bullage. A titre d'exemple, nous pourrons voir dans la prochaine partie que, pour un système compositionnel liquide-liquide hydrodynamiquement instable, une instabilité de Rayleigh-Taylor peut être considérée comme la perturbation régissant le renouvellement d'interface. Nous verrons en outre dans la dernière partie de cette section que certains modèles d'échanges globaux peuvent également être assimilés à des modèles à interface renouvelable.

I.3.2 Modèles d'échange associés à la convection compositionnelle

L'érosion thermique du béton lors de l'interaction corium-béton entraîne la décomposition du béton non seulement en produits gazeux mais aussi en produits liquides (ou béton fondu) présentant la particularité d'être totalement miscibles avec les espèces oxyde constituant le corium. Comme le souligne Epstein [53], du fait de l'absence d'effets capillaires entre le corium et le béton, le contraste de densité existant entre ces deux fluides est suffisant pour produire sous l'effet des forces de flottaison un mouvement de convection compositionnelle intense qui peut avoir un impact significatif sur la cinétique d'ablation.

D'après Epstein [53], une des premières études théoriques portant sur le sujet a été proposée par Cheung [39]. Il s'agit d'un modèle pour la vitesse d'ablation ayant été dérivé dans le cadre de l'approximation de Boussinesq. Epstein souligne néanmoins que ce modèle n'est valable que pour des nombres de Prandtl Pr de l'ordre de l'unité. Il est donc difficilement extrapolable au cas de l'interaction corium-béton puisque le nombre de Prandtl Pr pour le béton est compris entre 10^3 et 10^4. Le premier modèle de transfert de chaleur semble avoir été proposé par Catton [35]. Ce modèle est basé sur l'hypothèse de l'existence d'une fine couche de substrat fondu entre le liquide et le substrat solide dont le comportement est régi par un mécanisme d'instabilité de Rayleigh-Taylor avec tension de surface nulle. Il prédit non seulement que le transfert de chaleur dépend du contraste de densité entre le liquide et le substrat fondu mais aussi qu'il est indépendant de la différence de température entre ces deux mêmes fluides.

Dans le domaine de la géophysique, on peut citer les travaux de Kerr [97] réalisés dans le cadre de l'étude du comportement des magmas basaltiques dans la croûte terrestre et repris par Carenini *& al.* [31, 32] pour l'interprétation de certains essais VULCANO. De notre point de vue, un des intérêts de ce modèle vis-à-vis de nos applications réacteur est qu'il tient compte non seulement du contraste de densité mais aussi du contraste de viscosité. On se propose ici de reprendre et de présenter dans ses grandes lignes la dérivation de ce modèle.

Modèle d'échange proposé par Kerr [97]

Le système physique considéré consiste en un système stratifié avec un liquide chaud de composition initiale C_f qui surplombe un substrat solide de composition initiale C_s (*cf.* Fig.I.4). La température initiale du solide est notée T_s et sa température d'ablation T_m.

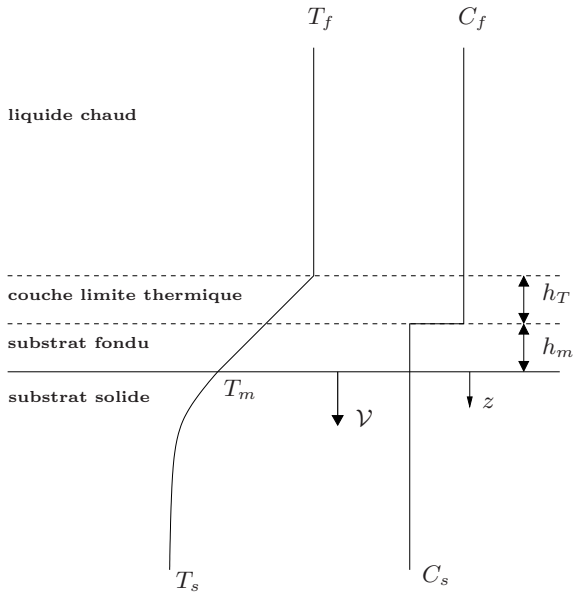


Fig. I.4: Représentation schématique de l'interface lors de l'ablation d'un substrat solide par un liquide à une vitesse constante $\mathcal{V}$: substrat solide, couche de substrat fondu d'épaisseur h_m, couche limite thermique d'épaisseur h_T, liquide chaud.

Pour dériver son modèle, Kerr fait les hypothèses suivantes :

1. le volume de liquide chaud est suffisamment important pour que ses propriétés physiques restent inchangées,
2. le solide est ablaté à une vitesse constante $\mathcal{V}$,
3. l'interface entre le solide et le substrat fondu est plane,
4. les variations de température vis-à-vis des densités du liquide chaud et du substrat fondu sont négligeables par rapport aux variations de composition,
5. la diffusion compositionnelle est négligée devant la diffusion thermique (*i.e.* $T_f \gg T_m$ et profil de composition "sharp" (*cf.* Fig.I.4)).

Comme nous l'avons évoqué précédemment, l'objectif est de déterminer la vitesse d'ablation $\mathcal{V}$ lorsque la décomposition thermique du solide provoque un mouvement de convection compositionnelle vigoureux. Cela suppose donc que la densité du liquide chaud ϱ_f est nettement supérieure à celle du substrat fondu ϱ_m. Dans ces conditions, Kerr précise que l'on peut envisager la présence d'une couche de substrat fondu hydrodynamiquement instable qui croît progressivement et se détache périodiquement pour contribuer au mouvement convectif. Pour prédire l'épaisseur h_m de cette couche de substrat fondu avant la déstabilisation, Kerr suppose que le temps de croissance de cette couche (*i.e.* $h_m/\mathcal{V}$) est comparable au temps de croissance exponentielle d'une instabilité gravitationnelle τ. Ce dernier est estimé dans le cadre d'une analyse de stabilité linéaire de type Rayleigh-Taylor sous la forme

$$\tau \sim P\left(\frac{\eta_f}{\eta_m}\right)\frac{\eta_m}{g h_m\left(\varrho_f - \varrho_m\right)} \tag{I.9}$$

où g et $P\left(\eta_f/\eta_m\right)$ désignent respectivement l'accélération de la pesanteur et une certaine fonction qui dépend du contraste de viscosité entre les deux fluides η_f/η_m et qui converge asymptotiquement vers la valeur 6.222 lorsque $\eta_f \ll \eta_m$. Sous ces hypothèses, les estimateurs du temps de croissance de couche et de l'épaisseur de la couche de substrat fondu sont donnés par

$$\tau \sim \sqrt{\frac{P\eta_m}{g\mathcal{V}\left(\varrho_f - \varrho_m\right)}} \quad ; \quad h_m \sim \sqrt{\frac{P\mathcal{V}\eta_m}{g\left(\varrho_f - \varrho_m\right)}} \tag{I.10}$$

Durant la croissance de la couche de substrat fondu (*i.e.* au cours du temps τ), un couche limite thermique prend place juste au dessus de la couche de substrat fondu dans laquelle la chaleur est transportée par diffusion (*cf.* Fig.I.4). L'épaisseur de cette couche h_T est déterminée à partir de l'expression de τ sous la forme suivante

$$h_T \sim \sqrt{\kappa_f \tau} \sim \left(\frac{P\eta_m {\kappa_f}^2}{g\mathcal{V}\left(\varrho_f - \varrho_m\right)}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{I.11}$$

où κ_f désigne la diffusivité thermique du liquide chaud. La couche de substrat fondu et la couche limite thermique sont traitées comme des résistances thermiques en séries et le flux de chaleur provenant du liquide chaud et traversant chacune de ces couches est estimé par

$$F_1 \sim \frac{1}{\left(\frac{h_T}{k_f}\right) + \left(\frac{h_m}{k_m}\right)} \left(T_f - T_m\right) \tag{I.12}$$

où k_f et k_m désignent respectivement les conductivités thermiques du liquide et du substrat fondu. Par ailleurs, le flux de chaleur nécessaire à l'échauffement et à la fusion du substrat solide s'écrit

$$F_2 = \varrho_s \mathcal{V}\left(L + C_{p_s}\left(T_m - T_s\right)\right) \tag{I.13}$$

où ϱ_s, C_{p_s} et L désignent respectivement la densité, la chaleur spécifique et la chaleur de fusion du solide. Dans le cadre d'une approximation quasi-stationnaire, le flux de chaleur se conserve et on notera par la suite $F = F_1 = F_2$. Kerr introduit alors le nombre de Stefan St défini par

$$\mathrm{St} = \frac{\varrho_s\left(L + C_{p_s}\left(T_m - T_s\right)\right)}{\varrho_f C_{p_f}\left(T_f - T_m\right)} \tag{I.14}$$

où C_{p_f} représente la chaleur spécifique du liquide chaud. A ce niveau, en remarquant d'une part que les relations (I.10) et (I.11) permettent d'écrire $V/\kappa_f \sim h_m/{h_T}^2$ et d'autre part, que le nombre de Stefan s'exprime encore à partir de (I.12) et (I.13) sous la forme $\mathrm{St} \sim \kappa_f/V h_T$, le flux de chaleur défini par la relation (I.12) se réécrit comme suit

$$F = \frac{h_m}{h_T}\left(T_f - T_m\right)\left(1 + \frac{k_f}{k_m \mathrm{St}}\right)^{-1} \tag{I.15}$$

Enfin, par conservation des flux de chaleur (*i.e.* (I.12)=(I.13)), on obtient une estimation de la vitesse d'ablation sous la forme suivante

$$\mathcal{V} = A\left(\frac{g\left(\varrho_f - \varrho_m\right){\kappa_f}^2}{P\eta_m \mathrm{St}^4}\right)^{\frac{1}{3}}\left(1 + \frac{k_f}{k_m \mathrm{St}}\right)^{-1} \tag{I.16}$$

où A désigne une constante de proportionnalité. Cette estimation de la vitesse d'ablation reste valable pour des nombres de Stefan supérieurs ou de l'ordre du rapport k_f/k_m ce qui signifie que l'épaisseur de la couche limite thermique ne peut être négligée devant l'épaisseur de la couche de substrat fondu.

I.3.3 Modèles d'échange globaux

Dans les deux précédentes parties, nous avons présenté les modèles d'échanges associés d'une part au dégazage du béton et d'autre part, aux effets compositionnels. Dans le cas général, nous avons vu précédemment que plusieurs phénomènes couplés étaient potentiellement mis en jeu au voisinage du front d'ablation à l'interface du corium et du béton. Pour prendre en compte ces phénomènes, certains auteurs ont construit des modèles d'échanges dits *globaux* en s'appuyant sur une structure à priori connue de l'interface entre le corium et le béton. Par exemple, voici sur la figure (I.5) une représentation de l'interface proposée par Bradley [27] décrivant certains phénomènes (*e.g.* couche de béton fondu, film de gaz, croûte de corium, ...) que les modèles d'échanges globaux considèrent. Parmi ces modèles, on cite par exemple le *gas film model* qui fait l'hypothèse de la présence d'un

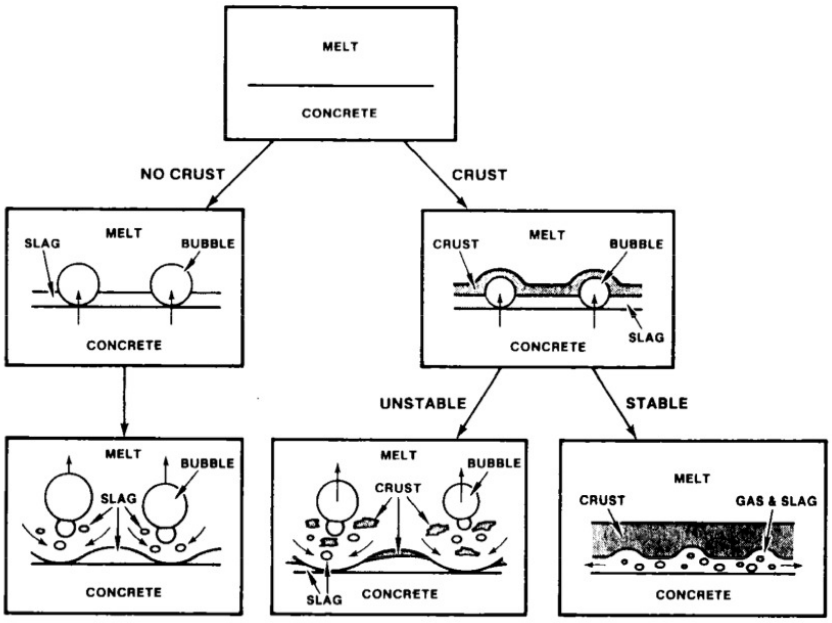


Fig. I.5: Représentation proposée par Bradley [27] des différents mécanismes potentiellement présents à l'interface du corium et du béton.

film de gaz stable, le *slag model* qui met en série une couche de béton fondu, une éventuelle croûte de corium et une couche de corium, ou encore le *post-freezing model* qui modélise l'impact d'une éventuelle croûte de corium. On se propose ici de présenter plus particulièrement dans ses grandes lignes un modèle proposé par Kao et Kazimi [95], à savoir le *periodic contact model*. De notre point de vue, cette présentation est intéressante pour deux raisons. La première raison est qu'elle permet d'illustrer simplement l'approche heuristique suivie par les modèles d'échanges globaux. La seconde raison est que le *periodic contact model* s'appuie également sur le concept d'interface renouvelable précédemment présenté. Il s'inscrit par conséquent dans la continuité des deux précédentes parties.

Periodic contact model proposé par Kao et Kazimi [95]

Kao et Kazimi supposent que le transfert de chaleur à l'interface du corium et du béton est piloté par les mécanismes suivants (*cf.* Fig.I.6) :

1. une agitation intense du bain de corium par les gaz de décomposition du béton,
2. l'existence d'une fine couche de béton fondu hydrodynamiquement instable,
3. la formation d'une croûte de corium.

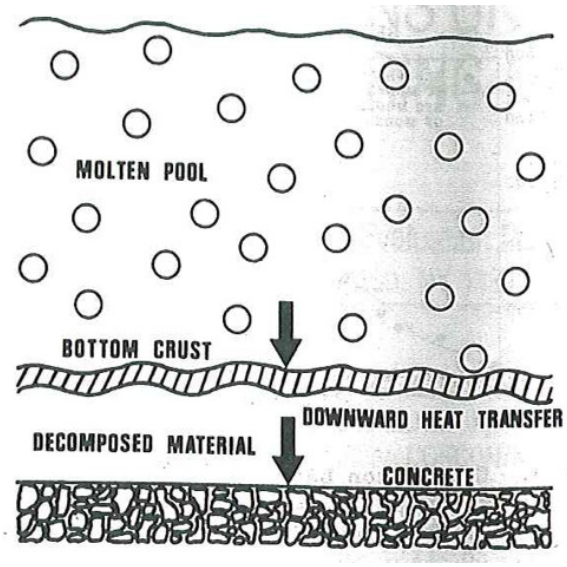


Fig. I.6: Représentation de l'interface entre le corium et le béton proposée par Kao et Kazimi [95]

Les effets associées à la formation d'une croûte de corium ne sont pas pris en compte dans le *periodic contact model*. Nous renvoyons le lecteur intéressé dans [95] pour un complément d'information sur le sujet.

Comme nous l'avons évoqué précédemment, le *periodic contact model* est un modèle à intervalle renouvelable s'appuyant sur l'hypothèse que du corium chaud rentre périodiquement en contact avec le béton froid sous l'effet du bullage qui déplace le béton fondu dans le bain de corium. Dans ce modèle, les effets liés au dégazage et au béton fondu sont simultanément pris en compte au travers d'un système diphasique liquide-liquide dont les propriétés thermiques sont calculées à partir de valeurs moyennes associées au gaz et au béton fondu.

Les flux de chaleur traversant les interfaces corium/béton fondu et béton fondu/béton solide sont respectivement définis par q_1 et q_2 sous la forme suivante

$$q_1 = h_1 (T_b - T_s) \zeta \tag{I.17}$$
$$q_2 = h_2 (T_b - T_i) \tag{I.18}$$

où T_b, T_i, T_s, h_1 et h_2 désignent respectivement la température du corium, une température moyenne d'interface restant à préciser, la température du béton solide et deux coefficients de transferts de chaleur. Le coefficient ζ permet de prendre en compte l'énergie nécessaire pour chauffer la couche de béton fondu au dessus de la température d'ablation. Il est donné par

$$\zeta = \frac{L + C_{p_f} (T_i - T_s) / 3}{L} \tag{I.19}$$

où L, C_{p_f} désignent la chaleur latente de fusion et la chaleur spécifique du béton. Dans le cadre d'une approximation quasi-stationnaire, le flux de chaleur se conserve à travers chaque couche de l'interface et on peut écrire une relation entre les coefficients de transferts de chaleur h_1 et h_2 sous la forme suivante

$$h_1 = h_2 \left(\frac{T_b - T_i}{T_b - T_s} \right) \zeta \tag{I.20}$$

Par ailleurs, si l'on suppose que l'interface entre le bain de corium et le béton fondu est périodiquement perturbé par le passage d'une bulle de gaz, alors le flux de chaleur q_2 s'écrit encore à partir

de (I.2) et (I.3) sous la forme

$$q_2 = 2\frac{\beta_b}{\sqrt{\pi\tau}}\left(T_b - T_i\right) \tag{I.21}$$

où β_b et τ désignent respectivement l'effusivité thermique du corium et le temps de déstabilisation de l'interface. Ce dernier est défini de manière analogue à l'approche de Lee [109] (*cf.* (I.3.1)) comme étant le temps existant entre le passage de deux bulles successives. Il s'écrit à partir de la relation (I.8)

$$\tau \sim \frac{A\varrho_f L}{q_2\zeta} \tag{I.22}$$

où A et ϱ_f correspondent respectivement à la constante de Laplace et la densité du béton fondu. Désormais, en substituant l'expression (I.22) dans (I.21) puis en utilisant la définition (I.18), on obtient

$$h_2 = \frac{4\beta_b}{\pi A\varrho_f L}\left(T_b - T_i\right)\zeta \tag{I.23}$$

Le coefficient de transfert de chaleur h_1 donné par (I.20) s'écrit à partir de la relation (I.23) sous la forme

$$h_1 \;=\; \frac{4\beta_b\left(T_b - T_s\right)}{\pi A\varrho_f L}\left[\left(\frac{T_b - T_i}{T_b - T_s}\right)\zeta\right]^2 \tag{I.24}$$

Soit encore,

$$h_1 \;=\; \frac{4k_f C_{p_f}\left(T_b - T_s\right)}{\pi A\beta_b L}\left[\frac{\beta_b}{\beta_f}\left(\frac{T_b - T_i}{T_b - T_s}\right)\zeta\right]^2 \tag{I.25}$$

où β_f et k_f désignent respectivement l'effusivité thermique et la conductivité thermique du béton fondu. Le coefficient de transfert de chaleur h_1 entre le corium et le béton peut également s'exprimer sous forme adimensionnée à partir du nombre de Nusselt $\mathrm{Nu} = h_1 A/k_f$. D'après (I.25), ce dernier s'écrit

$$\mathrm{Nu} = C\left[\frac{C_{p_f}\left(T_b - T_s\right)}{L}\right]\gamma^2 \tag{I.26}$$

où nous avons introduit

$$C = \frac{4}{\pi} \quad ; \quad \gamma = \frac{\beta_b}{\beta_f}\left(\frac{T_b - T_i}{T_b - T_s}\right)\zeta \tag{I.27}$$

Il reste désormais à déterminer la température moyenne d'interface T_i. L'estimation proposée par Kao et Kazimi s'écrit

$$\frac{T_b - T_i}{T_b - T_s} = (1-\zeta)\left(\frac{\beta_f}{\beta_b + \beta_f}\right) + \zeta\left(\frac{\beta_s}{\beta_b + \beta_s}\right) \tag{I.28}$$

Il s'agit ici d'une combinaison de la température d'interface dans le cas où le corium est directement en contact avec le béton solide avec la température d'interface dans le cas où le corium est en contact avec la couche de béton fondu. De cette manière, le coefficient de transfert de chaleur donné par la relation (I.26) tient compte de la présence ou non d'une couche de béton fondu hydrodynamiquement instable.

Les modèles d'échanges globaux précédemment cités prennent en compte une certaine gamme de mécanismes physiques supplémentaires potentiellement présents à l'interface du corium et du béton mais supposent que les fluides mis en jeu sont non miscibles. A notre connaissance, seuls les travaux d'Epstein [53] prennent en compte les effets compositionnels entre le béton fondu et les oxydes constituant le corium. Epstein a en effet construit un modèle d'échange global en se

basant également sur une structure à priori connue de l'interface entre le corium et le béton faisant l'hypothèse de l'existence d'une couche de béton fondu entre un corium oxyde et un béton en décomposition (*cf.* Fig.I.7). En s'appuyant sur les travaux de Davenport et King [43] réalisés dans le cadre d'une étude sur la convection libre à haut nombre de Rayleigh Ra, Epstein suppose que cette couche de béton fondu est marginalement stable et que son épaisseur est donnée à partir du nombre de Rayleigh critique local (*i.e.* la valeur du nombre de Rayleigh à partir de laquelle l'instabilité hydrodynamique se déclenche). D'un point de vue des transferts de chaleur, la couche de béton fondu est traitée comme une résistance thermique en série avec les coefficient de transfert de chaleur convectifs associés, d'une part, au bullage et, d'autre part, au dégagement de plumes de béton fondu sous l'effet des forces de flottaison. Enfin, les mouvements convectifs induits dans le bain de corium sont décrit à l'aide de corrélations disponibles dans la littérature.

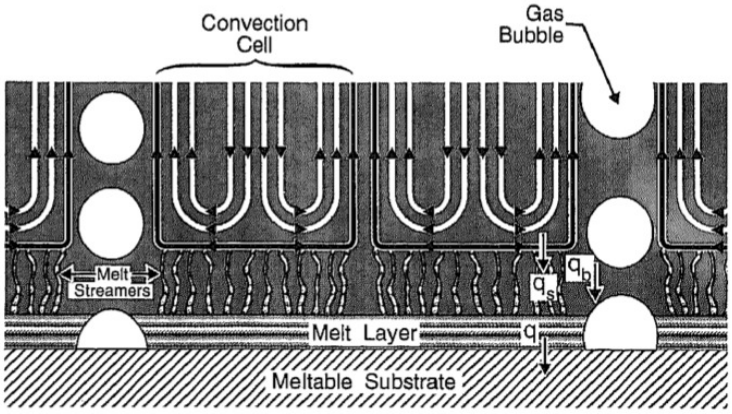


Fig. I.7: Représentation de l'interface entre le corium et le béton proposée par Epstein [53]

I.3.4 Discussion

Nous avons vu que de nombreux modèles d'échange de chaleur ont été proposés à l'échelle de description du code d'évaluation réacteur sur la base d'une structure a priori connue de la couche limite à l'échelle du front d'ablation (*e.g.* Fig.I.5,Fig.I.6,Fig.I.7). Ces modèles soulèvent de nombreuses questions tant d'un point de vue de la description adoptée de la couche limite que des aspects multi-échelle couplant les échanges au front d'ablation et l'écoulement dans le puits de cuve. Par ailleurs, même en admettant la validité des structures simples proposées, il reste à estimer quantitativement correctement les termes d'échanges.

Les nombreux travaux expérimentaux menés sur cette thématique en matériaux simulants ou prototypiques (*cf.* [94] pour une revue) sont à des échelles globales et les informations concernant la structure de la couche limite sont actuellement très limitées. En conséquence, il apparaît difficile de déterminer la pertinence des différents modèles proposés à partir d'une certaine représentation de la couche limite. Par ailleurs, ces modèles heuristiques ne sont pas construits sur la base d'un lien clair entre les différentes échelles de description. En particulier, l'échelle macroscopique est ignorée et l'impact des structures cohérentes convectives à l'échelle du puits de cuve n'est pas prise en compte alors que ces structures sont potentiellement à l'origine des profils de cavité ablatée (ablation préférentiellement radiale) observés dans certaines expériences citées plus haut. Cette question est actuellement ouverte et fait l'objet du programme expérimental CLARA visant à estimer la distribution du flux de chaleur le long des parois d'une cavité parallélépipédique remplie d'eau et chauffée en volume. Les parois sont des plaques poreuses percolées par du gaz pour reproduire le dégazage du béton et sont maintenues à une température uniforme. En revanche, les effets compositionnels (instabilités de Rayleigh-Taylor, zone pâteuse, ...) ne sont pas actuellement

pris en compte dans le dispositif. Enfin, la plupart des modèles proposés se concentrent sur une partie des phénomènes mis en jeu (bullage, effets compositionnels, ...) et la modélisation de la résultante des échanges est généralement réalisée de manière *ad-hoc* au travers de termes correctifs. Ces termes sont souvent mal justifiés ou difficiles à estimer et, en pratique, il est souvent difficile de réaliser des calculs prédictifs.

I.4 Stratégie de modélisation et description de l'étude

Devant les nombreuses questions posées par les modèles d'échange actuels, l'objectif principal de ce travail consiste à aborder le problème de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation par simulation numérique directe. L'intérêt d'une telle approche est double. Elle permet, d'une part, d'avoir accès à la structure de la couche limite difficilement observable par l'expérience et, ainsi, d'avoir une meilleure connaissance des mécanismes physiques à cette échelle et de mener une analyse critique des différents modèles proposés. Par ailleurs, ce type d'approche peut, à terme, être utilisé pour construire une solution approchée du problème à l'échelle de la couche limite et être couplé à des calculs à une échelle de description supérieure, intermédiaire entre l'échelle de la couche limite et l'échelle du code d'évaluation réacteur, pour estimer l'impact des structures convectives à l'échelle du puits de cuve sur la structure de la couche limite et sur la nature des échanges.

Dans cette partie, nous commençons par présenter le contexte général dans lequel s'inscrit ce travail qui correspond à une description et une modélisation multi-échelle des échanges. Nous discutons en particulier la problématique associée au changement d'échelle et précisons notre contribution, qui s'inscrit dans le cadre de la construction de lois de parois. Nous présentons ensuite l'approche par simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation en précisant les caractéristiques des écoulements étudiés dans ce travail et le choix d'une méthode. Enfin, nous terminons cette partie par une présentation du plan du mémoire.

I.4.1 Vers une description multi-échelle

Ce travail s'inscrit dans le cadre plus général d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges, c'est-à-dire de l'échelle locale jusqu'à l'échelle du code d'évaluation réacteur. On distingue ici les trois échelles caractéristiques suivantes (*cf.* Fig.I.8) :

1. L'échelle locale, dont la longueur caractéristique correspond typiquement à quelques diamètres de bulles de gaz de décomposition du béton, ou encore à la taille des plus gros tourbillons générés par les instabilités de Rayleigh-Taylor au voisinage du front d'ablation.
2. L'échelle macroscopique associée aux mouvement convectifs dans le bain de corium générés par les mouvements d'ensemble des bulles.
3. L'échelle du code d'évaluation réacteur associée à une description point ou à zones.

L'échelle locale correspond à l'échelle de description des outils de simulation numérique directe (SND) des écoulements à interfaces et fait l'objet de la section suivante. L'échelle macroscopique correspond, dans le cadre d'une description Euler-Euler (i.e description Eulérienne de la phase dite continue associée ici au corium et description également Eulérienne de la phase dispersée correspondant aux bulles de gaz de décomposition) à l'échelle de description des modèles macroscopiques de type bi-fluides obtenus par prise de moyenne (moyenne d'ensemble, spatiale, ...) des équations locales instantanées. L'outil existant développé dans le cadre de l'interaction corium-béton est le code TOPASE (TwO-PhAse flow SolvEr) et correspond à un modèle bi-fluides dans la limite des faibles accélérations relatives (i.e modèle à vitesse de dérive ou drift-flux). Quel que soit la modélisation macroscopique adoptée (i.e modèles bi-fluides ou à vitesse de dérive) et, de manière similaire à la description macroscopique des milieux poreux, l'écoulement diphasique est représenté à cette

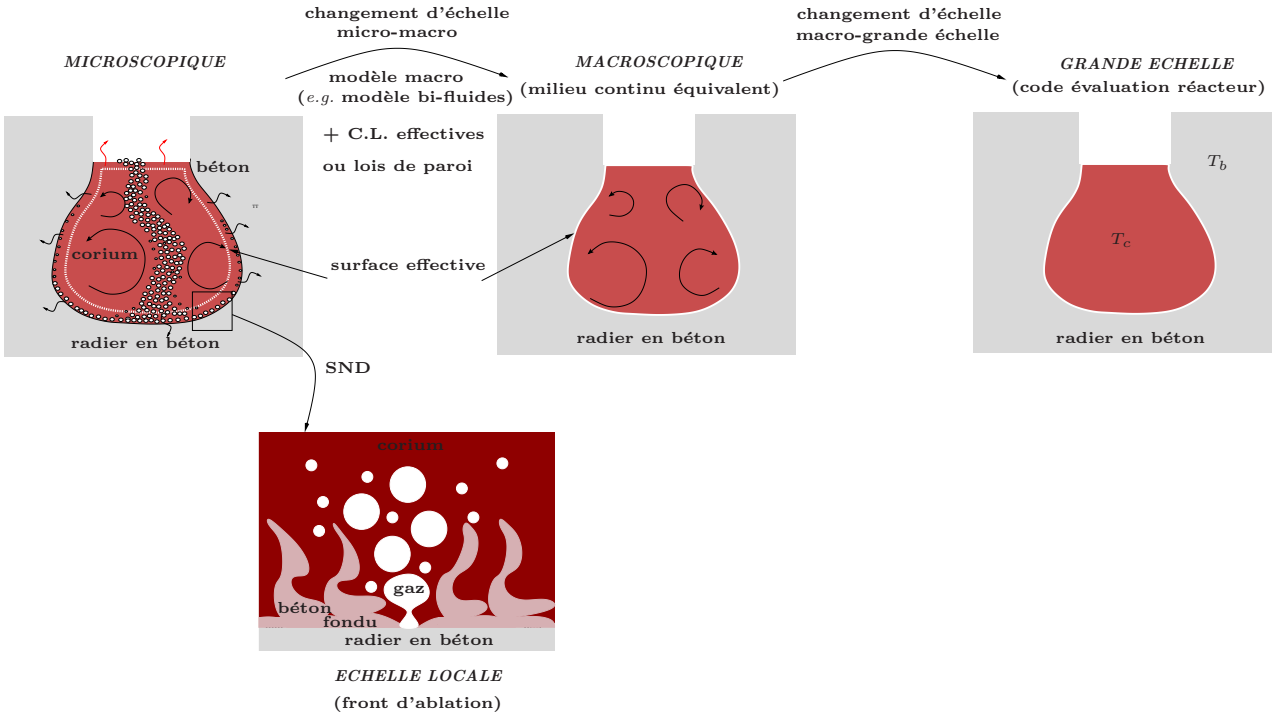


Fig. I.8: Une description multi-échelle des échanges pour la problématique de l'interaction corium-béton.

échelle par un milieu continu équivalent. Toute la difficulté est reportée dans la détermination des coefficients de transport effectifs (coefficient de traînée effectif, conductivité effective, ...). Enfin, l'échelle du code d'évaluation réacteur MEDICIS correspond à une description à grande échelle des échanges pour laquelle le mélange multiphasique dans le puits de cuve est décrit par une température point moyenne et les échanges avec le béton sont décrits au travers d'une résistance thermique équivalente intégrant l'ensemble des échanges aux échelles inférieures.

Une telle description multi-échelle soulève le problème du changement d'échelle et, en particulier, le passage de l'échelle locale à l'échelle de description macroscopique du code TOPASE. Les difficultés associées à ce changement d'échelle sont bien connues et peuvent être classées selon deux problématiques.

La première problématique concerne la fermeture des termes d'échange entre phases (force de traînée macroscopique, ...) et la modélisation de la turbulence diphasique ainsi que l'estimation des coefficients de transport effectifs correspondant aux différentes fermetures. Cette problématique a fait l'objet de nombreux travaux et continue d'être d'actualité ; on cite ici en particulier, toujours dans le cadre d'une description macroscopique de type Euler-Euler, les travaux de Simonin *& al.* [137] dans le contexte des écoulements diphasiques fluide-particules et les travaux de Magdeleine [111] pour le cas fluide-bulles sur l'utilisation de méthodes de simulation numérique directe pour l'estimation des coefficients de transport effectifs.

La deuxième problématique concerne, pour un modèle macroscopique d'écoulement donné, la construction de conditions aux limites effectives ou lois de parois. Cette problématique n'est pas spécifique aux écoulements diphasiques, elle est bien sûr commune aux problèmes faisant intervenir plusieurs échelles de description comme les problèmes de turbulence monophasique ou les problèmes d'écoulement sur des surface hétérogènes (e.g rugosités). Cette problématique a fait l'objet de nombreux travaux dans le cas des écoulements monophasiques turbulents sur surface lisse ou rugueuse et connaît plus récemment un regain d'attention d'un point de vue théorique

dans le cas des écoulements laminaires sur des surfaces hétérogènes. Le cas plus complexe des surfaces hétérogènes ablatables et/ou des écoulements à bulles a, en revanche, reçu beaucoup moins d'attention. Dans le cas monophasique, on peut néanmoins citer les travaux d'Aspa *& al.* (*e.g.* [8, 149]) sur l'étude et la construction de lois de parois pour des surfaces hétérogènes réactives lisses ou rugueuses. Dans le cas des écoulements diphasiques, on peut citer les travaux de [112, 143] pour des parois imperméables et pour des écoulements à faible taux de vide (i.e faiblement chargé en bulles) visant à montrer que les lois de parois monophasique pour la phase continue restent une bonne approximation ainsi que les travaux de Gabillet *& al.* [63] indiquant que, pour des parois percolées par un flux de gaz, les bulles formées en parois jouent le rôle de rugosité pour la loi de paroi associée à la phase continue.

Ce travail s'inscrit dans le cadre de la deuxième problématique associée à la construction de conditions aux limites effectives et comprend deux contributions suivant une approche commune de type décomposition de domaine.

La première contribution concerne la construction de lois de parois selon un modèle de surface effective ainsi qu'une étude sur la qualité de l'approximation proposée à partir de comparaisons entre calculs directs et calculs effectifs. Devant la complexité du problème posé, principalement les aspects diphasiques, on se propose ici d'aborder un problème plus simple d'écoulement laminaire de convection naturelle sur parois rugueuses. Le problème traité reste encore éloigné des applications visées et cette contribution doit être vue comme une première étape vers la construction de lois de parois pour un modèle macroscopique d'écoulement diphasique compositionnel. Signalons néanmoins que la méthodologie proposée dans ce travail pour un problème couplant l'écoulement au transport d'un scalaire non-passif peut servir de base pour l'étude des aspects hétérogènes associés aux différents types de béton constituant le radier des réacteurs actuels. On rappelle en effet que les hétérogénéités associées à la distribution des agrégats et du mortier sont susceptibles de jouer un rôle important sur la structure de la couche limite, par exemple pour les bétons siliceux caractérisés par des agrégats constitués majoritairement de silice à haut point de fusion comparativement au mortier. La méthodologie proposée peut également servir de base pour les études et les analyses de sûreté des réacteurs de nouvelle génération de type EPR ; on pense ici en particulier au système de refroidissement de la chambre d'étalement ainsi qu'au récupérateur qui correspond également à un matériau hétérogène mais sans dégagement de gaz de décomposition et dont le rôle principal est d'abaisser la viscosité du corium. Enfin, dans le cadre des études et des analyses de sûreté, d'autres problématiques sont concernées comme, par exemple, celle associée à la dispersion et la déposition de radio-éléments au voisinage d'un rejet accidentel sur la canopée urbaine ou végétale qui, dans ce cas, jouent le rôle d'hétérogénéités de surface. Nous avons indiqué précédemment que la problématique associée à la construction de conditions aux limites effectives connaissait un regain d'attention d'un point de vue théorique dans le cas des écoulements laminaires sur des surfaces hétérogènes. Plusieurs méthodes ont été proposées pour réaliser le changement d'échelle comme la méthode des moyennes volumiques (*e.g.* [127, 152]) ou la méthode des développements asymptotiques à deux échelles (*e.g.* [3, 11]). Dans ce travail, nous reprenons une approche proposée par Véran *& al.* [149] et les lois de parois sont développées dans le cadre d'une méthode de type décomposition de domaine.

Dans le cas plus complexe des écoulements multiphasiques, une telle approche ou, de manière plus générale, le développement de conditions effectives, nécessite, dans un premier temps, de disposer d'un outil de simulation directe à la petite échelle pour la construction d'une solution approchée à l'échelle de la couche limite. Ainsi, la deuxième contribution de ce travail concerne la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation et fait l'objet de la prochaine section. Signalons que des approches de même type ont été suivies pour d'autres applications multiphasiques. Nous citons ici, par exemple, les travaux de Lapuerta *& al.* (*e.g.* [25, 106]) toujours dans le cadre de la problématique de l'interaction

corium-béton mais dans le cas d'une configuration stratifiée pour les échanges oxyde-métal et les travaux d'Aspa [8] pour les problèmes d'ablation des matériaux composites constituant les lanceurs d'Ariane.

I.4.2 Simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation

Parmi les nombreux phénomènes potentiellement mis en jeu au voisinage du front d'ablation, nous avons vu précédemment que l'écoulement était caractérisé principalement par la présence d'une phase gazeuse associée aux gaz de décomposition du béton et d'une phase liquide constituée par le mélange issu de la fusion du coeur, le corium, et les produits issus de l'ablation du béton. Dans ce travail, nous ne décrirons pas les nombreux phénomènes d'oxydation mettant en jeu les différentes espèces gazeuses et nous assimilerons les gaz de décomposition à une seule et même phase gazeuse. Nous adopterons également une description classique de la phase liquide consistant à décrire le mélange multiphasique multiconstituant corium-béton selon un pseudo-binaire. Dans ce cadre, une simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation doit a minima être capable de décrire les écoulements présentant les caractéristiques suivantes :

- présence de deux phases non-miscibles : liquide et gaz,
- phase liquide constituée de deux espèces totalement miscibles : pseudo-binaire corium-béton,
- forts changements topologiques : détachement, rupture et coalescence de bulles, instabilités de Rayleigh-Taylor (miscibles),
- forts contrastes de propriétés physiques : densité, viscosité, ...
- faibles coefficients de diffusion massique et thermique,
- géométrie 3D.

Nous adopterons en outre les deux hypothèses simplificatrices suivantes :

- incompressibilité de chaque phase ou fluide,
- tensions de surface associées aux couples gaz-corium et gaz-béton fondu identiques.

La première hypothèse consiste à négliger les effets de compressibilité associées à la phase gazeuse et à négliger les variations de masse volumique des espèces corium et béton fondu en fonction de la température. Nous ne sommes pas en mesure de justifier pleinement cette hypothèse sur la base de considérations physiques et cette approximation est essentiellement motivée par les simplifications apportées dans la construction et la résolution numérique de l'outil de simulation. La deuxième hypothèse apporte également des simplifications importantes puisque, d'un point de vue des effets de tension de surface, l'écoulement est essentiellement diphasique. Il faut néanmoins souligner que cette hypothèse n'est pas restrictive pour les applications visées devant les incertitudes associées à l'estimation des tensions de surface du mélange corium-béton fondu. Enfin, nous décrirons dans ce travail les effets associés à la présence de zones pâteuses dans la phase liquide au travers d'une viscosité effective.

Ainsi, d'un point de vue de la simulation numérique directe des problèmes à interfaces, il s'agit ici de construire un outil couplant un problème diphasique incompressible sans changement de phase à un problème de mélange de deux fluides miscibles dans l'une des deux phases.

De nombreuses méthodes ont été proposées pour la simulation numérique directe d'écoulements diphasiques incompressibles. On distingue essentiellement trois types de méthodes :

1. Les méthodes à maillage mobile, pour lesquelles le maillage s'adapte à la topologie des interfaces et les conditions de saut sont imposées de manière exacte, comme par exemple la méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian).
2. Les méthodes à maillage mixte ou méthodes de type Front-Tracking (*e.g.* [145, 146]) pour lesquelles un maillage surfacique décrivant la topologie des interfaces est advecté sur un maillage volumique fixe.

3. Les méthodes à maillage fixe pour lesquelles les interfaces sont repérées et décrites au travers d'une indicatrice de phase plus ou moins régulière selon les méthodes. Dans ce cas, on distingue, d'une part, les méthodes avec reconstruction des interfaces comme la méthode VOF (*e.g.* [20, 81]) et, d'autre part, les méthodes sans reconstruction comme les méthodes de lignes de niveaux (Level-Set) (*e.g.* [64, 140]) et les méthodes d'interface diffuse, encore appelées méthodes de champ de phase (Phase-Field) (*e.g.* [5]).

Il n'est pas dans l'objectif de ce travail de présenter une revue exhaustive et une discussion des différentes méthodes proposées. Le lecteur intéressé pourra se reporter aux références citées ainsi qu'à Jamet [87] et Kim et Lowengrub [101] pour une présentation et une discussion sur les avantages et les points faibles des différentes méthodes. Il est néanmoins important de noter que, en pratique, ces méthodes ne sont généralement pas des méthodes de simulation numérique directe au sens strict du terme. En effet, si les interfaces sont résolues, en revanche, les échelles des phases sont généralement sous résolues et ces méthodes doivent plutôt être vues comme des méthodes de type LES (Large Eddy Simulation). Nous n'aborderons pas dans ce travail la modélisation des contributions non-résolues, ou contributions sous maille, qui fait également débat en turbulence monophasique selon si ces contributions sont résolues de manière dite explicite ou implicite. Nous renvoyons le lecteur intéressé aux travaux de Jamet *& al.* [89] pour une approche de type explicite pour la simulation directe d'écoulements à bulles et, en s'appuyant sur les travaux proposés par Guermond [73, 76] dans le cas monophasique, nous assimilerons dans ce travail le schéma numérique proposé à une approche de type implicite.

Nous nous sommes dans ce travail plus particulièrement intéressés aux méthodes à interface diffuse qui, de notre point de vue, offrent un cadre bien adapté pour des extensions multiphasiques et/ou multiconstituants. Le principe général des méthodes Phase-Field dans le cas diphasique consiste à décrire l'évolution du système à partir d'une énergie libre comprenant deux contributions distinctes fonction d'une indicatrice de phase régularisée, appelée également champ de phase ou paramètre d'ordre. La première contribution est un terme non-convexe présentant une structure en double puits et modélisant la séparation de phases. La deuxième contribution est un terme capillaire dépendant du gradient du paramètre d'ordre jouant à l'inverse un rôle de diffusion et de régularisation. La résultante de ces deux contributions conduit à une description des interfaces comme des zones de transition volumique d'épaisseur finie et la contribution capillaire associe une force volumique aux effets de tension de surface. Pour des écoulements diphasiques sans changement de phase, le paramètre d'ordre est souvent associé à la fraction volumique ou la fraction massique de l'une des deux phases et l'équation d'évolution associée est l'équation de Cahn-Hilliard caractérisée par un terme en bi-laplacien. Pour des problèmes avec changement de phase, le paramètre d'ordre n'a généralement pas de réelle signification physique et l'équation d'évolution associée est l'équation d'Allen-Cahn caractérisée par un terme en laplacien. De nombreuses extensions multiphasiques et/ou multiconstituants ont été proposées et nous citons ici à titre d'exemple les travaux de Lapuerta *& al.* (*e.g.* [25, 106]) pour une extension dans le cas de trois phases non-miscibles et les travaux de Kessler [98] et Kim [99] pour des extensions multiconstituants dans le cas diphasique avec ou sans changement de phase. Nous rappelons qu'il s'agit ici de construire un outil de simulation numérique directe pour des écoulements diphasiques sans changement de phase dont l'une des deux phases est constituée de deux espèces totalement miscibles. Si de nombreuses extensions multiphasiques et/ou multiconstituants ont été proposées, il n'existe pas à notre connaissance de modèles pour de tels écoulements diphasiques compositionnels. On peut néanmoins citer les travaux de Kim [99] et Park *& al.* [121] pour des mélanges partiellement ou totalement miscibles où le terme en bi-laplacien de l'équation de Cahn-Hilliard est assimilé à un terme de diffusion.

Dans ce contexte, on propose dans ce travail un modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel construit sur la base d'une description du système selon trois paramètres d'ordre associés respectivement au gaz, au corium et au béton fondu.

I.5 Objectifs de l'étude

L'objectif de ce travail est d'apporter une contribution à la modélisation des échanges de masse et de chaleur dans le cadre de la problématique de l'interaction corium-béton. Nous avons indiqué précédemment que ce travail s'inscrivait dans le cadre plus général d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges afin de contribuer à l'analyse et l'interprétation des programmes expérimentaux menées sur cette problématique et, à terme, de proposer des modèles d'échanges pour les codes d'évaluation réacteur. Après avoir présenté les différentes échelles de description considérées et les outils de simulation existants, nous avons également précisé les deux contributions spécifiques de ce travail. La première est associée au problème du changement d'échelle et concerne la construction de conditions aux limites effectives. La deuxième est associée au problème de la description locale et concerne la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation.

Ainsi, nous abordons dans le chapitre (II) le problème de la construction de conditions aux limites effectives. Devant la complexité du problème posé à l'échelle du front d'ablation, ces lois sont construites pour un écoulement laminaire anisotherme sur parois rugueuses et testées numériquement pour un problème de convection naturelle dans une cavité rugueuse différentiellement chauffée. Si cette contribution doit être vue comme une première étape pour les applications multiphasiques visées, l'intérêt du problème considéré est double. Les aspects turbulents et multiphasiques étant absents, ce problème présente, d'une part, l'intérêt d'isoler du problème du changement d'échelle la construction de conditions aux limites effectives et d'estimer numériquement la qualité de l'approximation proposée par comparaison avec des calculs directs. D'autre part, nous avons également indiqué que ce problème couplant l'écoulement au transport d'une grandeur non-passive correspondant ici à la température pouvait être vu comme un problème modèle pour la modélisation des aspects hétérogènes des bétons pour les réacteurs actuels (REP) et les réacteurs de nouvelle génération de type EPR. Dans ce travail, les lois de parois sont développées dans le cadre d'une méthode de type décomposition de domaine [149] consistant à découper le domaine de calcul en un premier sous-domaine au sein duquel les échelles caractéristiques de variation correspondent à la dimension caractéristique du domaine d'intérêt et un deuxième sous-domaine contenant les variations spatiales de l'ordre de la dimension des rugosités. Cette décomposition à deux échelles du domaine, similaire à une décomposition en variables lentes et rapides proposée par exemple par Achdou *& al.* [3] dans le cadre d'une méthode d'homogénéisation, conduit naturellement à deux systèmes d'EDPs macro-micro couplés par des conditions de transmission de type Dirichlet-Neumann. Des conditions aux limites dites effectives, c'est-à-dire pour les variables macroscopiques du premier sous-domaine, à l'interface de couplage sont alors construites en s'inspirant de méthodes développées pour le changement d'échelle en milieu poreux [127]. Elles sont obtenues sur la base d'estimateurs des champs de vitesse, de pression et de température dans le deuxième sous-domaine s'appuyant sur la résolution de problèmes de fermeture locaux sur un motif représentatif des rugosités. Ces lois sont testées numériquement par comparaison avec des calculs directs tenant compte des rugosités et une étude est menée sur le problème générique important du positionnement de la surface effective.

Dans le cas plus complexe des écoulements multiphasiques, nous avons indiqué que le développement de conditions effectives nécessitait au préalable de disposer d'un outil de simulation directe à la petite échelle. La construction d'un outil de simulation numérique directe d'écoulements diphasiques incompressibles sans changement de phase dont l'une des deux phases est constituée de deux espèces totalement miscibles fait l'objet du chapitre (III). On propose un modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel s'appuyant d'une part sur une description du système selon trois paramètres d'ordre associées respectivement aux fractions volumiques du gaz et aux deux espèces miscibles de la phase liquide et d'autre part, sur une décomposition de l'énergie libre selon une contribution diphasique et une contribution compositionnelle. Les équations de transport du

modèle sont obtenues dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles selon deux contraintes pour la vitesse du mélange. La première contrainte est associée à la partie purement compositionnelle et correspond à une définition barycentrique classique de la vitesse du mélange pondérée par les masses volumiques. La deuxième contrainte est associée à la partie purement diphasique et correspond à une moyenne volumique permettant dans ce cas de conserver une vitesse de mélange à divergence nulle comme les autres méthodes de simulation numérique directe (*e.g.* VOF [20, 81] , Level-Set [64, 140], Front-Tracking [145, 146]). Sur la base de travaux existants proposés pour un modèle de trois phases non-miscibles (*e.g.* [25, 26, 106]), le modèle est discrétisé en temps selon une méthode à pas fractionnaire découplant les équations de Cahn-Hilliard, de Navier-Stokes et d'énergie et la discrétisation en espace correspond à une méthode d'éléments finis. Plusieurs expériences numériques sont proposées illustrant la validité et les potentialités de la méthode et une approche originale est proposée pour le traitement des conditions aux limites artificielles de sortie.

Enfin, nous abordons dans le chapitre (IV) le problème de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation par simulation numérique directe du problème diphasique compositionnel au voisinage du front d'ablation. Nous considérons dans un premier temps des écoulements purement compositionnels et couplons l'outil de simulation développé dans le chapitre (III) à une méthode ALE pour décrire le déplacement du front d'ablation. Une étude est menée sur le choix et l'influence de la viscosité du mélange ainsi que sur la prise en compte de zones pâteuses selon une viscosité effective. On considère pour cette étude deux bétons mis en oeuvre dans les expériences VULCANO (*e.g.* [31]) de type siliceux et silico-calcaire pour lesquels la fraction volumique solide a été tabulée en fonction de la température et de la composition du mélange. Nous présentons enfin des premiers résultats dans le cas diphasique compositionnel ainsi qu'une discussion préliminaire sur la structure de la couche limite des configurations étudiées.

Chapter II

Modèles de surfaces effectives pour des écoulements laminaires anisothermes sur parois rugueuses

II.1 Introduction

Nous avons vu dans le chapitre d'introduction générale qu'une modélisation macroscopique des problèmes mettant en jeu plusieurs échelles de description soulevait le problème du changement d'échelle. Nous avons en particulier indiqué que, pour un modèle macroscopique donné, les difficultés concernaient non seulement l'estimation des coefficients de transport effectifs du modèle mais également la construction de conditions aux limites effectives ou lois de parois. Ces difficultés sont bien connues et ont fait l'objet de nombreux travaux, en particulier pour les modélisations de type RANS des problèmes d'écoulements turbulents sur surface lisse ou rugueuse. La construction de conditions aux limites effectives a connu plus récemment un regain d'intérêt d'un point de vue théorique dans le cas des écoulements laminaires sur surfaces rugueuses ou des milieux poreux.

Dans ce chapitre, nous développons des conditions aux limites effectives pour des écoulements laminaires avec transfert de chaleur sur parois rugueuses dans le cadre d'une approximation de Boussinesq. Nous rappelons que si, pour les applications multiphasiques visées, cette contribution doit être vue comme une première étape, le problème considéré couplant l'écoulement au transport d'une grandeur non-passive correspondant ici à la température constitue néanmoins un problème modèle pour l'étude et la modélisation des aspects hétérogènes des bétons des réacteurs actuels et de nouvelle génération de type EPR (European Pressure Reactor). Par exemple, pour les bétons siliceux caractérisés par des agrégats constitués majoritairement de silice à haut point de fusion comparativement au mortier, les développements proposés peuvent servir de base pour la construction de conditions effectives mettant en jeu une température de fusion effective fonction de la distribution des agrégats et de la structure des rugosités au front d'ablation.

Les conditions aux limites effectives sont développées dans le cadre d'une méthode de type décomposition de domaine. Nous nous appuyons ici sur les développements proposés par Véran *& al.* [149] en explicitant de manière détaillée les différentes étapes du changement d'échelle et en soulignant également les liens avec les méthodes de changement d'échelle s'appuyant soit sur des techniques de développements asymptotiques soit sur des modélisations dites mésoscopiques. Les conditions effectives sont ensuite testées sur un problème de convection naturelle dans une cavité rugueuse différentiellement chauffée. La qualité de l'approximation proposée est estimée en comparant, pour différents nombre de Rayleigh, les calculs effectifs à des calculs directs tenant compte des rugosités et une étude est menée sur le problème générique du positionnement de la surface effective, problème souvent occulté dans les travaux antérieurs.

Ces travaux ont fait l'objet d'un article soumis à une revue à comité de lecture [84] reproduit dans la section suivante.

II.2 Article : Effective surface modeling for momentum and heat transfers over rough surfaces : application to a natural convection problem

Clément Introïni [a,b], Michel Quintard [b,c], Fabien Duval [a]

International Journal of Heat and Mass Transfer

[a] *Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire (IRSN),*
Direction de Prévention de Accidents Majeurs, BP3-13115 Saint-Paul-lez-Durance Cedex
[b] *Université de Toulouse ; INPT, UPS ; IMFT, Toulouse, 1 Allée du Pr C. Soula,*
31400 Toulouse, France
[c] *CNRS ; IMFT -F31400*

Abstract : In this paper, we propose efficient and suitable effective surface models for steady laminar flows with heat transfer over rough surfaces. These models are developed in the frame of a domain decomposition method and consist in replacing the rough boundaries by effective smooth surfaces on which effective boundary conditions or wall laws are prescribed. The associated effective properties, namely the effective friction and heat transfer coefficients, are determined by the resolution of local *closure problems* over a representative pattern of the roughnesses. The impact of the flow parameters on these effective coefficients is analyzed, which allows to obtain useful estimates in some specific cases. Finally, numerical experiments are performed for a natural convection problem in a stamp shaped cavity to assess the validity of the proposed effective surface models. Throughout these tests, we also study numerically the impact of the position of the effective surface on momentum and heat transfers.

Keywords : domain decomposition method, rough surfaces, effective boundary conditions, closure problems, laminar natural convection flow

Nomenclature

Greek symbols

β thermal expansion coefficient (K^{-1})

δ effective surface position (m)

δ_0 fictitious surface position (m)

ϵ $= \ell/L$ small parameter in asymptotic expansions (dimensionless)

Γ_{0i} restriction of Γ_0 in Ω_i (dimensionless)

Γ_0 fictitious surface (dimensionless)

Γ_δ effective surface (dimensionless)

Γ_{per} periodic surface (dimensionless)

Γ_s side surface (dimensionless)

Γ_{up} upper surface (dimensionless)

Γ_w rough surface (dimensionless)

κ thermal diffusivity ($m^2.s^{-1}$)

μ dynamic viscosity (Pa.s)

Ω global domain (dimensionless)

Ω_1 sub-domain associated with the length scale L (dimensionless)

Ω_2 sub-domain associated with the length scale ℓ (dimensionless)

Ω_δ effective domain (dimensionless)

Ω_i pseudo-periodic unit cell (dimensionless)

ρ density ($kg.m^{-3}$)

τ_ℓ $= \mathrm{Re}_\ell \mu^2/\rho\ell^2$ imposed shear stress (s^{-1})

Roman symbols

$< \mathrm{Nu} >$ averaged Nusselt number (dimensionless)

$< \mathrm{Nu}_\delta >$ averaged Nusselt number in the effective case (dimensionless)

$< \mathrm{Nu}_r >$ averaged Nusselt number in the rough case (dimensionless)

$< \mathrm{Nu}_s >$ averaged Nusselt number in the smooth case (dimensionless)

$\mathbf{A}$ closure variable for the velocity (dimensionless)

$\mathbf{a}$ closure variable for the pressure (Pa.s.m^{-1})

$\mathbf{B}$ closure variable for the velocity (m)

$\mathbf{b}$ closure variable for the pressure (Pa.s)

ΔT_ℓ micro-scale temperature difference (K)

ΔT_L macro-scale temperature difference (K)

ℓ micro-scale length (m)

$\mathbf{n}$ exterior normal to Γ_w (dimensionless)

$\mathbf{n}_0$ exterior normal to Γ_0 (dimensionless)

Pe_ℓ $= U\ell/\kappa$ micro-scale Péclet number (dimensionless)

Pe_L $= UL/\kappa$ macro-scale Péclet number (dimensionless)

Pr micro-scale Péclet number (dimensionless)

Ra_ℓ $= \mathrm{Pr}\,\rho^2\beta\Delta T_\ell g\ell^3/\mu^2$ micro-scale Rayleigh number (dimensionless)

Ra_L $= \mathrm{Pr}\,\rho^2\beta\Delta T_L g L^3/\mu^2$ macro-scale Rayleigh number (dimensionless)

Re_ℓ $= \epsilon\rho U\ell/\mu$ micro-scale Reynolds number (dimensionless)

Re_L $= \rho UL/\mu$ macro-scale Reynolds number (dimensionless)

$\tilde{\mathbf{u}}_2$ spatial deviation velocity (m.s^{-1})

$\tilde{p}_2$ spatial deviation pressure (Pa)

$\tilde{T}_2$ spatial deviation temperature (K)

$\mathbf{u}$ velocity defined in Ω (m.s^{-1})

$\mathbf{u}_{1,0}$ spatial restriction of velocity on Γ_0 (m.s^{-1})

$\mathbf{u}_{1,2}$ macro-scale velocity defined in Ω_2 (m.s^{-1})

c closure variable for the temperature (dimensionless)

$C_{f,\delta}$ effective friction coefficient defined on Γ_δ (Pa.s.m^{-1})

C_f effective friction coefficient defined on Γ_0 (Pa.s.m^{-1})

d closure variable for the temperature (m)

g acceleration due to gravity (m.s^{-2})

h effective heat transfer coefficient defined on Γ_0 (m.s^{-1})

h_δ effective heat transfer coefficient defined on Γ_δ (m.s^{-1})

L macro-scale length (m)

p pressure defined in Ω (Pa)

$p_{1,0}$ spatial restriction of pressure on Γ_0 (Pa)

$p_{1,2}$ macro-scale pressure defined in Ω_2 (Pa)

T temperature defined in Ω (K)

$T_{1,0}$ spatial restriction of temperature on Γ_0 (K)

$T_{1,2}$ macro-scale temperature defined in Ω_2 (K)

T_r reference temperature defined in Ω (K)

T_w temperature defined on Γ_w (K)

U magnitude of the macro-scale velocity ($\mathrm{m.s}^{-1}$)

x abscissa (m)

y ordinate (m)

II.2.1 Introduction

Fluid flow with heat and mass transfer over rough surfaces appears in a large number of situations of practical interest including geophysical applications to study, for instance, ocean-ice exchanges, design of heat-exchangers or, in the aerospace context, the design of thermal barriers in reentry vehicle configurations. Transport phenomena over rough surfaces also take an important place in nuclear safety studies. As a first example, in the case of an accidental release of radioactive wastes, there is a strong interest to predict the dispersion of the radioactive elements in the near field release region (*e.g.* [123]). In this situation, the roughnesses that correspond to both the vegetal and the urban canopies remain much smaller than the near field region dimensions but play an important role in the dispersion and the deposition process and, therefore, in the source term evaluation. In the context of severe accident conditions, another situation of interest concerns the issue of molten core and concrete interaction where a molten mixture of core and vessel structures comes to interact with the concrete basement of the nuclear plant (*e.g.* [82, 94]). During the concrete ablation process, roughnesses appear both at small scales due to concrete heterogeneities (mortar, silica aggregates, ...) and at intermediate scales due to vigorous mixing (bubbling, compositional convection). Here again, the roughnesses remain smaller than the domain of interest which corresponds here to the reactor pit but are likely to alter the heat fluxes along the cavity shape and then the melting-throw time.

To tackle numerically these kinds of problems, two approaches are traditionally followed depending on the order of magnitude of the characteristic length scale ℓ of the roughness compared to the macro-scale dimension L of the domain of interest. On the one hand, when the two characteristic length scales have the same order of magnitude, it is still possible to describe the complicated roughness geometry since Direct Numerical Simulations (DNSs) remain tractable. On the other hand, when $\ell \ll L$, DNSs become too expensive and cannot be achieved anymore for practical applications, especially for three-dimensional applications. In this case, the problem is characterized by two separated scales ℓ and L which are referred to as the micro- and the macro-scale respectively. Then, the traditional way of solving these problems consists in describing the micro-scale average behavior by means of effective surface models, which replace the heterogeneous boundary by a smooth surface on which effective conditions or wall laws are prescribed. While such wall laws

have been the subject of numerous studies in the case of turbulent flow over rough surfaces, the building of these laws in the case of laminar flow has received more recently a regain of attention from a theoretical point of view. A large number of studies have been devoted to the derivation of effective boundary conditions for laminar flows over rough surfaces using homogenization methodology (*e.g.* [3, 12, 114]). The obtained wall law, for the momentum equation, takes the form of a Navier boundary condition that relates the macro-scale tangential velocity to the macro-scale shear rate through an effective friction coefficient, which has to be determined by solving a local boundary value problem. In microfluidics, the derivation of effective conditions has also been the subject of numerous studies for laminar flows over rough and hydrophobic surfaces (*e.g.* [124]). In such applications involving nano-scales geometries, the corresponding effective conditions are referred to as the effective stick-slip boundary condition. This latter example, however, may be considered as slightly different of the exposed problem since an additional length-scale may play an important role, namely, the particle mean free path. For flows over porous media, which present some similarities with the rough surface case, the development of effective boundary conditions has also been revisited since the semi-empirical relation of Beavers and Joseph [14] through different up-scaling methods such as the volume averaging approach [70], matched asymptotic expansions [37] and multi-scale asymptotics [9, 86] to cite among others.

In the present paper, we are interested in building effective boundary conditions for steady laminar flows with heat transfer by a domain decomposition method. As this study constitutes a first step towards more complicated problems such as those listed above for nuclear safety study analysis, this relatively simplified problem constitutes a model problem coupling flow with the transport of a non-passive scalar. Such a problem has received considerable attention (*e.g.* [4, 90, 153]) to investigate the impact of roughnesses on heat transfer. It has been emphasized that the presence of roughnesses leads to an enhancement of the total heat transfer rate, which is influenced by different parameters such as, for example, the wavelength and the amplitude of the roughnesses.

To be specific about the problem under consideration, we focus in this work on steady laminar natural convection flows over rough surfaces in the frame of the Boussinesq approximation and we refer to the Fig.III.1 in which we have shown the geometrical features of the domain Ω with rough boundary Γ_w. The boundary value problem used to describe momentum and heat transfer is given by

$$\begin{aligned}
\rho\left(\mathbf{u}\cdot\nabla\right)\mathbf{u}+\nabla p &= \mu\nabla^2\mathbf{u}-\rho\beta(T-T_r)\mathbf{g} \quad \text{in } \Omega && \text{(II.1a)}\\
\nabla\cdot\mathbf{u} &= 0 \quad \text{in } \Omega && \text{(II.1b)}\\
\mathbf{u}\cdot\nabla T &= \kappa\nabla^2 T \quad \text{in } \Omega && \text{(II.1c)}\\
\mathbf{u} &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.1d)}\\
\text{(BC1)}\quad T &= T_w \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.1e)}\\
\text{(BC2)}\quad \mathbf{n}\cdot\nabla T &= 0 \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.1f)}
\end{aligned}$$

where p is the deviation from the hydrostatic pressure, μ is the dynamic viscosity, β the thermal expansion coefficient, κ the thermal diffusivity and T_r denotes some reference temperature.

Regarding the boundary conditions imposed on the rough surface Γ_w, no-slip condition is prescribed for the momentum transfer problem while, for the heat transfer problem, either an imposed temperature condition (BC1) or a Neumann homogeneous condition (BC2) is prescribed.

In order to characterize the natural convection flow in Ω, we introduce the macro-scale Rayleigh number Ra_L defined by

$$\mathrm{Ra}_L = \mathrm{Pr}\,\frac{\rho^2\beta\Delta T_L g L^3}{\mu^2} \tag{II.2}$$

where ΔT_L denotes some macro-scale temperature difference. In the same way, the macro-scale

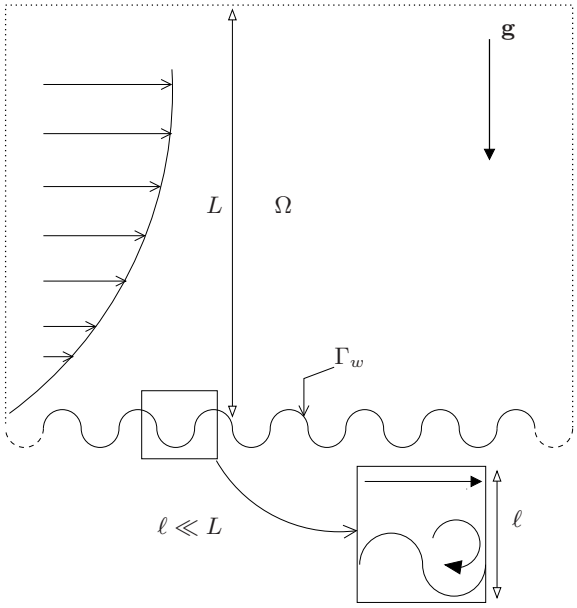


Figure II.1: Schematic representation of an incompressible laminar over a rough surface Γ_w

Reynolds number Re_L and the macro-scale Péclet number Pe_L are introduced in order to characterize respectively flow and heat transfer at the L-scale. They are defined by

$$\mathrm{Re}_L = \frac{\rho U L}{\mu} \quad ; \quad \mathrm{Pe}_L = \frac{U L}{\kappa} \tag{II.3}$$

where U denotes the magnitude of the macro-scale velocity. In this study, the micro-scale fluctuations of the temperature and velocity fields due to the presence of heterogeneities are assumed to vanish far enough above the rough surface Γ_w. Under these circumstances, a multi-domain decomposition approach can be followed to build an approximate solution that results in effective boundary conditions prescribed on a smooth effective surface. Firstly introduced by Achdou *& al.* [2] for momentum transfer problem, the concept of domain decomposition has been recently used by Veran *& al.* [149] for a problem of laminar flow over rough reactive walls. Here, such a concept is extended for both momentum and heat transfer problems. The principle of this multi-domain decomposition approach is the object of the first part, section (II.2.2), and then effective boundary conditions are built for both the momentum and heat transfer problems in section (II.3). Throughout the developments, the roughnesses are assumed to be small compared to the viscous and the thermal boundary layers. This constitutes one of the main assumptions for the validity of the proposed approach allowing to disregard non-local effects for the building of effective conditions (i.e., effective conditions at a given point that would depend on the entire L-scale fields, and not only on the local ones). Finally, in section (II.3.3), numerical experiments are performed for a natural convection problem in a rough or stamp shaped cavity to assess the validity of the proposed approach. Both DNSs and effective calculations are carried out for macro-scale Rayleigh number Ra_L ranging from 10^3 to 10^8. We show in particular that the average behavior of the rough surface is correctly described by the effective conditions for $\mathrm{Ra}_L \leq 10^7$ whereas our approach fails for larger values, i.e., $\mathrm{Ra}_L = 10^8$. In this last section, we also discuss the important question of the position of the effective surface. Interestingly for practical purposes, we will see that the optimal position is given by the effective length at which the momentum effective condition degenerates into a no-slip boundary condition.

II.2.2 Domain decomposition method

In the system illustrated in Fig.III.2, the initial domain Ω is limited by an upper surface Γ_{up} and by side surfaces Γ_s. The foregoing developments do not depend on the boundary conditions prescribed on these surfaces. Therefore, they will only be introduced later on the numerical experiments. As

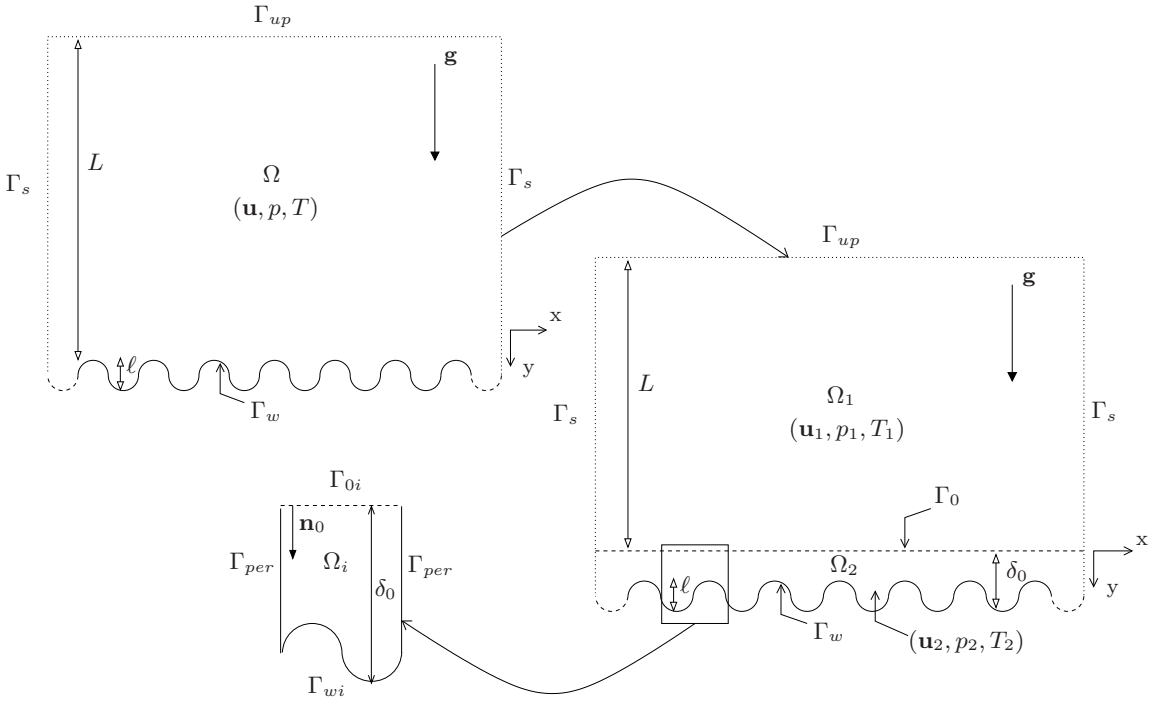


Figure II.2: Schematic domain decomposition principle. First, the initial domain Ω is divided into two sub-domains Ω_1 and Ω_2. Second, the study at the ℓ-scale is limited to a pseudo-periodic unit cell Ω_i.

previously mentioned, the presence of roughnesses leads to consider two characteristic length scales, ℓ and L, respectively associated with the fluctuating micro-scale behavior near roughnesses and the macro-scale smooth behavior sufficiently far from the rough boundary. Such a two-scale distinction suggests naturally to split the domain Ω in two sub-domains as shown in Fig.III.2. On the one hand, we define a sub-domain Ω_1 (with $\star_1$ quantities), in which the velocity and temperature fields undergo significant variations over the large characteristic length scale L. On the other hand, we define a sub-domain Ω_2 (with $\star_2$ quantities,) in which the rough surface is contained and the fields vary significantly with the ℓ-scale. According to this domain decomposition and on the basis of (II.1), one can write two boundary value problems as

- **Problem I** (in Ω_1)

$$\rho\left(\mathbf{u}_1 \cdot \nabla\right)\mathbf{u}_1 + \nabla p_1 = \mu\nabla^2\mathbf{u}_1 - \rho\beta(T_1 - T_r)\mathbf{g} \quad \text{in } \Omega_1 \tag{II.4a}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}_1 = 0 \quad \text{in } \Omega_1 \tag{II.4b}$$

$$\mathbf{u}_1 \cdot \nabla T_1 = \kappa\nabla^2 T_1 \quad \text{in } \Omega_1 \tag{II.4c}$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathcal{F}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_{up} \tag{II.4d}$$

$$\mathbf{u}_1 = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_1 \tag{II.4e}$$

- **Problem II** (in Ω_2)

$$\begin{aligned}
\rho\left(\mathbf{u}_2\cdot\nabla\right)\mathbf{u}_2+\nabla p_2 &= \mu\nabla^2\mathbf{u}_2-\rho\beta(T_2-T_r)\mathbf{g} \quad \text{in } \Omega_2 && \text{(II.5a)}\\
\nabla\cdot\mathbf{u}_2 &= 0 \quad \text{in } \Omega_2 && \text{(II.5b)}\\
\mathbf{u}_2 &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.5c)}\\
\mathbf{u}_2\cdot\nabla T_2 &= \kappa\nabla^2 T_2 \quad \text{in } \Omega_2 && \text{(II.5d)}\\
\text{(BC1)}\quad T_2 &= T_w \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.5e)}\\
\text{(BC2)}\quad \mathbf{n}\cdot\nabla T_2 &= 0 \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.5f)}\\
\mathbf{u}_2 &= \mathcal{G}\left(x,y\right) \quad \text{on } \Gamma_s\setminus\Omega_2 && \text{(II.5g)}\\
T_2 &= \mathcal{H}\left(x,y\right) \quad \text{on } \Gamma_s\setminus\Omega_2 && \text{(II.5h)}
\end{aligned}$$

These two boundary value problems are coupled through a fictitious surface Γ_0 located at a distance δ_0 from Γ_w (*cf.* Fig.III.2). As pointed out by Veran & *al.* [149], the position of Γ_0 is somewhat arbitrary even if upper and lower bounds can be exhibited according to the micro- macro-scale decomposition. Indeed, on the one hand, this surface must be located sufficiently high above Γ_w so that all perturbations caused by the roughnesses are contained in Ω_2. On the other hand, as stated in the introduction, our objective is to build effective conditions prescribed on Γ_0 that approximate the average behavior of the micro-scale region. Hence, there certainly exists an upper bound in order for the approximate solution to be valid. We will discuss this point throughout the development of effective conditions.

As Γ_0 is not defined by any identified physical phenomenon and corresponds only to a coupling surface, the following transmission boundary conditions apply

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_1 &= \mathbf{u}_2 \quad \text{on } \Gamma_0 && \text{(II.6a)}\\
\mathbf{n}_0\cdot\left(-p_1\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{u}_1\right) &= \mathbf{n}_0\cdot\left(-p_2\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{u}_2\right) \quad \text{on } \Gamma_0 && \text{(II.6b)}\\
T_1 &= T_2 \quad \text{on } \Gamma_0 && \text{(II.6c)}\\
\mathbf{n}_0\cdot\left(-\kappa\nabla T_1\right) &= \mathbf{n}_0\cdot\left(-\kappa\nabla T_2\right) \quad \text{on } \Gamma_0 && \text{(II.6d)}
\end{aligned}$$

where $\mathbf{n}_0$ represents the unit normal directed from Γ_0 towards Γ_w. As in the frame of domain decomposition methods [126], the relationships (II.6) are referred to as a Dirichlet-to-Neumann operator. Since in Ω_1 the variables are slowly varying and in Ω_2 they are rapidly varying, this Dirichlet-to-Neumann operator may also be seen as matching conditions in the frame of the method of matched asymptotic expansions where Ω_1 and Ω_2 play the role of the inner and the outer regions [38, 37].

As stated in the introduction, rather than tackle numerically this problem following the procedure employed by domain decomposition methods (*e.g.* [126]), our objective is to build an approximation of the Dirichlet-to-Neumann operator defined by (II.6) through effective boundary conditions. This approximate solution is built following similar ideas used in up-scaling methods for porous media [127]. The resulting approximate problem consists in solving the macro-scale problem with effective boundary conditions, or wall laws, that are prescribed on a smooth homogeneous surface, also called effective surface. The role of this surface is to describe the average behavior of the heterogeneous one in the same conditions. In the present paper, effective boundary conditions are developed for the momentum and heat transfer problems, thereby a closed form of the boundary value problem in Ω_1 for $(\mathbf{u}_1, p_1, T_1)$ is obtained.

II.3 Effective boundary conditions

In the frame of domain decomposition-like methods, several studies have been devoted to the derivation of effective boundary conditions for laminar flows over rough surfaces. To our knowl-

edge, Carrau [33] was the first to propose wall laws over periodic surfaces using a homogenization procedure. The approach used in [33] is similar to the one we use in the present paper. The main differences lie in the treatment of the effective surface, or the coupling surface [33], which will be discussed later. Then, wall laws for laminar steady and unsteady flows have been constructed within the framework of two-scale asymptotic expansion techniques by Achdou & *al.* [3], Barrenechea & *al.* [11], Basson et Gerard-Varet [12] and Mikelic et Devigne [114]. In a recent paper, Veran & *al.* [149] have used a multi-domain decomposition approach to obtain effective boundary conditions for momentum and mass transfer problems over rough reactive surfaces. As a continuation of the work proposed by Veran & *al.* [149], we develop here effective boundary conditions for momentum and heat transfer problems. The development of the effective boundary conditions for the momentum problem is revisited through a comprehensive analysis following similar ideas used in up-scaling methods for porous media [127] while highlighting some links with other proposed approaches such as multiple scale asymptotics (*e.g.* [3]) or meso-scale modeling (*e.g.* [38, 119]).

Before building effective conditions, we adopt here the simplified assumption that the momentum and heat transfer problems can be uncoupled at the ℓ-scale in Ω_2. This is done by neglecting the buoyancy term $\rho\beta(T_2 - T_r)\mathbf{g}$ in Eq.(II.5a) thanks to the following estimate

$$\mathrm{Ra}_\ell \ll 1 \tag{II.7}$$

where $\mathrm{Ra}_\ell = \mathrm{Pr}\,\rho^2\beta\Delta T_\ell g\ell^3/\mu^2$ is the micro-scale Rayleigh number characterizing the natural convection at the ℓ-scale. The relationship between this micro-scale Rayleigh number Ra_ℓ and the macro-scale one Ra_L (defined by (II.2)) is given by

$$\mathrm{Ra}_\ell = \mathrm{Ra}_L\epsilon^3\frac{\Delta T_\ell}{\Delta T_L} \tag{II.8}$$

where $\epsilon = \ell/L$. From this relationship, the decoupling assumption given by (II.7) appears to be valid provided that the following constraint is satisfied

$$\epsilon^3\frac{\Delta T_\ell}{\Delta T_L} \ll \frac{1}{\mathrm{Ra}_L} \tag{II.9}$$

It appears to be difficult to give precise estimates for ΔT_ℓ and thus to assess the validity of the constraint (II.9). Hence, at this stage, we just provide below rough estimates that permit to satisfy this constraint. This is done by assuming that the roughnesses are well contained in the boundary layer. Indeed, on the one hand, for vertical walls, the boundary layer thickness is of order $\mathrm{Ra}_L^{-1/4}$ [69]. Therefore, the rough estimate $\Delta T_\ell \sim \epsilon\Delta T_L$ is sufficient to satisfy the decoupling assumption $\mathrm{Ra}_\ell \ll 1$. On the other hand, for horizontal walls, the boundary layer thickness is of order $\mathrm{Ra}_L^{-1/5}$ [135]. In this case, a more restrictive estimate in terms of $\Delta T_\ell \sim \epsilon^2\Delta T_L$ has to be adopted in order to satisfy the decoupling assumption. In this study, we assume that the rough estimate $\Delta T_\ell \sim \epsilon\Delta T_L$ is valid. As such an estimate seems to be reasonable, it is nonetheless more difficult to prove it and we acknowledge that the resulting decoupling assumption may be too drastic in many situations. In our numerical experiments, even if the proposed effective boundary conditions lead to satisfactory results for Ra_L up to 10^8 (*cf.* section (II.3.3)), it will be interesting to assess the validity of this decoupling assumption on more difficult problems.

Thanks to the previous decoupling assumption, the momentum and heat transfer problems can be solved independently and the related effective conditions can also be treated independently.

II.3.1 Momentum effective boundary condition

As stated previously, since the momentum and heat transfer problems can be solved independently, the building of the related effective conditions can also be treated independently and we begin here

with the momentum effective boundary condition. Discarding the buoyancy coupling term, the momentum transfer problem in Ω_2 is now given by

$$\begin{aligned}
\rho\left(\mathbf{u}_2\cdot\nabla\right)\mathbf{u}_2+\nabla p_2 &= \mu\nabla^2\mathbf{u}_2 \quad \text{in } \Omega_2 && \text{(II.10a)}\\
\nabla\cdot\mathbf{u}_2 &= 0 \quad \text{in } \Omega_2 && \text{(II.10b)}\\
\mathbf{u}_2 &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.10c)}\\
\mathbf{n}_0\cdot\left(-p_2\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{u}_2\right) &= \mathbf{n}_0\cdot\left(-p_1\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{u}_1\right) \quad \text{on } \Gamma_0 && \text{(II.10d)}\\
\mathbf{u}_2 &= \mathcal{G}\left(x,y\right) \quad \text{on } \Gamma_s\setminus\Omega_2 && \text{(II.10e)}
\end{aligned}$$

Here, a momentum effective boundary condition is built in the frame of the approximation of the Dirichlet-to-Neumann operator (II.6a)-(II.6b). Such an approximation is based on estimates of the velocity and pressure fields $(\mathbf{u}_2,p_2)$ in Ω_2 which rely on the resolution of local closure problems in a pseudo-periodic unit cell Ω_i. To accomplish this, the first step consists in writing the micro-scale variables as sum of a macro-scale term (with $\star_{1,2}$ quantities) which undergoes significant variations only over the large length scale L and a deviation term (with $\tilde{\star}$ quantities) for which the associated dominant length scale is ℓ. These spatial decompositions read

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_2 &= \mathbf{u}_{1,2}+\tilde{\mathbf{u}}_2 && \text{(II.11a)}\\
p_2 &= p_{1,2}+\tilde{p}_2 && \text{(II.11b)}
\end{aligned}$$

At this stage, the macro-scale terms $\mathbf{u}_{1,2}$ and $p_{1,2}$ remain to be defined in the sub-domain Ω_2. Here, they are approximated by the following Taylor expansions in the normal direction to the fictitious surface Γ_0

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_{1,2} &= \mathbf{u}_{1,0}+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0} && \text{(II.12a)}\\
p_{1,2} &= p_{1,0}+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k p_{1,0} && \text{(II.12b)}
\end{aligned}$$

where the subscript $\star_{1,0}$ denote the spatial restriction of the fields $(\mathbf{u}_1,p_1)$ on Γ_0. These approximations have to be compared to the meso-scale modeling introduced by Ochoa-Tapia and Whitaker [119] or Jamet and Chandesris [38] for the development of effective boundary conditions between a porous medium and a free fluid region. To be explicit about this analogy, the estimate of the macro-scale terms in Ω_2, $\mathbf{u}_{1,2}$ and $p_{1,2}$ defined by (II.12) or $T_{1,2}$ introduced later in (II.43) for the heat transfer problem, can be viewed as the meso-scale fields introduced in [38] where the sub-domains Ω_1 and Ω_2 play respectively the role of the homogeneous free fluid region and the heterogeneous transition region. Here, the meso-scale fields are simply given by a Taylor expansion from the coupling surface rather than satisfying a boundary value problem with highly varying coefficients. The dimensionless form of the relationships (II.12) ($\star^+$ quantities) is given by

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_{1,2}^+ &\sim \mathbf{u}_{1,0}^+ + \sum_{k\geq 0}\epsilon^k\frac{{y^k}^+}{k!}\partial_y^k{\mathbf{u}_{1,0}}^+ && \text{(II.13a)}\\
p_{1,2}^+ &\sim p_{1,0}^+ + \sum_{k\geq 0}\epsilon^k\frac{{y^k}^+}{k!}\partial_y^k{p_{1,0}}^+ && \text{(II.13b)}
\end{aligned}$$

Under the dimensionless form, these approximations may be seen as asymptotic expansions in which $\epsilon=\ell/L$ acts as the small parameter [3]. As a consequence, we will adopt the terminology

used in [3] associating the order of the effective conditions with the small parameter ϵ. Now, the estimates (II.11) together with (II.12) are substituted in (II.10) yielding

$$\rho\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 1}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)\cdot\nabla\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\rho\mathbf{u}_{1,0}\cdot\nabla\mathbf{u}_{1,0}+$$

$$\rho y\mathbf{u}_{1,0}\cdot\nabla\left(\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right)+\rho\mathbf{u}_{1,0}\cdot\nabla\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 2}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\nabla p_{1,0}+y\partial_x\partial_y p_{1,0}\mathbf{e}_1+$$

$$\nabla\left(\tilde{p}_2+\sum_{k\geq 2}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k p_{1,0}\right)=\mu\nabla^2\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+y\partial_y\mathbf{u}_{1,0}+\sum_{k\geq 3}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\mu\nabla^2\mathbf{u}_{1,0}$$

$$+\mu\frac{y^2}{2}\partial_{xx}^2\partial_{yy}^2\mathbf{u}_{1,0}\text{ in }\Omega_2 \tag{II.14a}$$

$$\nabla\cdot\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)=0\quad\text{in }\Omega_2 \tag{II.14b}$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}=\mathbf{0}\quad\text{on }\Gamma_w \tag{II.14c}$$

$$\mathbf{n}_0\cdot\left(-\tilde{p}_2\mathbf{I}+\mu\nabla\tilde{\mathbf{u}}_2\right)=\mathbf{0}\quad\text{on }\Gamma_0 \tag{II.14d}$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}=\mathcal{G}\left(x,y\right)\quad\text{on }\Gamma_s\setminus\Omega_2 \tag{II.14e}$$

where $\mathbf{e}_1=(1,0)^T$ in Eq.(II.14b). Then, since the Navier-Stokes equations Eqs.(II.4a)-(II.4b) are satisfied on the fictitious surface Γ_0, we can write the boundary value problem (II.14) as

$$\rho\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 1}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)\cdot\nabla\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\ \rho y\mathbf{u}_{1,0}\cdot\nabla\left(\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right)+$$

$$+\rho\mathbf{u}_{1,0}\cdot\nabla\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 2}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+y\partial_x\partial_y p_{1,0}\mathbf{e}_1+\nabla\left(\tilde{p}_2+\sum_{k\geq 2}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k p_{1,0}\right)$$

$$=\mu\nabla^2\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+y\partial_y\mathbf{u}_{1,0}+\sum_{k\geq 3}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\mu\frac{y^2}{2}\partial_{xx}^2\partial_{yy}^2\mathbf{u}_{1,0}\text{ in }\Omega_2 \tag{II.15a}$$

$$\nabla\cdot\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 1}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)=0\quad\text{in }\Omega_2 \tag{II.15b}$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}=\mathbf{0}\quad\text{on }\Gamma_w \tag{II.15c}$$

$$\mathbf{n}_0\cdot\left(-\tilde{p}_2\mathbf{I}+\mu\nabla\tilde{\mathbf{u}}_2\right)=\mathbf{0}\quad\text{on }\Gamma_0 \tag{II.15d}$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}=\mathcal{G}\left(x,y\right)\quad\text{on }\Gamma_s\setminus\Omega_2 \tag{II.15e}$$

This result can be simplified by estimating the order of magnitude of its different terms. With this objective, the order of magnitude of the spatial deviations have to be estimated. The key to this estimation are the boundary conditions given by Eqs.(II.15c)-(II.15d). Keeping in mind that the

length scales associated with the spatial deviations and the macro-scale terms are respectively ℓ and L, the boundary condition (II.15c) suggests

$$\mathcal{O}\left(\tilde{\mathbf{u}}_2\right) \sim \mathcal{O}\left(\mathbf{u}_{1,0}\right) \tag{II.16}$$

No precise estimate is available for $\mathbf{u}_{1,0}$. However, if we assume that the coupling surface is well contained in the laminar boundary layer, we can adopt the following rough estimate

$$\mathcal{O}\left(\mathbf{u}_{1,0}\right) \sim \mathcal{O}\left(\epsilon U\right) \tag{II.17}$$

where we recall that U is the magnitude of the macro-scale velocity. This rough estimate immediately leads to $\mathcal{O}\left(\tilde{\mathbf{u}}_2\right) \sim \mathcal{O}\left(\epsilon U\right)$. Then, by using this latter estimate together with (II.15d), we obtain

$$\mathcal{O}\left(\tilde{p}_2\right) \sim \mathcal{O}\left(\mu\frac{\epsilon U}{\ell}\right) \sim \mathcal{O}\left(\rho\frac{\epsilon^2 U^2}{\mathrm{Re}_\ell}\right) \tag{II.18}$$

where Re_l is the micro-scale Reynolds number defined by $\mathrm{Re}_\ell = \rho\epsilon U\ell/\mu$. At this stage, it is more convenient to write the dimensionless form of the boundary value problem (II.15) in order to make further simplifications. On the basis of the previous estimates, one finds

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Re}_\ell\epsilon\rho\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 1}\epsilon^k\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)\cdot\nabla\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\epsilon^{k+1}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\ \mathrm{Re}_\ell\epsilon^2\rho y\mathbf{u}_{1,0}\cdot\nabla\left(\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right)+\\
&+\mathrm{Re}_\ell\epsilon\rho\mathbf{u}_{1,0}\cdot\nabla\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 2}\epsilon^{k+1}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\epsilon^3 y\partial_x\partial_y p_{1,0}\mathbf{e}_1+\nabla\left(\epsilon\tilde{p}_2+\sum_{k\geq 2}\epsilon^{k+2}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k p_{1,0}\right)\\
&=\nabla^2\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\epsilon^3 y\partial_y\mathbf{u}_{1,0}+\sum_{k\geq 3}\epsilon^{k+2}\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)+\epsilon^4\frac{y^2}{2}\partial_{xx}^2\partial_{yy}^2\mathbf{u}_{1,0}\ \text{in}\ \Omega_2 \qquad \text{(II.19a)}\\
&\nabla\cdot\left(\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\epsilon^k\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}\right)=0\quad\text{in}\ \Omega_2 \qquad \text{(II.19b)}\\
&\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\epsilon^k\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}=\mathbf{0}\quad\text{on}\ \Gamma_w \qquad \text{(II.19c)}\\
&\mathbf{n}_0\cdot\left(-\tilde{p}_2\mathbf{I}+\mu\nabla\tilde{\mathbf{u}}_2\right)=\mathbf{0}\quad\text{on}\ \Gamma_0 \qquad \text{(II.19d)}\\
&\tilde{\mathbf{u}}_2+\sum_{k\geq 0}\epsilon^k\frac{y^k}{k!}\partial_y^k\mathbf{u}_{1,0}=\mathcal{G}\left(x,y\right)\quad\text{on}\ \Gamma_s\setminus\Omega_2 \qquad \text{(II.19e)}
\end{aligned}$$

where the superscript $^+$ have been omitted in order to simplify the notations. The relationship between the micro-scale Reynolds number Re_ℓ and the macro-scale one Re_L (defined by (II.3)) is given by

$$\mathrm{Re}_\ell \ \sim\ \epsilon^2\mathrm{Re}_L \tag{II.20}$$

Since the roughnesses are assumed to be small compared to the boundary layer thickness, one can write

$$\mathrm{Re}_L \ll \epsilon^{-2} \tag{II.21}$$

Then, by substituting this estimate in (II.20) one obtains

$$\mathrm{Re}_\ell \ll 1 \tag{II.22}$$

We are concerned here in building a first-order approximation. Under these circumstances, all the terms of order $\mathcal{O}\left(\epsilon^k\right)$ with $k \geq 2$ can be discarded in the equations (II.19) as, for instance, inertia terms. We emphasize that such a simplification is possible provided that the estimate (II.21) is satisfied. Indeed, since the viscous boundary layer thickness decreases when the macro-scale Reynolds number increases, the estimate given by (II.21) may be questionable for high values of Re_L. In this case, inertia terms such as for example $\tilde{\mathbf{u}}_2 \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}}_2$ cannot be neglected anymore. Thereby, the PDEs system (II.19) boils down to a Stokes-like problem which is written below in dimensional form

$$\nabla \tilde{p}_2 = \mu \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}_2 \quad \text{in } \Omega_2 \tag{II.23a}$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}_2 = 0 \quad \text{in } \Omega_2 \tag{II.23b}$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 = -\mathbf{u}_{1,0} - y \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \quad \text{on } \Gamma_w \tag{II.23c}$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (-\tilde{p}_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \tilde{\mathbf{u}}_2) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_0 \tag{II.23d}$$

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 + \mathbf{u}_{1,0} + y \partial_y \mathbf{u}_{1,0} = \mathcal{G}(x, y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \tag{II.23e}$$

The computation of this boundary value problem appears again to be a costly numerical task as it consists in a coupled *micro macro*-scale problem for both the spatial deviations and the macro-scale contributions $\mathbf{u}_{1,0}$ and $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$. Following [127], these macro-scale contributions may be viewed as source terms which act as generators of the spatial deviation velocity $\tilde{\mathbf{u}}_2$ and the spatial deviation pressure $\tilde{p}_2$ in Ω_2. Then, given the nature of these coupled equations, we propose to construct an approximate solution. Neglecting the influence of $\mathcal{G}(x, y)$ in (II.23e), one can show that the spatial deviations are zero when the source terms $\mathbf{u}_{1,0}$ and $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ are zero. This encourages us to represent the spatial deviations in terms of the macro-scale source terms according to

$$\tilde{\mathbf{u}}_2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mathbf{B} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \tag{II.24a}$$

$$\tilde{p}_2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{u}_{1,0} + \mathbf{b} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \tag{II.24b}$$

where $(\mathbf{A}, \mathbf{a})$ and $(\mathbf{B}, \mathbf{b})$ refer to the closure variables or the mapping variables that realize an approximate solution of the *micro macro*-scale problem (II.23). The closure variables $(\mathbf{A}, \mathbf{a})$ and $(\mathbf{B}, \mathbf{b})$ are solution of two boundary value problems, or closure problems. In practice, these closure problems are solved over a pseudo-periodic representative unit cell Ω_i (*cf.* Fig.III.2) with periodicity conditions for closure variables as in closure problems obtained from the volume averaging method for the macro-scale description of transport phenomena in porous media (*e.g.* [127]). These periodicity conditions are justified because the boundary condition Eq.(II.23e) can only have an influence in a region of thickness of the order of ℓ near the side surfaces. Moreover the roughnesses are assumed to be contained in the viscous boundary layer and thus, the variations of $\mathbf{u}_{1,0}$ in the transverse x-direction are negligible compare to the one in the vertical y-direction. In other words, this means that the coupling surface must be contained in the viscous boundary layer in order for the periodicity conditions to be satisfied. Here, it is important to mention that the periodicity assumption for the closure variables does not imply that the macro-scale terms are periodic on the coupling surface. Under these circumstances, the closure problems are given by

- **Problem I.** $\mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\nabla \mathbf{a} = \mu \nabla^2 \mathbf{A} \quad \text{in } \Omega_i \tag{II.25a}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i \tag{II.25b}$$

$$\mathbf{A} = -\mathbf{I} \quad \text{on } \Gamma_{w_i} \tag{II.25c}$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{a}\mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A}) = \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} \tag{II.25d}$$

$$\mathbf{A}(x) = \mathbf{A}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \tag{II.25e}$$

$$\mathbf{a}(x) = \mathbf{a}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \tag{II.25f}$$

- **Problem II.** $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\nabla \mathbf{b} &= \mu \nabla^2 \mathbf{B} \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.26a)}\\
\nabla \cdot \mathbf{B} &= \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.26b)}\\
\mathbf{B} &= -y\mathbf{I} \quad \text{on } \Gamma_{w_i} && \text{(II.26c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot (\mathbf{b}\mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B}) &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} && \text{(II.26d)}\\
\mathbf{B}(x) &= \mathbf{B}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.26e)}\\
\mathbf{b}(x) &= \mathbf{b}(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.26f)}
\end{aligned}$$

The derivation of these two closure problems is given in Appendix (II.3.A). At this stage, it is interesting to remark that the equations (II.25) and (II.26) suggest the following estimates

$$\mathcal{O}(\mathbf{A}) \sim \mathcal{O}(1) \quad ; \quad \mathcal{O}(\mathbf{B}) \sim \mathcal{O}(\ell) \tag{II.27a}$$

$$\mathcal{O}(\mathbf{a}) \sim \mathcal{O}\left(\frac{\mu}{\ell}\right) \quad ; \quad \mathcal{O}(\mathbf{b}) \sim \mathcal{O}(\mu) \tag{II.27b}$$

This will be used later to obtain a useful form of the effective boundary conditions.

At this point of the analysis, we follow the procedure used by Whitaker [152] to obtain more convenient forms of the problems **I** and **II**. This consists in doing the scalar product of the closure variables with an arbitrary unit vector. In our case, $\mathbf{e}_1 = (1,0)^T$ and $\mathbf{e}_2 = (0,1)^T$ are chosen as unit vectors. This results in four closure problems in the form of Stokes' problem. These problems are listed below.

- **Problem I.1.** $\mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\nabla a_1 &= \mu \nabla \mathbf{A}_1 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.28a)}\\
\nabla \cdot \mathbf{A}_1 &= 0 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.28b)}\\
\mathbf{A}_1 &= -\mathbf{e}_1 \quad \text{on } \Gamma_{w_i} && \text{(II.28c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot (-a_1\mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A}_1) &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} && \text{(II.28d)}\\
\mathbf{A}_1(x) &= \mathbf{A}_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.28e)}\\
a_1(x) &= a_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.28f)}
\end{aligned}$$

- **Problem II.1.** $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\nabla b_1 &= \mu \nabla^2 \mathbf{B}_1 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.29a)}\\
\nabla \cdot \mathbf{B}_1 &= 0 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.29b)}\\
\mathbf{B}_1 &= -y\mathbf{e}_1 \quad \text{on } \Gamma_{w_i} && \text{(II.29c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot (-b_1\mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B}_1) &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} && \text{(II.29d)}\\
\mathbf{B}_1(x) &= \mathbf{B}_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.29e)}\\
b_1(x) &= b_1(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.29f)}
\end{aligned}$$

- **Problem I.2.** $\mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\nabla a_2 &= \mu \nabla \mathbf{A}_2 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.30a)}\\
\nabla \cdot \mathbf{A}_2 &= 0 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.30b)}\\
\mathbf{A}_2(x) &= -\mathbf{e}_2 \quad \text{on } \Gamma_{w_i} && \text{(II.30c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot (-a_2\mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{A}_2) &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{0_i} && \text{(II.30d)}\\
\mathbf{A}_2 &= \mathbf{A}_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.30e)}\\
a_2(x) &= a_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.30f)}
\end{aligned}$$

- **Problem II.2.** $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\nabla b_2 &= \mu \nabla^2 \mathbf{B}_2 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.31a)}\\
\nabla \cdot \mathbf{B}_2 &= 0 \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.31b)}\\
\mathbf{B}_2 &= -y\mathbf{e}_2 \quad \text{on } \Gamma_{w_i} && \text{(II.31c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot (-b_2 \mathbf{I} + \mu \nabla \mathbf{B}_2) &= \mathbf{0} \quad \text{in } \Gamma_{0_i} && \text{(II.31d)}\\
\mathbf{B}_2(x) &= \mathbf{B}_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.31e)}\\
b_2(x) &= b_2(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.31f)}
\end{aligned}$$

where the notations $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2)^T$, $\mathbf{B} = (\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2)^T$, $\mathbf{a} = (a_1, a_2)^T$ and $\mathbf{b} = (b_1, b_2)^T$ have been considered in the above systems. One can see that $(\mathbf{A}_1, a_1) = (-\mathbf{e}_1, 0)$ and $(\mathbf{A}_2, a_2) = (-\mathbf{e}_2, 0)$ are respectively the trivial solutions of the closure problems **I.1** and **I.2**. Hence, $(\mathbf{A}, \mathbf{a}) = (-\mathbf{I}, 0)$ is the trivial solution of the closure problem **I**. As far as the problem **II** is concerned, there only exists a trivial solution in the smooth case which is given by $(\mathbf{B}, \mathbf{b}) = (-\delta_0 \mathbf{I}, 0)$.

At this point, on the basis of the estimates provided for the micro-scale velocity $\mathbf{u}_2$ and the micro-scale pressure p_2, we are now in a position to obtain a closed form of the macro-scale problem for $(\mathbf{u}_1, p_1)$ in Ω_1. From the representations of spatial deviations given by (II.24) together with the trivial solution of the local closure problem **I**, the transmission boundary condition Eq.(II.6a) leads to the following first-order effective boundary condition

$$-\mu \mathbf{u}_{1,0} = -\mu \mathbf{B} \cdot \partial_y \mathbf{u}_{1,0} \tag{II.32}$$

Introducing the notations $\mathbf{B}_1 = (B_{11}, B_{12})^T$ and $\mathbf{B}_2 = (B_{21}, B_{22})^T$, the equation (II.32) takes the form

$$-\mu \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ v_{1,0} \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_{11}\partial_y u_{1,0} + B_{21}\partial_y v_{1,0} \\ B_{12}\partial_y u_{1,0} + B_{22}\partial_y v_{1,0} \end{pmatrix} \tag{II.33}$$

where $\mathbf{u}_{1,0} = (u_{1,0}, v_{1,0})^T$. We focus now on the right hand side of (II.33) and we show that some simplifications can be done at the first-order approximation. Indeed, on the one hand, from the incompressibility condition (II.4b) and the expression of $u_{1,0}$ given by (II.33) one can write

$$\begin{aligned}
B_{21}\partial_y v_{1,0} &= -B_{21}\partial_x (B_{11}\partial_y u_{1,0} + B_{21}\partial_y v_{1,0}) && \text{(II.34a)}\\
B_{22}\partial_y v_{1,0} &= -B_{22}\partial_x (B_{11}\partial_y u_{1,0} + B_{21}\partial_y v_{1,0}) && \text{(II.34b)}
\end{aligned}$$

Since B_{12}, B_{21} and B_{22} are of order ℓ from (II.27a) and $u_{1,0}$, $v_{1,0}$ are of order ϵU from (II.17), the order of magnitude of the right hand side of (II.34) is given by

$$\begin{aligned}
B_{21}\mathcal{O}\left(\partial_x (B_{12}\partial_y u_{1,0} + B_{21}\partial_y v_{1,0})\right) &\sim \mathcal{O}\left(\epsilon^3 U\right) && \text{(II.35a)}\\
B_{22}\mathcal{O}\left(\partial_x (B_{12}\partial_y u_{1,0} + B_{21}\partial_y v_{1,0})\right) &\sim \mathcal{O}\left(\epsilon^3 U\right) && \text{(II.35b)}
\end{aligned}$$

Thus, at the first-order approximation, the boundary condition (II.32) reads

$$-\mu \begin{pmatrix} u_{1,0} \\ v_{1,0} \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_{11}\partial_y u_{1,0} \\ B_{12}\partial_y u_{1,0} \end{pmatrix} \tag{II.36}$$

On the other hand, using the Stokes' theorem along with the boundary condition (II.29c) and the periodicity condition (II.29e), the incompressibility condition given by (II.29b) can be written as

$$\int_{\Gamma_{0i}} \mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{B}_1 \, d\Gamma = \int_{\Gamma_{wi}} y\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_1 \, d\Gamma \tag{II.37}$$

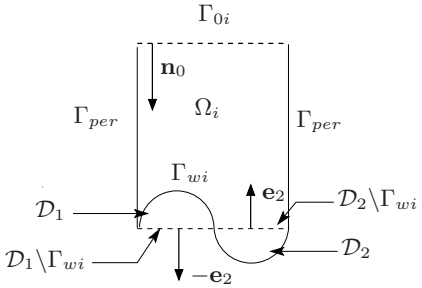


Figure II.3: Schematic decomposition of the rough surface in two closed curves.

The right hand side of (II.37) can be expressed as

$$\int_{\Gamma_{wi}} y\mathbf{n}\cdot\mathbf{e}_1\ d\Gamma = \sum_{k=1}^{2}\int_{\mathcal{D}_k} y\mathbf{n}\cdot\mathbf{e}_1 dV + \int_{\mathcal{D}_1\backslash\Gamma_{wi}} y\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_1\ d\Gamma - \int_{\mathcal{D}_2\backslash\Gamma_{wi}} y\mathbf{e}_2\cdot\mathbf{e}_1\ d\Gamma \tag{II.38}$$

where $\mathcal{D}_k$ is a closed curve as indicated in Fig.III.3. Thanks to the Cauchy's integral theorem, the right hand side of (II.38) becomes zero and the equation (II.37) reduces to

$$\int_{\Gamma_{0i}} \mathbf{n}\cdot\mathbf{B}_1\ d\Gamma = 0 \tag{II.39}$$

We recall the reader that the fictitious surface Γ_0 is located sufficiently high above the heterogeneous one so that all perturbations caused by the roughnesses disappear. In other words, this means that the variations of the closure variables are negligible. Under these circumstances, by using (II.39) the closure variable B_{12} can be discarded in (II.36). Therefore, the first-order effective boundary condition given by (II.32) takes the form

$$-\mu\partial_y u_{1,0} = C_f u_{1,0} \tag{II.40a}$$
$$v_{1,0} = 0 \tag{II.40b}$$

This effective boundary condition corresponds to a Navier boundary condition in which $C_f = -\mu/B_{11}$ corresponds to an *effective friction coefficient*. Given the roughness geometry, this effective coefficient is known from the solution of the local boundary value problem **II.1**. Here, one must note that the effective boundary condition (II.40) is similar to the one obtained at the first-order of approximation in [3, 11, 12, 114, 149].

II.3.2 Heat effective boundary conditions

In this section, heat effective boundary conditions (with respect to BC1 and BC2 micro-scale conditions recalled below) are built in the frame of the approximation of the Dirichlet-to-Neumann operator Eqs.(II.6c)-(II.6d). We follow here the same procedure employed for the momentum problem. Hence, we seek an approximate solution based on estimates for the temperature field T_2 in Ω_2 which rely on the resolution of local closure problems.

We recall here that the heat transfer problem has been uncoupled from the momentum one. Then, the micro-scale velocity $\mathbf{u}_2$ is assumed to be known and the boundary value problem for T_2

in Ω_2 reads

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_2 \cdot \nabla T_2 &= \kappa \nabla^2 T_2 \quad \text{in } \Omega_2 && \text{(II.41a)}\\
\text{(BC1)} \quad T_2 &= T_w \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.41b)}\\
\text{(BC2)} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla T_2 &= 0 \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.41c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot (-\kappa \nabla T_2) &= \mathbf{n}_0 \cdot (-\kappa \nabla T_1) \quad \text{on } \Gamma_0 && \text{(II.41d)}\\
T_2 &= \mathcal{H}(x,y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 && \text{(II.41e)}
\end{aligned}$$

As previously, we first write the temperature T_2 as a sum of a macro-scale contribution $T_{1,2}$ and a micro-scale deviation $\tilde{T}_2$ as

$$T_2 = T_{1,2} + \tilde{T}_2 \tag{II.42}$$

The macro-scale temperature $T_{1,2}$ is estimated in Ω_2 through the following Taylor expansion in the normal direction to the fictitious surface

$$T_{1,2} = T_{1,0} + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \tag{II.43}$$

where the subscript $\star_{1,0}$ denotes the spatial restriction of T_1 on Γ_0. The use of the estimates given by (II.42) and (II.43) in (II.41) leads to the following boundary value problem

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_2 \cdot \nabla \left(\tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + y \partial_x \partial_y T_{1,0} \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{e}_1 &= \kappa \frac{y^2}{2} \partial_{xx}^2 \partial_{yy}^2 T_{1,0}\\
+ \kappa \nabla^2 \left(\tilde{T}_2 + y \partial_y T_{1,0} + \sum_{k \geq 3} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) \text{ in } \Omega_2 && \text{(II.44a)}\\
\text{(BC1)} \quad \tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} &= T_w \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.44b)}\\
\text{(BC2)} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \left(\tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0}&\\
+ y \partial_x \partial_y T_{1,0} &= 0 \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.44c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot \left(-\kappa \nabla \tilde{T}_2 \right) = 0 \quad \text{on } \Gamma_0 && && \text{(II.44d)}\\
\tilde{T}_2 + \sum_{k \geq 0} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} = \mathcal{H}(x,y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 && && \text{(II.44e)}
\end{aligned}$$

Hereabove, (II.44a) has been simplified because (II.41a) is also satisfied on the fictitious surface Γ_0. Further simplifications can be done by estimating the order of magnitude of the different terms of the boundary value problem (II.44). The order of magnitude of the spatial deviation temperature is required to make a scaling analysis of the equations (II.44). The boundary conditions Eqs.(II.44b)-(II.44c) suggest the following estimates

$$\begin{aligned}
\text{(BC1)} \quad \mathcal{O}\left(\tilde{T}_2\right) &\sim \mathcal{O}(T_{1,0} - T_w) && \text{(II.45a)}\\
\text{(BC2)} \quad \mathcal{O}\left(\tilde{T}_2\right) &\sim \mathcal{O}(\epsilon T_{1,0}) && \text{(II.45b)}
\end{aligned}$$

where we recall that $\epsilon = \ell / L$. In this study, we choose the most restricting estimate which is clearly given by (II.45a) since the following relationship is always satisfied

$$\mathcal{O}(\epsilon T_{1,0}) \ll \mathcal{O}(T_{1,0} - T_w) \tag{II.46}$$

At this stage, we are in a position to make the scaling analysis of the equations (II.41) on the basis of these estimates. The dimensionless form of the boundary value problem given by (II.44) reads

$$\mathrm{Pe}_\ell \mathbf{u}_2 \cdot \nabla \left(\tilde{T}_2 + \sum_{k\geq 2} \epsilon^{k+1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + \mathrm{Pe}_\ell \epsilon^2 y \partial_x \partial_y T_{1,0} \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{e}_1 \quad =$$

$$\epsilon^4 \frac{y^2}{2} \partial_{xx}^2 \partial_{yy}^2 T_{1,0} + \nabla^2 \left(\tilde{T}_2 + \epsilon^3 y \partial_y T_{1,0} + \sum_{k\geq 3} \epsilon^{k+2} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k \ T_{1,0} \right) \text{ in } \Omega_2 \quad \text{(II.47a)}$$

$$\text{(BC1)} \quad \tilde{T}_2 + \sum_{k\geq 0} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} = T_w \quad \text{on } \Gamma_w \quad \text{(II.47b)}$$

$$\text{(BC2)} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \left(\tilde{T}_2 + \sum_{k\geq 2} \epsilon^{k+1} \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} \right) + \epsilon \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0} + \epsilon^2 y \partial_x \partial_y T_{1,0} = 0 \quad \text{on } \Gamma_w \quad \text{(II.47c)}$$

$$\mathbf{n}_0 \cdot \left(-\kappa \nabla \tilde{T}_2 \right) = 0 \quad \text{on } \Gamma_0 \quad \text{(II.47d)}$$

$$\tilde{T}_2 + \sum_{k\geq 0} \epsilon^k \frac{y^k}{k!} \partial_y^k T_{1,0} = \mathcal{H}(x,y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 \quad \text{(II.47e)}$$

where the superscript $^+$ have been omitted in order to simplify the notations. In the equation (II.47a), Pe_ℓ is the micro-scale Péclet number defined by $\mathrm{Pe}_\ell = U\ell/\kappa$ and linked to the macro-scale one (*cf.* (II.3)) by

$$\mathrm{Pe}_\ell \sim \epsilon \mathrm{Pe}_L \quad \text{(II.48)}$$

Then, since the roughnesses are assumed to be small compared to the boundary layer thickness, one can write

$$\mathrm{Pe}_L \ll \epsilon^{-2} \quad \text{(II.49)}$$

The use of this result together with (II.48) leads to the following estimate

$$\mathrm{Pe}_\ell \ll \epsilon^{-1} \quad \text{(II.50)}$$

From this estimate, the terms of order $\mathcal{O}\left(\epsilon^k\right)$ with $k \geq 2$ are neglected in the equations (II.47). As a consequence, under dimensional form, the first-order boundary value problem for the spatial deviation temperature is given by

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_2 \cdot \nabla \tilde{T}_2 &= \kappa \nabla^2 \tilde{T}_2 \text{ in } \Omega_2 && \text{(II.51a)}\\
\text{(BC1)} \quad \tilde{T}_2 + T_{1,0} + y \partial_y T_{1,0} &= T_w \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.51b)}\\
\text{(BC2)} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \tilde{T}_2 + \mathbf{n} \cdot \nabla T_{1,0} &= 0 \quad \text{on } \Gamma_w && \text{(II.51c)}\\
\mathbf{n}_0 \cdot \left(-\kappa \nabla \tilde{T}_2 \right) &= 0 \quad \text{on } \Gamma_0 && \text{(II.51d)}\\
\tilde{T}_2 + T_{1,0} + \epsilon y \partial_y T_{1,0} &= \mathcal{H}(x,y) \quad \text{on } \Gamma_s \setminus \Omega_2 && \text{(II.51e)}
\end{aligned}$$

Here again, given the nature of this *micro macro*-scale problem for both the spatial deviation temperature and the two macro-scale terms $(T_w - T_{1,0})$ and $\partial_y T_{1,0}$, we seek an approximate solution of the spatial deviation temperature $\tilde{T}_2$. As previously, if the influence of $\mathcal{H}(x,y)$ in (II.51e) is neglected, the spatial deviation temperature is zero when the macro-scale source terms are zero. This motivates us to represent the spatial deviation temperature in terms of $(T_w - T_{1,0})$ and $\partial_y T_{1,0}$ according to

$$\tilde{T}_2 = c\,(T_w - T_{1,0}) + d \partial_y T_{1,0} \quad \text{(II.52)}$$

where c and d refer to the closure variables or the mapping variables that realize an approximate solution of the problem (II.51). These variables are solutions of the closure problems **III** and **IV** that have to be solved over a representative unit cell Ω_i with periodicity conditions. These two closure problems are given below and we refer the reader to Appendix (II.3.B) for their derivation.

- **Problem III.** $(T_{1,0} - T_w)$ mapping

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_2 \cdot \nabla c &= \kappa \nabla^2 c \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.53a)} \\ \text{(BC1)} \quad c &= 1 \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.53b)} \\ \text{(BC2)} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla c &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.53c)} \\ \mathbf{n} \cdot \nabla c &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} && \text{(II.53d)} \\ c(x) &= c(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.53e)} \end{aligned}$$

- **Problem IV.** $\partial_y T_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_2 \cdot \nabla d &= \kappa \nabla^2 d \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.54a)} \\ \text{(BC1)} \quad d &= -y \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.54b)} \\ \text{(BC2)} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla d &= -\mathbf{n}_0 \cdot \mathbf{e}_2 \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.54c)} \\ \mathbf{n} \cdot \nabla d &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{0i} && \text{(II.54d)} \\ d(x) &= d(x + \Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.54e)} \end{aligned}$$

Only the closure problem **IV** needs to be solved because $c = 1$ or $c = 0$ are respectively the trivial solutions of the closure problem **III** in the case (BC1) or (BC2).

As previously discussed, the use of periodic conditions is justified as the boundary condition Eq.(II.51e) can only have an influence in a region of thickness of the order of ℓ near the side surfaces. Moreover, as the roughnesses are assumed to be contained in the thermal boundary layer, the variations of $T_{1,0}$ in the transverse x-direction are negligible compare to the one in the vertical y-direction. Here again, this means that the effective surface must be contained in the thermal boundary layer in order for the periodicity assumption to be justified. We recall the reader that this periodicity assumption for the closure variables does not imply that the macro-scale temperature is periodic on the coupling surface.

At this stage and on the basis of the estimates of the temperature field T_2 in Ω_2, we are now in a position to obtain a closed form of the heat transfer problem for T_1 in Ω_1. From the representation of the spatial deviation temperature given by (II.52) along with the trivial solution of the closure problem **III**, the transmission condition (II.6c) leads to the following first-order effective boundary conditions

$$\begin{aligned} \text{(BC1)} \quad -\mathbf{n}_0 \cdot \kappa \nabla T_{1,0} &= h\,(T_{1,0} - T_w) && \text{(II.55a)} \\ \text{(BC2)} \quad -\mathbf{n}_0 \cdot \kappa \nabla T_{1,0} &= 0 && \text{(II.55b)} \end{aligned}$$

In the case (BC1), the effective boundary condition corresponds to a Robin boundary condition where $h = -\kappa/d$ is an effective heat transfer coefficient. As far as the case (BC2) is concerned, a Neumann homogeneous boundary condition is conserved. Here again, given the roughness geometry, the effective heat transfer coefficient is known from the solution of the local boundary value problem **IV** provided that the micro-scale velocity to be known. This will be illustrated in the next section.

II.3.3 Application to a natural convection problem in a stamp shaped cavity

We propose in this section to assess the validity of the proposed effective boundary conditions through numerical experiments. As in [3] or [149], these numerical experiments consist in comparing DNSs calculations taking the roughness geometry into account with effective calculations using the concept of an effective surface.

The problem under consideration has received considerable attention in the case of a square cavity (*e.g.* [45, 107, 108]) or a porous cavity (*e.g.* [71]) and consists in a two-dimensional problem of natural convection in a differentially heated cavity with rough boundaries. As illustrated in Fig.II.4, the heterogeneous surface Γ_w of this stamp cavity has a sinusoidal structure with (arbitrarily) an amplitude $\mathcal{A} = 0.03$ and a period $\mathcal{P} = 1/14.5$. Each of the four sinusoidal surfaces have been numerically described by 580 points (*cf.* Fig.II.5). The horizontal boundaries are adiabatic while the vertical boundaries are kept isothermal with the left side at hot temperature T_h and the right side at cold temperature T_c. A no-slip boundary condition is prescribed everywhere. Here, it is interesting to remark that this natural convection problem collects all boundary conditions allowing us to validate the overall effective conditions previously developed. The Prandtl number is set to be 0.71 in overall calculations which are performed over the range $10^4 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^8$. These and the remain parameters used herein are summarized in Tab.III.1.

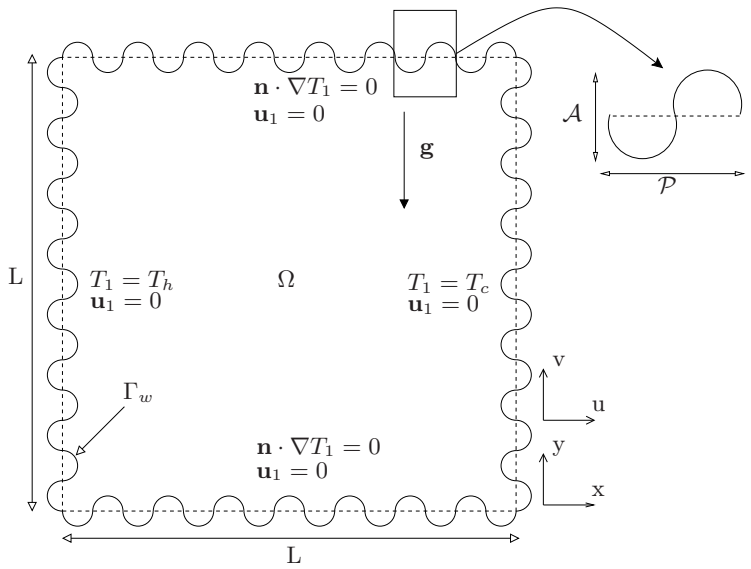


Figure II.4: Schematic representation of the computational domain $\Omega = [0, L] \times [0, L]$

L	ρ	μ	κ	T_h	T_c	β	Pr	Ra_L
1	1	Pr	1	1	0	$\mu^2 \mathrm{Ra}_L / \|\mathbf{g}\|(T_h - T_c)L^3 \,\mathrm{Pr}$	0.71	$10^3, \ldots, 10^8$

Table II.1: Summary of physical parameters used for all numerical experiments

The calculations have been performed by using an application of the object-oriented software component library PELICANS developed at the French "Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire" [1]. The time discretization corresponds to a splitting algorithm which consists in solving sequentially the temperature and the Navier-Stokes equations until steady state. The resolution of the Navier-Stokes equations has been done by using an incremental projection method. The spatial discretization corresponds to a standard finite element approximation with inf-sup stable quadratic-linear elements $\mathbb{Q}_2/\mathbb{Q}_1$ for the velocity-pressure problem and quadratic elements for the

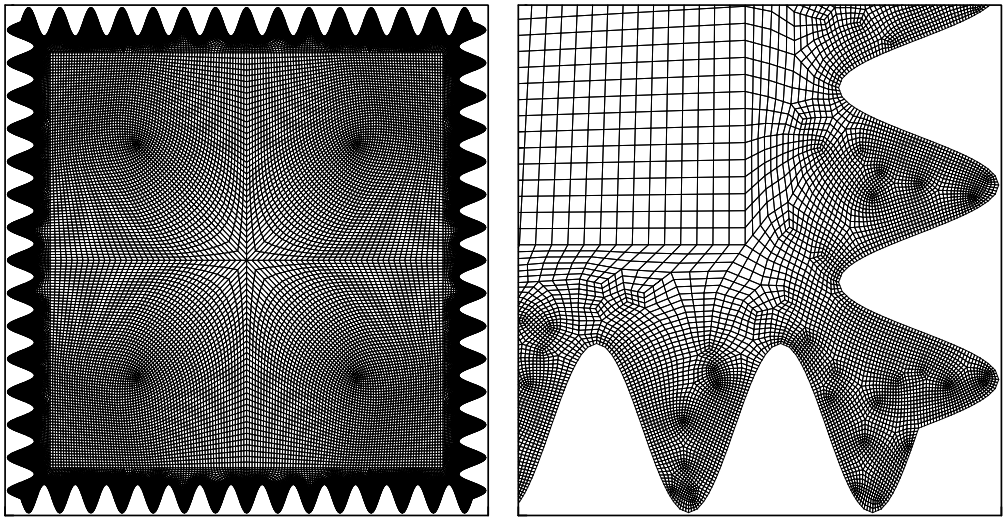


Figure II.5: Thinnest mesh used in the rough case

temperature. The fully discrete numerical scheme is described elsewhere and we refer the reader to [77, 92] for a detailed presentation.

For this kind of problem (*e.g.* [45, 107, 108]), the quantities of interest are the velocity and temperature profiles along the side walls and the averaged Nusselt number $< \mathrm{Nu} >$ given by

$$< \mathrm{Nu} >= \int_{\Gamma} \kappa \frac{\partial T_1}{\partial n} ds \tag{II.56}$$

In this paper, the Nusselt numbers have been calculated with the method proposed in [15] and all the results have been obtained after a grid refinement study (*cf.* Tab.II.4 for the maximum degree of freedoms involved in the numerical experiments).

II.3.4 Determination of the effective properties

In this section, we focus on the determination of the effective friction coefficient C_f and the effective heat transfer coefficient h by solving the closure problems **II.1** and **IV**. As previously mentioned, these closure problems are solved over a pseudo-periodic representative unit cell Ω_i. Given the periodic structure of the rough boundary Γ_w, a period of Γ_w is chosen as representative pattern for Ω_i (*cf.* Fig.II.6). The upper surface, Γ_{0i}, is located at a distance $\delta_0 = 0.2$. Fig.II.7 represents the variation of the ratio $C_f(\delta_0) = -\mu/B_{11}(\delta_0)$ over $C_f(y) = -\mu/B_{11}(y)$ with $B_{11}(\delta_0) = -0.17480$ and the one of the ratio $h(\delta_0) = -\kappa/d(\delta_0)$ over $h(y) = -\kappa/d(y)$ for different micro-scale Reynolds number Re_ℓ and $\mathrm{Pr} = 1$. As expected, the results presented in Fig.II.7 show that the effective friction coefficient and the effective heat transfer coefficient converge toward asymptotic values on Γ_{0i}. As far as the effective heat transfer coefficient is concerned, tests with $\mathrm{Pr} = 0.5, 2, 5$ lead to the same conclusion.

Now, we focus on the impact of the flow properties on the effective coefficients. Given the nature of the closure problem **II.1** in which the viscosity μ acts only as a scaling of the closure variable b_1, it is clear that the effective friction coefficient (or equivalently B_{11}) does not depend on the flow properties but only on the geometry of the roughness. As a result, the asymptotic value $C_f(\delta_0)$ will be used to perform effective calculations. Another interesting remark concerns the quantity $\delta_0 + B_{11}(\delta_0)$. The different results presented in Fig.II.8 show that $\delta_0 + B_{11}(\delta_0)$ converges toward an asymptotic value given by $L_1 = 0.025021$ when Γ_{0i} is located sufficiently high in order

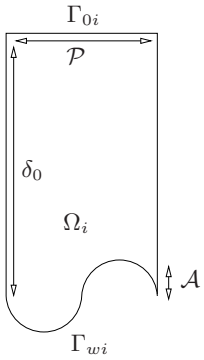


Figure II.6: Pseudo-periodic representative unit cell Ω_i

for the variation of the closure variables to vanish. We will see later that L_1 may be viewed as an effective stick-slip length for which the effective condition degenerates into a no-slip boundary condition.

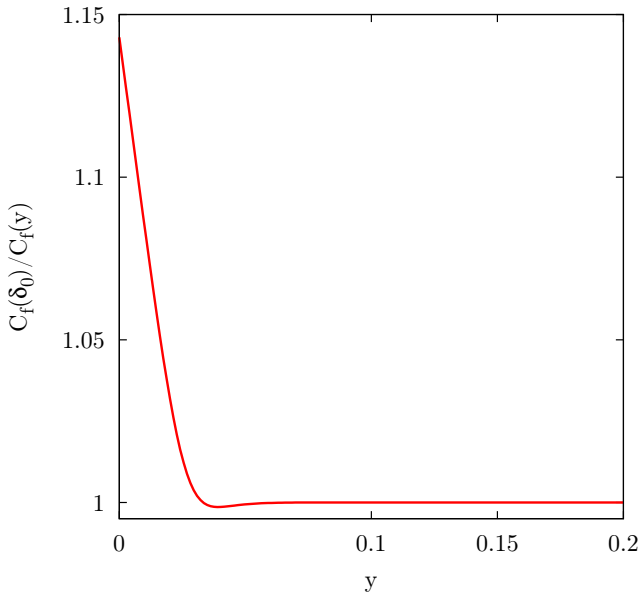
We propose now to study the impact of the flow properties on the effective heat transfer coefficient h. At the micro-scale, the flow is characterized by the micro-scale Reynolds number Re_ℓ which can also be written as $\mathrm{Re}_\ell = \rho\tau_\ell\ell^2/\mu^2$ where τ_ℓ is an imposed shear stress. In order to parametrize the impact of the flow properties on h, the couple $(\mathrm{Re}_\ell, \mathrm{Pr})$ is considered. A similar study has been done by Veran *& al.* [149] in order to characterize the impact of the flow properties on the effective reactivity. Here, by analogy, the Prandtl number Pr plays the role of the Schimdt number. The starting point consists in solving the Navier-Stokes equation in Ω_i with an imposed shear stress τ_ℓ on Γ_{0i} defined by $\tau_\ell = \mu^2\mathrm{Re}_\ell/\rho\ell^2$. Then, the resulting velocity field $\mathbf{u}_2$ is used to solve the closure problem **IV** for different values of the Prandtl number Pr. Finally, by doing this over a wide range of micro-scale Reynolds number Re_ℓ, we obtain a tabulation of the effective heat transfer coefficient as $h := h(\mathrm{Re}_\ell, \mathrm{Pr})$. Fig.II.9 represents the evolution of the coefficient h versus Re_ℓ for different Prandtl numbers Pr varying between 0.5 and 5. The results have been made dimensionless by the value in the purely diffusive case. They indicate that Re_ℓ has no real impact on the effective heat transfer coefficient h except for high values (*i.e.* $\mathrm{Re}_\ell > 5.10^2$ or equivalently $\mathrm{Re}_L > 5.10^2/\epsilon^2$ with $\epsilon = \mathcal{A}/L$). This trend can be explained by the fact that the roughnesses tend to decrease the velocity and thus increase the diffusive regime. For micro-scale Reynolds number $\mathrm{Re}_\ell < 5.10^2$, the effective heat transfer coefficient can be approximated by its value in the purely diffusive case with an error lower than two percent for Prandtl numbers $\mathrm{Pr} \leq 5$. This value is given by $h(0) = -\kappa/d(\delta_0)$ with $d(\delta_0) = -0.179526$. As illustrated in Fig.II.10, the contour lines of the closure variable d are no longer normal for high values of Re_ℓ. Such cases correspond to some high macro-scale Reynolds number Re_L (*cf.* (II.20)) flows that imply a turbulent boundary layer for which the assumptions of the effective models previously developed are no longer valid. For the laminar natural convection problem under consideration, the macro-scale Reynolds number Re_L can be expressed in term of macro-scale Rayleigh number Ra_L as follows

$$\mathrm{Re}_L \sim \frac{\sqrt{\mathrm{Ra}_L}}{\mathrm{Pr}} \tag{II.57}$$

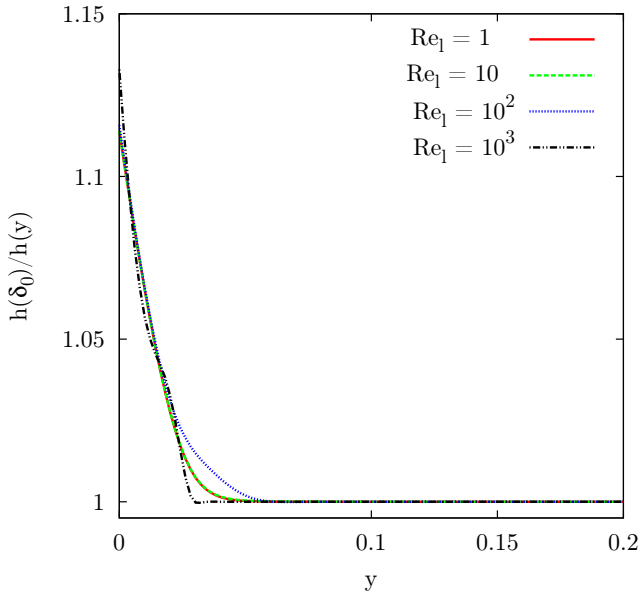
where we have used $U = \kappa\sqrt{\mathrm{Ra}_L}/L$ [122]. The relationship (II.57) can be written equivalently for the micro-scale Reynolds number Re_ℓ as

$$\mathrm{Re}_\ell \sim \epsilon^2\frac{\sqrt{\mathrm{Ra}_L}}{\mathrm{Pr}} \sim \frac{\mathcal{A}^2}{L^2}\frac{\sqrt{\mathrm{Ra}_L}}{\mathrm{Pr}} \tag{II.58}$$

In our case, since the highest value of Ra_L is set to be 10^8, the relationship (II.58) leads to $\mathrm{Re}_\ell \sim 12,5$. Therefore, from the results presented in Fig.II.9, the effective heat transfer coefficient

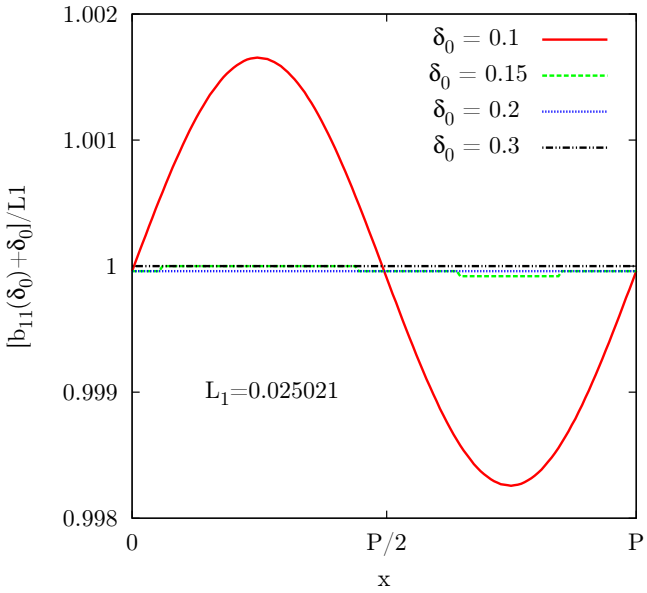


(a) Convergence of $C_f(y)$ toward $C_f(\delta_0)$.

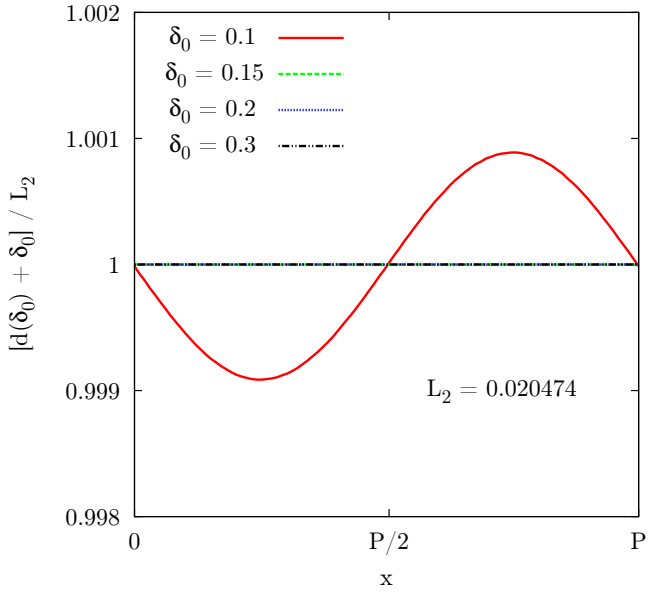


(b) Convergence of $h(y)$ toward $h(\delta_0)$.

Figure II.7: Plot on $x = \mathcal{P}/2$ of (a) the ratio $C_f(\delta_0) = -\mu/B_{11}(\delta_0)$ over $C_f(y) = -\mu/B_{11}(y)$ and (b) the ratio $h(\delta_0) = -\kappa/d(\delta_0)$ over $h(y) = -\kappa/d(y)$ for $\mathrm{Re}_\ell \in \{1, 10, 10^2, 10^3\}$ and $\mathrm{Pr} = 1$, with $\delta_0 = 0.2$.



(a) Convergence of $B_{11}(\delta_0) + \delta_0$ toward the effective length $L_1 = 0.025021$.



(b) Convergence of $d(\delta_0) + \delta_0$ toward the effective length $L_2 = 0.020474$.

Figure II.8: Plot of (a) the quantity $[B_{11}(\delta_0) + \delta_0]/L_1$ and (b) $[d(\delta_0) + \delta_0]/L_2$ in the pure diffusive case (*i.e.* $\mathrm{Re}_\ell = 0$).

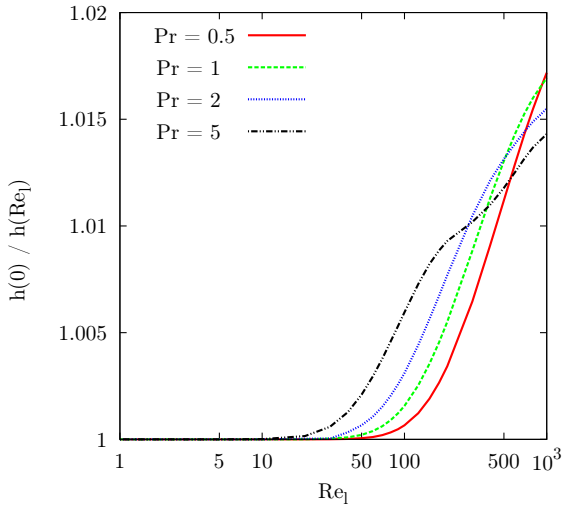
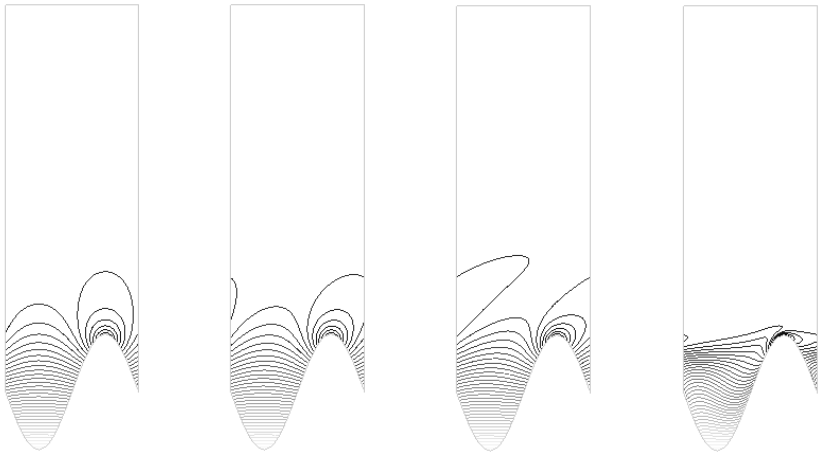


Figure II.9: Evolution of the ratio $h(0)$ in the pure diffusive case over $h(\mathrm{Re}_\ell)$



(a) $\mathrm{Re}_\ell = 1$ (b) $\mathrm{Re}_\ell = 50$ (c) $\mathrm{Re}_\ell = 100$ (d) $\mathrm{Re}_\ell = 500$

Figure II.10: Contour lines of the closure variable d for $\mathrm{Pr} = 1$.

in the purely diffusive case $h(0)$ appears to be a good estimate and then, it will be used in the following effective calculations.

As previously done for the momentum effective condition, the quantity $\delta_0 + d(\delta_0)$ have also been investigated. The results presented in Fig.II.8 also show that $\delta_0 + d(\delta_0)$ tends to an effective length given by $L_2 = 0.020474$ for which we will see later that the Robin boundary condition boils down into a isothermal boundary condition.

II.3.5 Effective calculations

This section is devoted to assess the validity of the effective conditions previously developed. Before performing effective numerical experiments, an interesting point is to prove that a specific treatment of the roughness effect is indeed necessary. To do so, we have performed direct numerical simulations in the stamp cavity (*cf.* Fig.II.11 (left) for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$) and compared the results to the one obtained in a square cavity. As illustrated for instance in Fig.II.12 to Fig.II.14 for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$,

the temperature and velocity profiles in the smooth case are very different from the one obtained in the rough case. The presence of the roughnesses tends to slow down the flow and enhance the heat transfer. Moreover, as shown in Tab.II.2, the averaged Nusselt numbers calculated on a hot rough surface for $10^3 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^8$ is lesser than the one calculated on a flat surface (which are in good agreement with [107, 108]). This great impact of the roughnesses on the momentum and

Ra_L	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7	10^8
$< \mathrm{Nu}_r >$	1.0888	2.1005	4.1607	7.9304	14.2904	25.4061
$< \mathrm{Nu}_s >$	1.1178	2.2448	4.5216	8.8252	16.5231	30.2247

Table II.2: Average Nusselt number calculated on the hot wall. Comparison between the smooth case ($\star_s$ quantities) and the rough ($\star_r$ quantities) case for $10^3 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^8$.

heat transfer for this laminar natural convection problem shows that a particular treatment of the roughnesses is necessary and then that the use of effective surface models is justified.

Throughout these tests, we have also numerically investigated the impact of the positioning of the coupling surface on the results. Actually, the optimal location, if any, of the coupling surface remains an open-question common with other up-scaling methods (*e.g.* [38] for heterogeneous porous media). This question has also a strong practical implication for numerical modeling.

The starting point of this study consists in defining an effective surface Γ_δ located at a distance δ from the coupling surface Γ_0 (*cf.* Fig.II.15). In doing this, the effective boundary conditions given by (II.40) and (II.55) have to be defined on Γ_δ to obtain a closed form of the boundary value problem in the effective domain Ω_δ. This is achieved by means of a Taylor expansion. For the momentum transfer problem, one can write

$$u_{1,0} = u_{1,\delta} - \sum_{k\geq 1} \delta^k \partial_y^k u_{1,\delta} \tag{II.59a}$$

$$v_{1,0} = v_{1,\delta} - \sum_{k\geq 1} \delta^k \partial_y^k v_{1,\delta} \tag{II.59b}$$

$$\partial_y u_{1,0} = \partial_y u_{1,\delta} - \sum_{k\geq 1} \delta^k \partial_y^{k+1} u_{1,\delta} \tag{II.59c}$$

$$\partial_y v_{1,0} = \partial_y v_{1,\delta} - \sum_{k\geq 1} \delta^k \partial_y^{k+1} v_{1,\delta} \tag{II.59d}$$

Then, by estimating the order of magnitude of these expansions, simplifications can be done at the first-order approximation to obtain

$$u_{1,0} = u_{1,\delta} - \delta \partial_y u_{1,\delta} \tag{II.60a}$$

$$v_{1,0} = v_{1,\delta} \tag{II.60b}$$

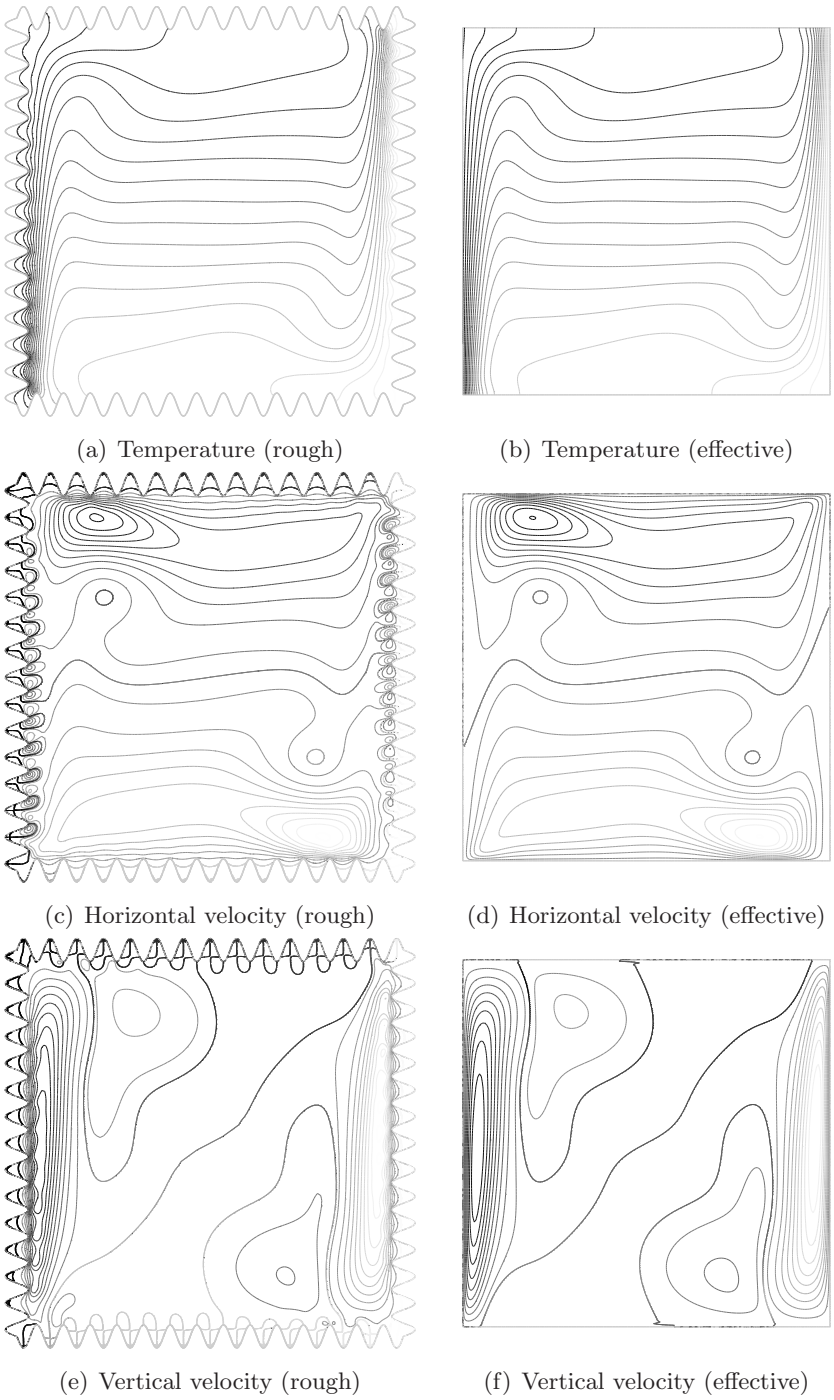
$$\partial_y u_{1,0} = \partial_y u_{1,\delta} \tag{II.60c}$$

Finally, the use of these relationships in (II.40) leads to the following first-order effective boundary condition defined on Γ_δ

$$-\mu \partial_y u_{1,\delta} = C_{f,\delta} u_{1,\delta} \tag{II.61a}$$

$$v_{1,\delta} = 0 \tag{II.61b}$$

where $C_{f,\delta} = -\mu/(B_{11} + \delta)$. Here, two remarks can be done about this effective condition. On the one hand, the effective friction coefficient $C_{f,\delta}$ tends to infinity when δ tends to $-B_{11}$. This

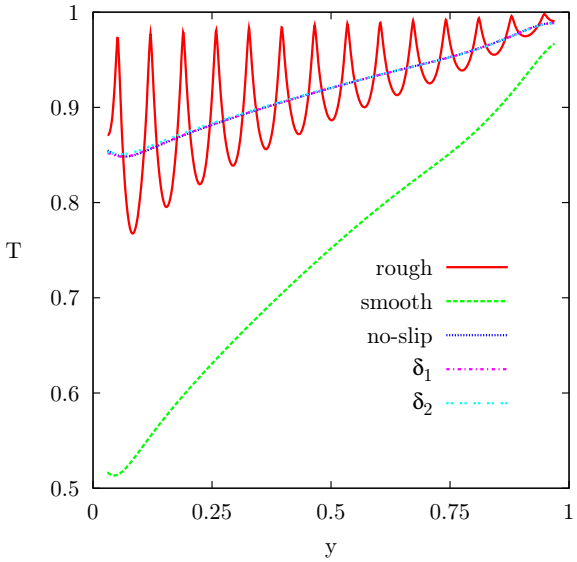


(a) Temperature (rough) (b) Temperature (effective)

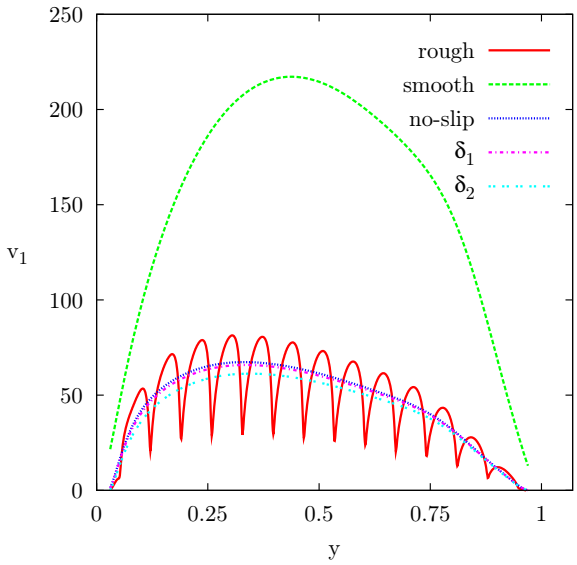
(c) Horizontal velocity (rough) (d) Horizontal velocity (effective)

(e) Vertical velocity (rough) (f) Vertical velocity (effective)

Figure II.11: Comparison of the contour lines of the temperature and the velocity fields in the rough (left) and effective no-slip (right) cases for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$.

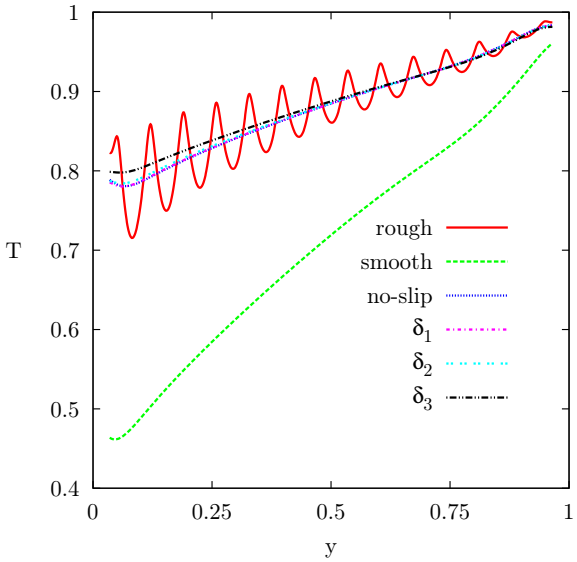


(a) Temperature on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$

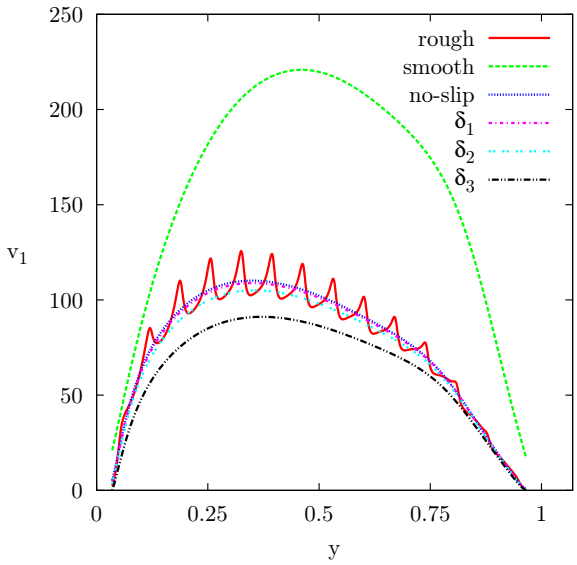


(b) Velocity on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$

Figure II.12: Comparison of the temperature profiles (left) and the one of the y-component of the velocity field (right) on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-4}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ in the rough, smooth and effective cases.

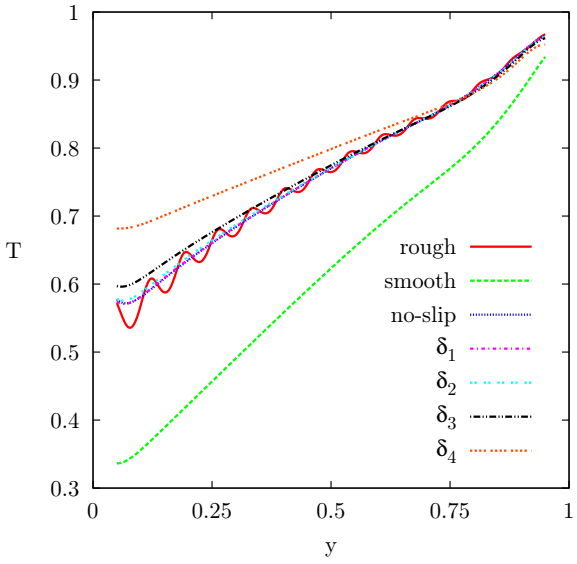


(a) Temperature on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$

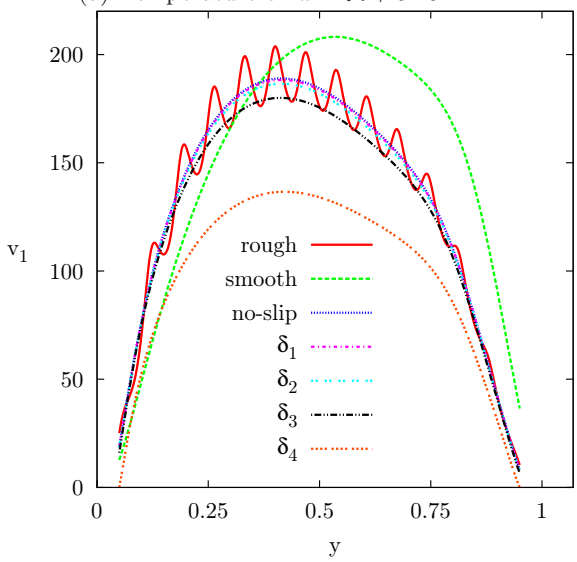


(b) Velocity on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$

Figure II.13: Comparison of the temperature profiles (left) and the one of the y-component of the velocity field (right) on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-3}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ in the rough, smooth and effective cases.



(a) Temperature on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$



(b) Velocity on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$

Figure II.14: Comparison of the temperature profiles (left) and the one of the y-component of the velocity field (right) on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ in the rough, smooth and effective cases.

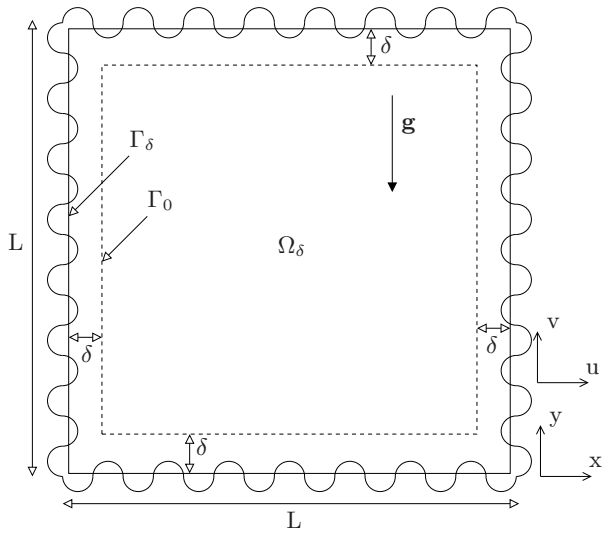


Figure II.15: Effective computational domain Ω_δ

means that the no-slip boundary condition is recovered when the effective surface Γ_δ is located at a distance $L_1 = \delta_0 + B_{11}$. This limiting case has been mentioned by Achdou *& al.* [3] and recently used by Veran *& al.* [149]. If we use the terminology employed in micro- and nanofluidics (*e.g.* [124]), the momentum effective condition given by (II.61) may be referred to as an effective stick-slip boundary condition for which the distance L_1 is the effective stick-slip length and corresponds to the surface curvature contribution of the well-known slip length in the Navier boundary condition (*e.g.* [51, 124]). For instance, in the homogeneous case for which no surface curvature contribution is expected, we obviously find $L_1 = 0$ since $B_{11} = -\delta_0$ (*cf.* (II.29)). On the other hand, it is necessary that $\delta \in [0, -B_{11}]$ to obtain a well-posed effective boundary value problem in Ω_δ with the effective condition (II.61). As far as the heat transfer problem is concerned, the same procedure is employed to define the effective boundary conditions (II.55) on Γ_δ. This leads to the following first-order effective conditions

$$\text{(BC1)} \quad -\mathbf{n}_\delta \cdot \kappa \nabla T_{1,\delta} = h_\delta \left(T_{1,\delta} - T_w\right) \tag{II.62a}$$

$$\text{(BC2)} \quad -\mathbf{n}_\delta \cdot \kappa \nabla T_{1,\delta} = 0 \tag{II.62b}$$

where $\mathbf{n}_\delta$ is the exterior normal to the effective surface Γ_δ and $h_\delta = -\kappa/(d+\delta)$. Similarly to the momentum effective condition, the Robin boundary condition degenerates to an isothermal boundary condition (*i.e.* $h_\delta \to \infty$) when δ tends to $-d$ or equivalently when the position of Γ_δ is given by the effective length L_2. Moreover, to obtain a well-posed effective boundary value problem in Ω_δ, the effective surface has to be located such that $\delta \in [0, -d]$. Since we are interested in a coupled problem, the effective surface Γ_δ has to be located such that $\delta \in [0, \delta^\star]$ where $\delta^\star$ can be seen as a lower bound defined by

$$\delta^\star = \begin{cases} -B_{11} & \text{if } B_{11} < d \\ -d & \text{if } d < B_{11} \end{cases} \tag{II.63}$$

In this study, $\delta^\star$ is given by $-B_{11}$. For the numerical experiments, we have considered five different positions of Γ_δ (*cf.* Tab.II.3). In the case denoted by "effective no-slip", the no-slip boundary condition is recovered while in the other cases denoted by "effective δ_i" Γ_δ is located higher and higher above the roughnesses. Before discussing the results, it must be emphasized that, in terms of computational cost, as clearly shown in Tab.II.4, the effective calculations are four to five less

Position of Γ_δ	δ
effective no-slip	$-B_{11}$
effective δ_1	$(\delta_0 - (\mathcal{A} - B_{11}))/2$
effective δ_2	$\delta_0 - \mathcal{A}$
effective δ_3	$\delta_0 - (\mathcal{A} + 5.10^{-3})$
effective δ_4	$\delta_0 - (\mathcal{A} + 5.10^{-2})$

Table II.3: Position of the effective surface Γ_δ.

costly than the simulations performed in the rough domain, which justifies the use of an effective surface description.

DOFs	velocity	pressure	temperature
rough	929474	117925	464737
smooth	221778	27889	110889
effective no-slip	200978	25281	100489
effective δ_i	181202	22801	90601

Table II.4: Degree of freedoms (DOFs) involved in the numerical experiments.

The following results have been obtained. Figure (II.11) presents an example of comparison between the rough case and the *effective no-slip* case for $\mathrm{Ra}_L = 10^6$. Results show that the effective conditions lead to a good approximation of the macro-scale behavior. Fig.II.12 to Fig.II.14 present some comparisons of the temperature and velocity profiles close to the hot wall on $x = \mathcal{A}+5.10^{-4}$, $x = \mathcal{A}+5.10^{-3}$ and $x = \mathcal{A}+5.10^{-2}$. The different results show a good approximation of the averaged behavior of the rough surface for $\delta_2 \leq \delta \leq -B_{11}$. It is also interesting to remark that the best results are obtained in the *effective no-slip* case. The difference observed with the other effective results might be a consequence of the fact that the error committed to the vertical component of the velocity given by (II.61b) increases as the position of Γ_δ increases. As illustrated in Fig.II.16 to to Fig.II.21, this trend is similar to the one observed for $\mathrm{Ra}_L \leq 10^7$. On the contrary, none of the effective calculations provide a satisfying approximation of the averaged behavior of the rough surface for $\mathrm{Ra}_L = 10^8$. This can be explained by the fact that the boundary layer thickness is lesser than the roughness amplitude and, in this case, the previous assumptions used to derive effective conditions are no longer valid. This result clearly points out the limits of application of our approach, which have been discussed in the theoretical section.

In addition to the temperature and velocity profiles, we have also compared the averaged Nusselt number calculated in the rough case $< \mathrm{Nu}_r >$ with the one obtained in the effective cases $< \mathrm{Nu}_{\delta_i} >$ (*cf.* Tab.II.5). The relative percentage errors observed on these values are summarized in Tab.II.6 and plotted in Fig.II.22. The graphs of the Fig.II.22 confirm the trend obtained with temperature and velocity profiles. Indeed, the effective surface models with $\delta_2 < \delta \leq -B_{11}$ give an averaged Nusselt number similar to the one obtained in the rough case with an error lesser than 3% (*i.e.* $\mathcal{O}(\epsilon)$) for Ra_L up to 10^6 and of order of 5% for $\mathrm{Ra}_L = 10^7$. Once again, the *effective no-slip* case yields the best approximation.

All the results presented in this section clearly show that the location of the coupling surface has a great impact on the approximation of the averaged behavior of the rough surface even if the effective properties vary with the coupling surface. Moreover, it appears that an optimal location (in terms of the errors made) of Γ_δ is given by the effective stick-slip length for $10^3 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^7$.

Ra_L	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7	10^8
$< \mathrm{Nu}_r >$	1.0888	2.1005	4.1607	7.9304	14.2904	25.4061
$< \mathrm{Nu}_{(no\text{-}slip)} >$	1.0787	2.0856	4.1212	7.7668	13.6732	22.5516
$< \mathrm{Nu}_{\delta_1} >$	1.0738	2.0797	4.1085	7.7219	13.4858	21.8166
$< \mathrm{Nu}_{\delta_2} >$	1.0686	2.0716	4.0837	7.6151	13.0139	20.3128
$< \mathrm{Nu}_{\delta_3} >$	1.0578	2.0507	4.007	7.2935	11.8914	17.176356
$< \mathrm{Nu}_{\delta_4} >$	1.0223	1.9574	3.6572	6.072237	8.6836	10.9298

Table II.5: Average Nusselt number calculated on the hot wall. Comparison between the rough ($\star_r$ quantities) case and the effective ($\star_{(no\text{-}slip)}$ and $\star_{\delta_i}$ quantities) cases for $10^3 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^8$.

Ra_L	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7	10^8
$< \mathrm{Nu}_{(no\text{-}slip)} >$	0.9276	0.7094	0.9493	2.0620	4.3185	11.2357
$< \mathrm{Nu}_{eff} > (\delta_1)$	1.3740	0.9902	1.2541	2.6285	5.6300	14.1286
$< \mathrm{Nu}_{eff} > (\delta_2)$	1.8553	1.3759	1.8509	3.9749	8.7224	20.0475
$< \mathrm{Nu}_{eff} > (\delta_3)$	2.8472	2.3709	3.6771	8.0311	16.7870	32.3929
$< \mathrm{Nu}_{eff} > (\delta_4)$	6.1076	6.8127	24.034425	23.4305	39.2348	56.9797

Table II.6: Relative percentage error observed between $< \mathrm{Nu}_r >$ and $< \mathrm{Nu}_{eff} >$

The present study together with the one conducted by Veran *& al.* [149] lead us to think that such a position may be seen as the optimal position for laminar boundary flows over rough surfaces. It must be emphasized here that the optimum corresponds to a development with first-order approximations. Since the coupling surface is at first arbitrary, to some extent as discussed in the theoretical section, one may understand that the first-order corrections may be more or less accurate depending on the coupling surface location. Why is the suggested position optimum? In order to prove it, it will be interesting to tackle this question using higher order approximations. Equally, this result should also be checked in the case of more complex problems.

II.3.6 Conclusion

The purpose of this work was to develop suitable effective surface models for laminar flows with heat transfer over rough surfaces. A model problem of laminar natural convection flow over rough surfaces in the frame of the Boussinesq approximation has been considered and tackled by means of an up-scaling technique based on the concept of domain decomposition.

Such a method allows to build an approximated solution that results in effective boundary conditions prescribed on a smooth effective surface. The associated effective properties, namely the effective friction and heat transfer coefficients, have been obtained by solving two local closure problems. The first of two depends only on the roughness geometry. As far as the effective heat transfer coefficient is concerned, the impact of the flow properties on its value has been analyzed. The obtained results lead us to conclude that, in the laminar case, the flow has a limited impact on the effective heat transfer coefficient, which can be approximated for most cases by its value in the purely diffusive case.

The validity of the proposed effective boundary conditions have been assessed on a laminar natural convection problem in a stamp shaped cavity for a wide range of macro-scale Rayleigh numbers. A very good agreement between the direct and the effective simulations have been

obtained for Rayleigh number up to 10^7 while the proposed effective surface models fail to be down for higher Rayleigh numbers. The momentum and heat transfer are clearly altered by the location of the effective surface for which the optimal position is given by the effective length at which the momentum effective condition degenerates into a no-slip boundary condition (*i.e.* the effective stick-slip length). On the other hand, this optimal choice does not allow to get rid of the micro-scale in some particular cases. For instance, when different types of roughnesses are considered or when a surface involves both a smooth homogeneous part and a rough heterogeneous area [149], this approach implies the presence of a step in the transition region characterized by the micro-scale ℓ. However, this micro-scale step has a limited extent, compared to the area with roughnesses, thus giving still an advantage to the use of the optimal effective surface.

In the future, it will be interesting to extend this concept of effective surface models to more complex situations of practical interest involving for instance multiphase flows or/and ablation processes.

II.3.A Derivation of the closure problems for the momentum transfer problem

In this appendix, we present the developments leading to the closure problems **I** and **II** given by the equations (II.25) and (II.26). The first step consists in introducing the linear representation of the spatial deviation terms (II.24) into the Stokes-like problem (II.23) and collecting all terms proportional to the macro-scale terms $\mathbf{u}_{1,0}$ and $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$. In doing so, we obtain two closure problems in the following form

- **Problem I.** $\mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\nabla\mathbf{a}\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\nabla\mathbf{u}_{1,0}\cdot\mathbf{a}=\mu\nabla^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\mu\mathbf{A}\cdot\nabla^2\mathbf{u}_{1,0}+2\mu\nabla\mathbf{A}\cdot\nabla\mathbf{u}_{1,0}\quad\text{in }\Omega_i \tag{II.64a}$$
$$(\nabla\cdot\mathbf{A})\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\mathbf{A}^T:\nabla\mathbf{u}_{1,0}=0\quad\text{in }\Omega_i \tag{II.64b}$$
$$(\mathbf{A}+\mathbf{I})\cdot\mathbf{u}_{1,0}=\mathbf{0}\quad\text{on }\Gamma_{wi} \tag{II.64c}$$
$$\mathbf{n}_0\cdot\left[-(\mathbf{a}\cdot\mathbf{u}_{1,0})\,\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{A}\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\mu\mathbf{A}\cdot\nabla\mathbf{u}_{1,0}\right]=\mathbf{0}\quad\text{on}\,\Gamma_{0i} \tag{II.64d}$$
$$\mathbf{A}(x)=\mathbf{A}(x+\Delta x)\quad\text{on }\Gamma_{per} \tag{II.64e}$$
$$\mathbf{a}(x)=\mathbf{a}(x+\Delta x)\quad\text{on }\Gamma_{per} \tag{II.64f}$$

- **Problem II.** $\partial_y\mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\nabla\mathbf{b}\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\nabla\mathbf{u}_{1,0}\cdot\mathbf{b}=\mu\nabla^2\mathbf{B}\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\mu\mathbf{B}\cdot\nabla^2\mathbf{u}_{1,0}+2\mu\nabla\mathbf{B}\cdot\nabla\mathbf{u}_{1,0}\quad\text{in }\Omega_i \tag{II.65a}$$
$$(\nabla\cdot\mathbf{B})\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\mathbf{B}^T:\nabla\mathbf{u}_{1,0}=0\quad\text{in }\Omega_i \tag{II.65b}$$
$$(\mathbf{B}+y\mathbf{I})\cdot\mathbf{u}_{1,0}=\mathbf{0}\quad\text{on }\Gamma_{wi} \tag{II.65c}$$
$$\mathbf{n}_0\cdot\left[-(\mathbf{b}\cdot\mathbf{u}_{1,0})\,\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{B}\cdot\mathbf{u}_{1,0}+\mu\mathbf{B}\cdot\nabla\mathbf{u}_{1,0}\right]=\mathbf{0}\quad\text{on}\,\Gamma_{0i} \tag{II.65d}$$
$$\mathbf{B}(x)=\mathbf{B}(x+\Delta x)\quad\text{on }\Gamma_{per} \tag{II.65e}$$
$$\mathbf{b}(x)=\mathbf{b}(x+\Delta x)\quad\text{on }\Gamma_{per} \tag{II.65f}$$

Then, if we keep in mind that the spatial deviations are dominated by the length scale, ℓ, and the macro-scale terms by the length scale, L, we can obtain the following estimates

- **Problem I.** $\mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\mathcal{O}\left(\mathbf{A}\cdot\nabla^2\mathbf{u}_{1,0}\right)\ll\mathcal{O}\left(\nabla\mathbf{A}\cdot\nabla\mathbf{u}_{1,0}\right)\ll\mathcal{O}\left(\nabla^2\mathbf{A}\cdot\mathbf{u}_{1,0}\right) \tag{II.66a}$$
$$\mathcal{O}\left(\mathbf{A}^T:\nabla\mathbf{u}_{1,0}\right)\ll\mathcal{O}\left((\nabla\cdot\mathbf{A})\cdot\mathbf{u}_{1,0}\right) \tag{II.66b}$$
$$\mathcal{O}\left(\mathbf{A}\cdot\nabla\mathbf{u}_{1,0}\right)\ll\mathcal{O}\left(\nabla\mathbf{A}\cdot\mathbf{u}_{1,0}\right) \tag{II.66c}$$
$$\mathcal{O}\left(\nabla\mathbf{u}_{1,0}\cdot\mathbf{a}\right)\ll\mathcal{O}\left(\nabla\mathbf{a}\cdot\mathbf{u}_{1,0}\right) \tag{II.66d}$$

- **Problem II.** $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}\left(\mathbf{B}\cdot\nabla^2\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) &\ll \mathcal{O}\left(\nabla\mathbf{B}\cdot\nabla\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) \ll \mathcal{O}\left(\nabla^2\mathbf{B}\cdot\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) && \text{(II.67a)}\\
\mathcal{O}\left(\mathbf{B}^T:\nabla\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) &\ll \mathcal{O}\left((\nabla\cdot\mathbf{B})\cdot\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) && \text{(II.67b)}\\
\mathcal{O}\left(\mathbf{B}\cdot\nabla\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) &\ll \mathcal{O}\left(\nabla\mathbf{B}\cdot\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) && \text{(II.67c)}\\
\mathcal{O}\left(\nabla\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\cdot\mathbf{b}\right) &\ll \mathcal{O}\left(\nabla\mathbf{b}\cdot\partial_y\mathbf{u}_{1,0}\right) && \text{(II.67d)}
\end{aligned}$$

The use of these estimates in Eqs.(II.66c)-(II.67c) immediately leads to the following form of the closure problems

- **Problem I.** $\mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\nabla\mathbf{a} &= \mu\nabla^2\mathbf{A} \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.68a)}\\
\nabla\cdot\mathbf{A} &= \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.68b)}\\
\mathbf{A}+\mathbf{I} &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.68c)}\\
\mathbf{n}_0\cdot\left[-\mathbf{a}\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{A}\right] &= \mathbf{0} \quad \text{on}\,\Gamma_{0i} && \text{(II.68d)}\\
\mathbf{A}(x) &= \mathbf{A}(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.68e)}\\
\mathbf{a}(x) &= \mathbf{a}(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.68f)}
\end{aligned}$$

- **Problem II.** $\partial_y \mathbf{u}_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\nabla\mathbf{b} &= \mu\nabla^2\mathbf{B} \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.69a)}\\
\nabla\cdot\mathbf{B} &= \mathbf{0} \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.69b)}\\
\mathbf{B}+y\mathbf{I} &= \mathbf{0} \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.69c)}\\
\mathbf{n}_0\cdot\left[-\mathbf{b}\mathbf{I}+\mu\nabla\mathbf{B}\right] &= \mathbf{0} \quad \text{on}\,\Gamma_{0i} && \text{(II.69d)}\\
\mathbf{B}(x) &= \mathbf{B}(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.69e)}\\
\mathbf{b}(x) &= \mathbf{b}(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.69f)}
\end{aligned}$$

II.3.B Derivation of the closure problems for the heat transfer problem

In this appendix, our objective is to derive the closure problems **III** and **IV** for the mapping variables c and d. The procedure used here is similar to the one employed for the derivation of the closure problem **I** and **II**.

The first step consists in drawing upon the representation of the spatial deviation temperature given by (II.52) to obtain two closure problems in the form

- **Problem III.** $(T_{1,0}-T_w)$ mapping

$$\begin{aligned}
(T_w-T_{1,0})\,\mathbf{u}_2\cdot\nabla c+c\mathbf{u}_2\cdot\nabla\left(T_w-T_{1,0}\right) &= (T_w-T_{1,0})\,\kappa\nabla^2 c+\kappa c\nabla^2\left(T_w-T_{1,0}\right)\\
&+ 2\kappa\nabla c\cdot\nabla\left(T_w-T_{1,0}\right) \quad \text{in } \Omega_i && \text{(II.70a)}\\
\text{(BC1)}\quad (c-1)\left(T_w-T_{1,0}\right) &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.70b)}\\
\text{(BC2)}\quad (T_w-T_{1,0})\,\mathbf{n}\cdot\nabla c+c\mathbf{n}\cdot\nabla\left(T_w-T_{1,0}\right) &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} && \text{(II.70c)}\\
(T_w-T_{1,0})\,\mathbf{n}_0\cdot\nabla c+c\mathbf{n}_0\cdot\nabla\left(T_w-T_{1,0}\right) &= 0 \quad \text{on}\,\Gamma_{0i} && \text{(II.70d)}\\
c(x) &= c(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} && \text{(II.70e)}
\end{aligned}$$

- **Problem IV.** $\partial_y T_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\partial_y T_{1,0}\mathbf{u}_2\cdot\nabla d + d\mathbf{u}_2\cdot\nabla\left(\partial_y T_{1,0}\right) &= \partial_y T_{1,0}\kappa\nabla^2 d + \kappa d\nabla^2\left(\partial_y T_{1,0}\right) \\
&+ 2\kappa\nabla d\cdot\nabla\left(\partial_y T_{1,0}\right) \quad \text{in } \Omega_i \quad \text{(II.71a)} \\
\text{(BC1)} \quad (d+y)\,\partial_y T_{1,0} &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad \text{(II.71b)} \\
\text{(BC2)} \quad d\mathbf{n}\cdot\nabla\left(\partial_y T_{1,0}\right) + \partial_y T_{1,0}\mathbf{n}\cdot\nabla d + \mathbf{n}\cdot\nabla T_{1,0} &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad \text{(II.71c)} \\
\partial_y T_{1,0}\mathbf{n}_0\cdot\nabla d + d\mathbf{n}_0\cdot\nabla\left(\partial_y T_{1,0}\right) &= 0 \quad \text{on}\,\Gamma_{0i} \quad \text{(II.71d)} \\
d(x) &= d(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad \text{(II.71e)}
\end{aligned}$$

To obtain useful forms of these two closure problems, we estimate here the order of magnitude of the different terms in the equations Eqs.(II.70)-(II.71). In doing so, we find

- **Problem III.**

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}\left(\kappa c\nabla^2\left(T_w - T_{1,0}\right)\right) &\ll \mathcal{O}\left(2\kappa\nabla c\cdot\nabla\left(T_w - T_{1,0}\right)\right) \ll \mathcal{O}\left(\left(T_w - T_{1,0}\right)\kappa\nabla^2 c\right) \quad \text{(II.72a)} \\
\mathcal{O}\left(c\mathbf{u}_1\cdot\nabla\left(T_w - T_{1,0}\right)\right) &\ll \mathcal{O}\left(\left(T_w - T_{1,0}\right)\mathbf{u}_1\cdot\nabla c\right) \quad \text{(II.72b)} \\
\mathcal{O}\left(c\mathbf{n}\cdot\nabla\left(T_w - T_{1,0}\right)\right) &\ll \mathcal{O}\left(\left(T_w - T_{1,0}\right)\mathbf{n}\cdot\nabla c\right) \quad \text{(II.72c)}
\end{aligned}$$

- **Problem IV.**

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}\left(\kappa d\nabla^2\left(\partial_y T_{1,0}\right)\right) &\ll \mathcal{O}\left(2\kappa\nabla d\cdot\nabla\left(\partial_y T_{1,0}\right)\right) \ll \mathcal{O}\left(\partial_y T_{1,0}\kappa\nabla^2 d\right) \quad \text{(II.73a)} \\
\mathcal{O}\left(d\mathbf{u}_1\cdot\nabla\left(\partial_y T_{1,0}\right)\right) &\ll \mathcal{O}\left(\partial_y T_{1,0}\mathbf{u}_1\cdot\nabla d\right) \quad \text{(II.73b)} \\
\mathcal{O}\left(d\mathbf{n}\cdot\nabla\left(\partial_y T_{1,0}\right)\right) &\ll \mathcal{O}\left(\partial_y T_{1,0}\mathbf{n}\cdot\nabla d\right) \quad \text{(II.73c)}
\end{aligned}$$

At this stage, according to these estimates, the closure problems can be simplified in the form

- **Problem III.** $(T_{1,0} - T_w)$ mapping

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_1\cdot\nabla c &= \kappa\nabla^2 c \quad \text{in } \Omega_i \quad \text{(II.74a)} \\
\text{(BC1)} \quad c &= 1 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad \text{(II.74b)} \\
\text{(BC2)} \quad \mathbf{n}\cdot\nabla c &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad \text{(II.74c)} \\
\mathbf{n}_0\cdot\nabla c &= 0 \quad \text{on}\,\Gamma_{0i} \quad \text{(II.74d)} \\
c(x) &= c(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad \text{(II.74e)}
\end{aligned}$$

- **Problem IV.** $\partial_y T_{1,0}$ mapping

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_1\cdot\nabla d &= \kappa\nabla^2 d \quad \text{in } \Omega_i \quad \text{(II.75a)} \\
\text{(BC1)} \quad d &= -y \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad \text{(II.75b)} \\
\text{(BC2)} \quad \mathbf{n}\cdot\nabla d + \mathbf{n}\cdot\nabla T_{1,0} &= 0 \quad \text{on } \Gamma_{wi} \quad \text{(II.75c)} \\
\mathbf{n}_0\cdot\nabla d &= 0 \quad \text{on}\,\Gamma_{0i} \quad \text{(II.75d)} \\
d(x) &= d(x+\Delta x) \quad \text{on } \Gamma_{per} \quad \text{(II.75e)}
\end{aligned}$$

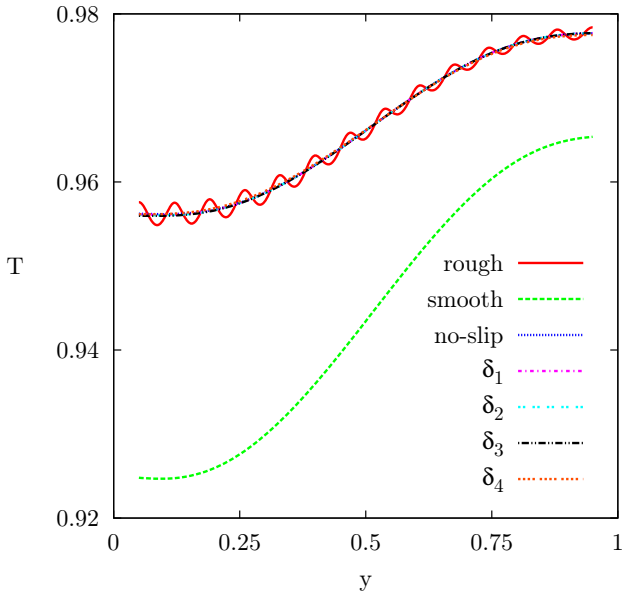
II.4 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de construire des conditions aux limites effectives pour des écoulements laminaires avec transferts de chaleur sur parois rugueuses dans le cadre de l'approximation de Boussinesq. Pour cela, nous avons considéré un problème modèle d'écoulement laminaire de convection naturelle et nous l'avons traité par une technique de changement d'échelle basée sur

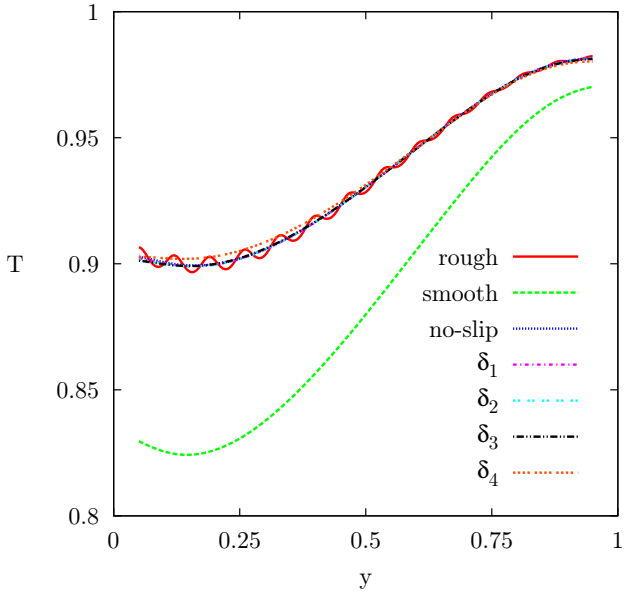
le concept de décomposition de domaine. Cette méthode a permis de construire une solution approchée à l'échelle des rugosités et de développer des conditions aux limites effectives qui sont imposées sur une surface effective lisse homogène. Les propriétés effectives associées, c'est-à-dire un coefficient de frottement et un coefficient de transfert de chaleur effectifs, sont obtenues en résolvant des problèmes de fermeture locaux sur un motif représentatif des rugosités. Les conditions effectives ont ensuite été testées sur un problème de convection naturelle dans une cavité rugueuse différentiellement chauffée et la qualité de l'approximation proposée a été estimée en comparant pour différents nombres de Rayleigh les calculs effectifs à des calculs directs tenant compte des rugosités. Enfin, une étude numérique a également été menée sur le problème générique important du positionnement de la surface effective.

Pour les applications multiphasiques visées, le travail présenté dans ce chapitre constitue une première étape dans le cadre d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges. Nous rappelons néanmoins que le problème considéré ici peut être vu comme un problème modèle pour la modélisation des aspects hétérogènes des bétons des réacteurs actuels et de nouvelle génération.

La première contribution de ce travail de thèse correspondant au problème du changement d'échelle a été abordée dans ce chapitre. Nous allons désormais nous intéresser à la seconde contribution de ce travail qui concerne la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation.

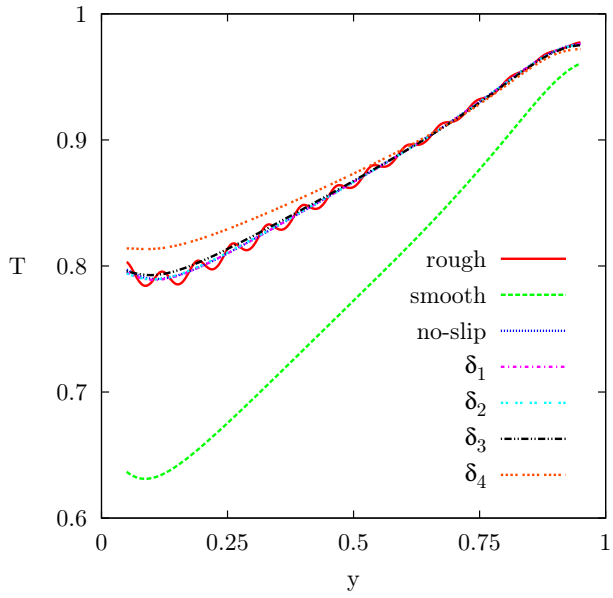


(a) $\mathrm{Ra}_L = 10^3$

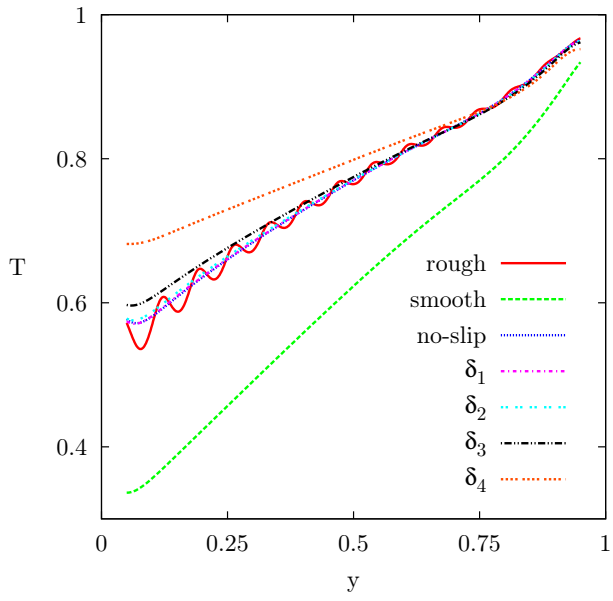


(b) $\mathrm{Ra}_L = 10^4$

Figure II.16: Comparison of the temperature profiles in the rough, smooth and effective cases on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^3$ (top) and $\mathrm{Ra}_L = 10^4$ (bottom).

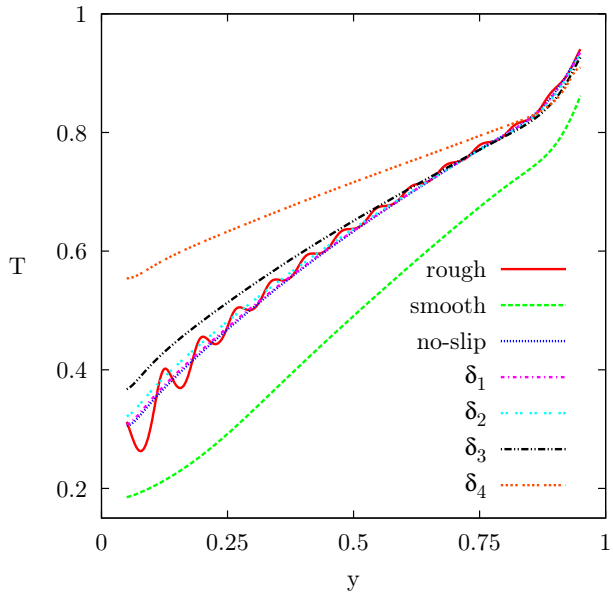


(a) $\mathrm{Ra}_L = 10^5$

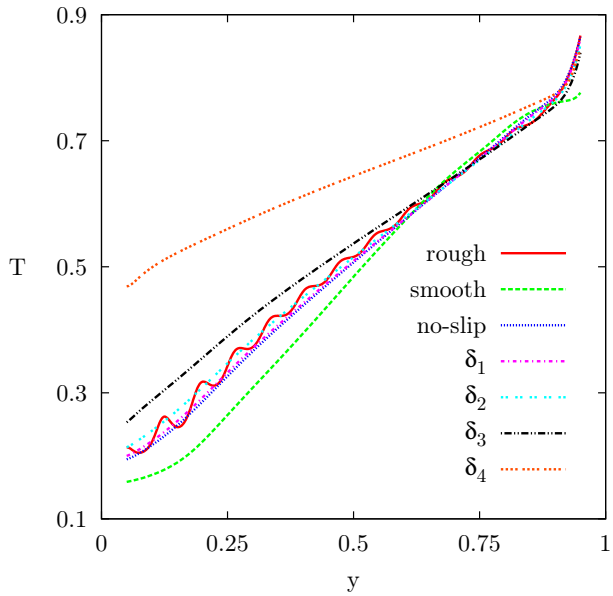


(b) $\mathrm{Ra}_L = 10^6$

Figure II.17: Comparison of the temperature profiles in the rough, smooth and effective cases on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^5$ (top) and $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ (bottom).

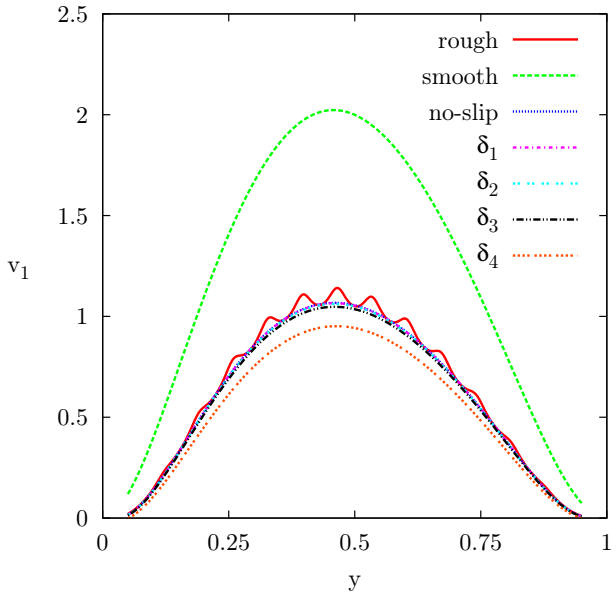


(a) $\mathrm{Ra}_L = 10^7$

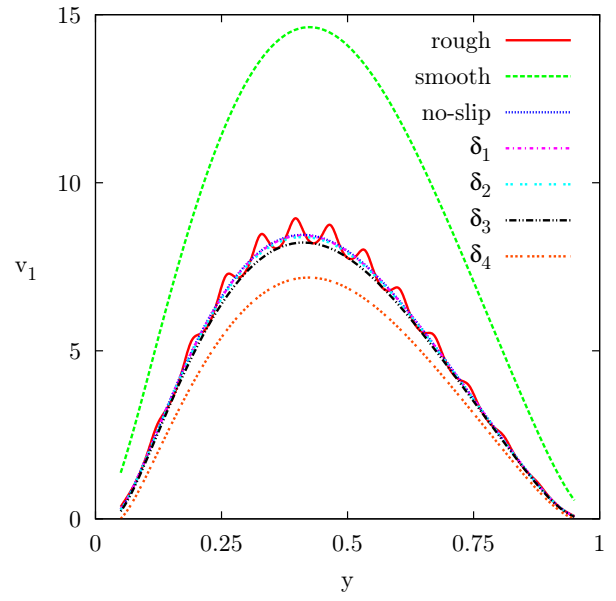


(b) $\mathrm{Ra}_L = 10^8$

Figure II.18: Comparison of the temperature profiles in the rough, smooth and effective cases on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^7$ (top) and $\mathrm{Ra}_L = 10^8$ (bottom).

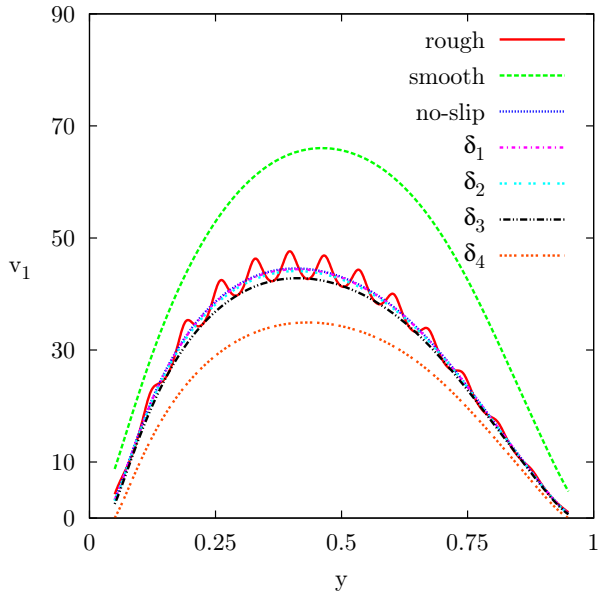


(a) $\mathrm{Ra}_L = 10^3$

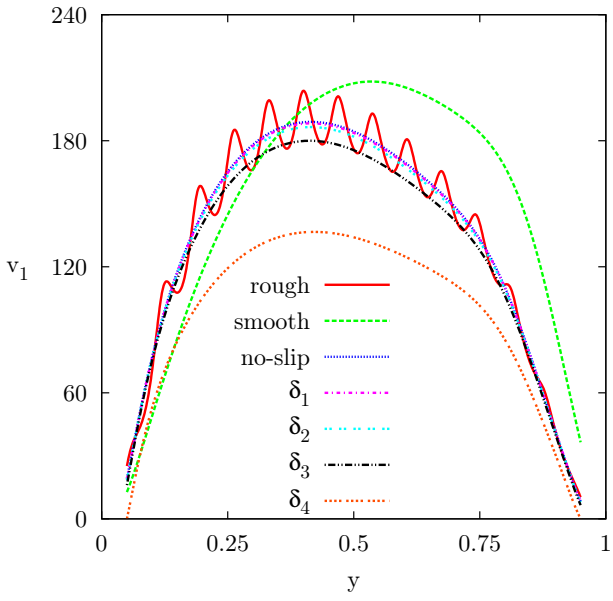


(b) $\mathrm{Ra}_L = 10^4$

Figure II.19: Comparison of the profiles of the y-component of the velocity field in the rough, smooth and effective cases on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^3$ (top) and $\mathrm{Ra}_L = 10^4$ (bottom).

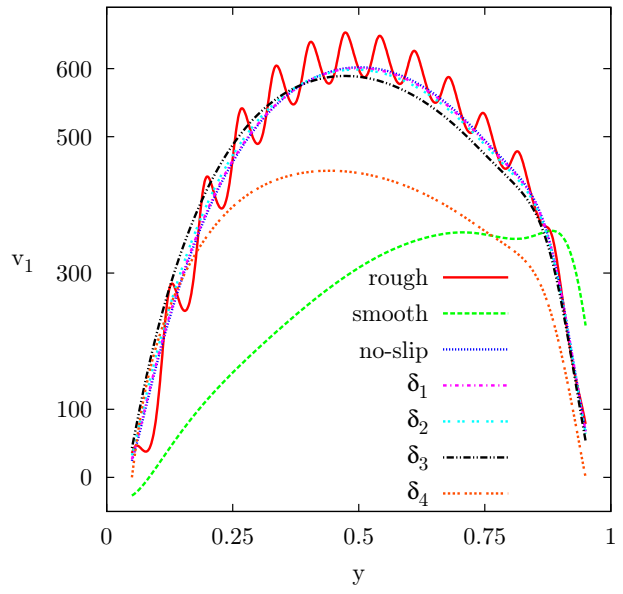


(a) $\mathrm{Ra}_L = 10^5$

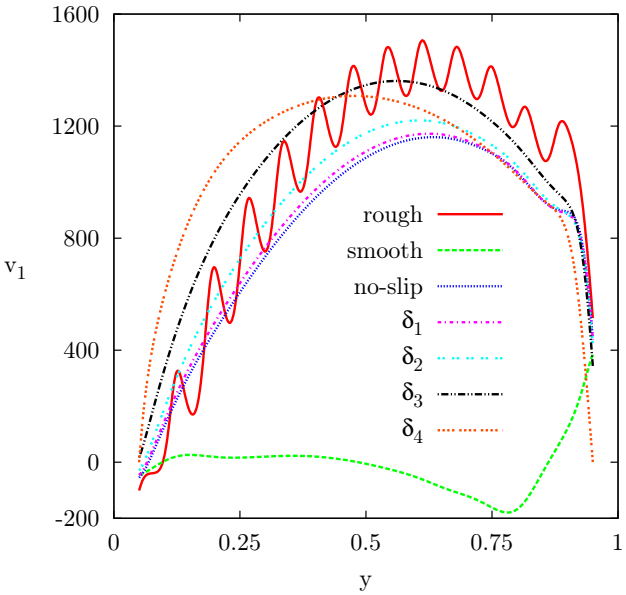


(b) $\mathrm{Ra}_L = 10^6$

Figure II.20: Comparison of the profiles of the y-component of the velocity field in the rough, smooth and effective cases on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^5$ (top) and $\mathrm{Ra}_L = 10^6$ (bottom).

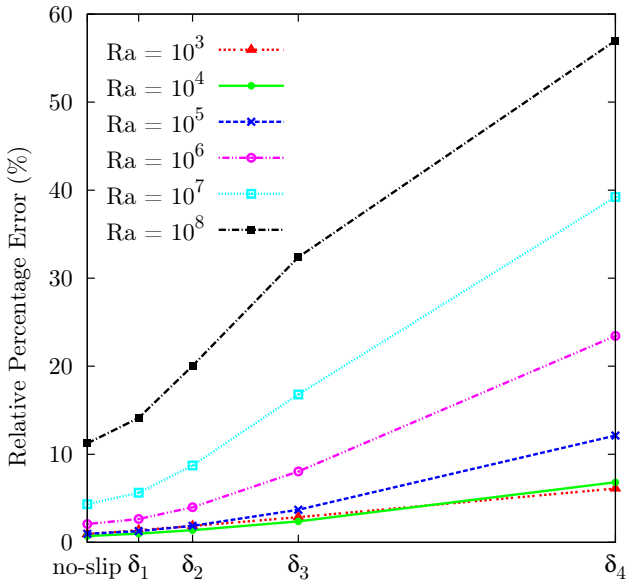


(a) $\mathrm{Ra}_L = 10^7$

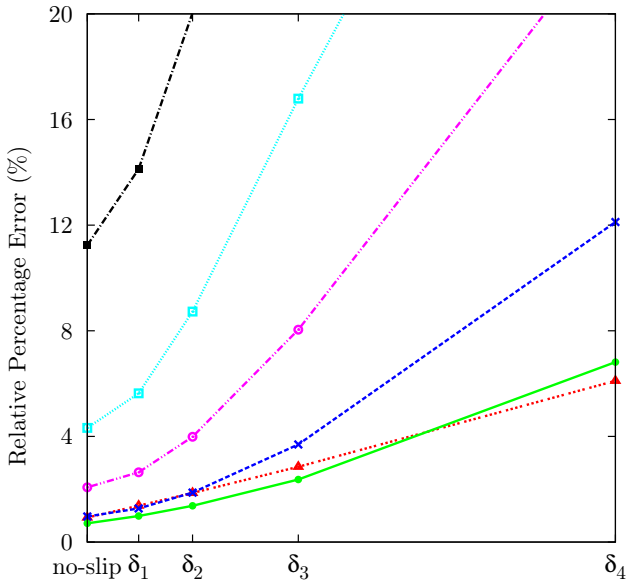


(b) $\mathrm{Ra}_L = 10^8$

Figure II.21: Comparison of the profiles of the y-component of the velocity field in the rough, smooth and effective cases on $x = \mathcal{A} + 5.10^{-2}$ for $\mathrm{Ra}_L = 10^7$ (top) and $\mathrm{Ra}_L = 10^8$ (bottom).



(a) interval error : $[0, 60]$



(b) (zoom) interval error : $[0, 20]$

Figure II.22: Relative error percentage observed between the averaged Nusselt number in the rough case $< \mathrm{Nu}_r >$ and the effective one $< \mathrm{Nu}_{eff} >$ for $10^3 \leq \mathrm{Ra}_L \leq 10^8$.

Chapitre III

Simulation numérique directe d'écoulements diphasiques compositionnels

Nous avons vu dans le chapitre d'introduction générale (I) que les modèles d'échange de chaleur proposés à l'échelle de description du code d'évaluation réacteur soulevaient de nombreuses questions, tant d'un point de vue de la description adoptée de la couche limite que des aspects multi-échelle couplant les échanges au front d'ablation et l'écoulement dans le puits de cuve. Dans ce contexte, nous avons présenté la stratégie de description et de modélisation multi-échelle dans laquelle s'inscrit ce travail. Nous avons, en particulier, présenté le problème du changement d'échelle et le problème de la description locale de l'écoulement multiphasique. Le problème du changement d'échelle a été abordé dans le chapitre précédent (II) dans le cadre de la construction de conditions aux limites effectives pour un problème modèle d'écoulements laminaires anisothermes sur des parois rugueuses. Dans le cas plus complexe des écoulements multiphasiques, la première étape est de disposer d'un outil de simulation numérique directe à l'échelle du front d'ablation pour, d'une part, avoir accès à la structure de la couche limite difficilement accessible par l'expérience et mener une analyse critique des différents modèles proposés et, d'autre part, construire une solution approchée du problème à la petite échelle pour le développement de conditions aux limites effectives pour les outils existants aux échelles de description supérieures.

Ce chapitre est consacré à la construction d'un outil de simulation numérique directe qui sera utilisé dans le chapitre (IV) pour l'étude de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation. On s'intéresse ici à la construction d'un modèle de Cahn-Hilliard pour la simulation d'écoulements diphasiques incompressibles sans changement de phase dont l'une des deux phases est constituée de deux espèces miscibles. Nous renvoyons le lecteur au chapitre d'introduction générale pour les motivations conduisant à cette classe d'écoulements diphasiques compositionnels ainsi qu'au choix de la méthode.

Le modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel proposé s'appuie sur une description du système selon trois paramètres d'ordre associés respectivement aux fractions volumiques du gaz et des deux espèces miscibles de la phase liquide. Les équations de transport du modèle sont obtenues dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles selon deux contraintes. La première contrainte, commune aux différents modèles multiphasiques proposés, impose que la somme des paramètres d'ordre vaille un à chaque instant et en tout point. La deuxième contrainte, spécifique à la classe d'écoulements étudiés, est associée à la définition de la vitesse de mélange. On adopte ici une définition classique pour la partie purement compositionnelle, correspondant à une moyenne barycentrique de la vitesse du mélange pondérée par les masses volumiques, alors que la définition de la vitesse du mélange dans le cas purement diphasique correspond à une moyenne volumique

permettant dans ce cas de conserver une vitesse de mélange à divergence nulle. Le modèle s'appuie également sur une décomposition originale de l'énergie libre selon une contribution diphasique et une contribution compositionnelle. Selon cette décomposition, le modèle proposé dégénère bien vers un modèle de Cahn-Hilliard diphasique lorsque l'un des constituants liquides est absent et vers un modèle de diffusion massique lorsque la phase non-miscible est absente.

Après avoir rappelé dans la première partie l'élaboration d'un modèle de Cahn-Hilliard diphasique (*cf.* (III.1)), nous présentons dans la deuxième partie la construction d'un modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel (*cf.* (III.2)). Comme les modèles de type Cahn-Hilliard sont basés sur une modélisation diffuse des interfaces, nous devons nous assurer que le modèle proposé converge bien vers le modèle dit "sharp" correspondant à une description classique des interfaces, c'est-à-dire lorsqu'elles sont assimilées à des surfaces de discontinuité douées de propriétés en excès telle que la tension de surface. Pour cela, nous réalisons une analyse asymptotique dite "sharp" dans le cadre de la méthode des développements asymptotiques raccordés et nous présentons l'ensemble des développements dans l'annexe (A).

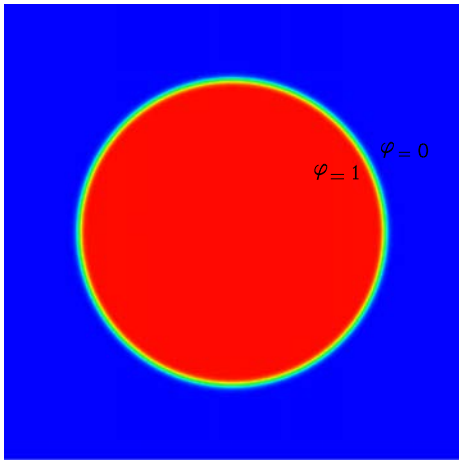
A partir du modèle proposé, nous proposons dans la partie (III.3) un schéma de discrétisation en temps et en espace dans un contexte éléments finis dans le cadre de l'approximation de Galerkin. Nous présentons ensuite dans la partie (III.4) une méthode de stabilisation par viscosité entropique et nous renvoyons le lecteur au chapitre d'introduction (*cf.* (I)) pour une discussion sur les liens avec les méthodes de simulation des grandes échelles pour les problèmes à interfaces. La partie (III.5) est consacré au traitement numérique des conditions aux limites de sortie pour les modèles de type Cahn-Hilliard. Il s'agit dans cette partie de proposer une solution qui permette d'améliorer le comportement des interfaces en sortie du domaine de calcul. Enfin, nous présentons dans la dernière partie de ce chapitre (*cf.* (III.6)) des expériences numériques permettant, d'une part, de valider l'outil de simulation numérique directe développé au travers des précédentes parties et, d'autre part, de montrer ses potentialités d'applications sur des problèmes complexes.

III.1 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique

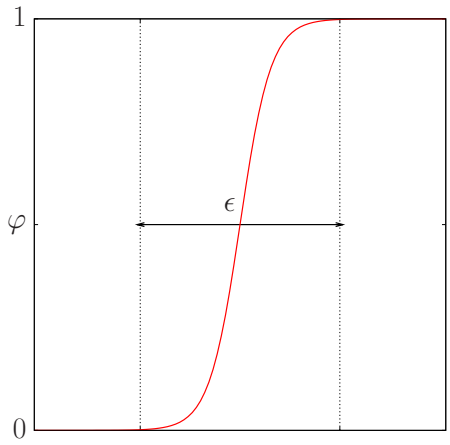
Dans cette partie, on se propose de donner une brève description d'un modèle de Cahn-Hilliard pour deux constituants (ou phases) non miscibles. Ce rappel a pour but d'introduire la démarche qui sera utilisée dans la section (III.2) pour le développement d'un modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel.

Une modélisation de type Cahn-Hilliard pour un système diphasique consiste à décrire les deux phases du système au travers d'une indicatrice de phase régularisée φ appelée paramètre d'ordre. Comme l'indicatrice de phase, le paramètre d'ordre prend les valeurs 0 et 1 dans les phases mais varie continûment au travers de l'interface sur une longueur caractéristique ϵ (*cf.* Fig.III.1). Les modèles de Cahn-Hilliard ou, plus généralement, les méthodes à interface diffuse consistent à modéliser les interfaces comme des zones de transition volumique de longueur caractéristique ϵ au travers desquelles les propriétés des fluides (*e.g.* densité, viscosité, ...) varient brusquement mais continûment. Si, pour des systèmes diphasiques avec changement de phase, le paramètre d'ordre peut ne pas avoir de réelle signification physique (*e.g.* [131]), il est généralement associé à une fraction massique ou à une fraction volumique pour des systèmes sans changement de phase. On cite ici en particulier le modèle proposé par Lowengrub et Truskinovsky [110] dans le cas où la fraction massique joue le rôle de paramètre d'ordre et les modèles proposés par Antanovskii [7], Boyer [22] ou encore Chupin et Jamet [88] dans le cas où c'est la fraction volumique qui joue le rôle de paramètre d'ordre. Dans le cas où les deux phases ont la même densité ou dans le cadre d'une approximation de type Boussinesq, ces modèles sont formellement identiques et se réduisent au modèle proposé par Jacqmin [85].

De notre point de vue, le choix d'une fraction volumique comme paramètre d'ordre semble



(a) Exemple de modélisation d'une bulle de gaz ($\varphi = 1$) à l'équilibre dans un liquide ($\varphi = 0$)



(b) Profil du paramètre d'ordre φ à travers l'interface

Fig. III.1: Evolution du paramètre d'ordre φ pour un système diphasique.

être mieux adapté pour la résolution numérique, essentiellement en raison des non-linéarités dans les équations de Cahn-Hilliard et de Navier-Stokes dues à la masse volumique du mélange [110]. Nous choisissons donc ici la fraction volumique comme paramètre d'ordre et nous donnons ici, une brève description d'un modèle diphasique qui présente de plus l'avantage d'une vitesse de mélange à divergence nulle comme les autres méthodes de simulation numérique directe (*e.g.* VOF [20, 81], Level-Set [64, 140], Front-Tracking [145, 146]). Nous rappelons ici la définition de la vitesse de mélange proposée par Boyer [22] et le modèle de Cahn-Hilliard diphasique obtenu par Jamet et Chupin [88] dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles.

Pour décrire l'évolution d'un mélange diphasique, on introduit deux paramètres d'ordre φ_1 et φ_2 correspondant aux fractions volumiques des fluides dans le mélange et vérifiant la relation suivante

$$\varphi_1 + \varphi_2 = 1 \tag{III.1}$$

Cette relation, commune aux différents modèles diphasiques proposés, peut être vue comme une relation de compatibilité classique associée à la loi de mélange idéale sans volume de mélange en excès. A partir de (III.1), on posera par la suite $\varphi = \varphi_1 = 1 - \varphi_2$. Chaque phase est supposée incompressible de densité ϱ_i constante. La densité du mélange, notée ρ, dépend des paramètres d'ordre φ_1 et φ_2 et s'écrit

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 \tag{III.2}$$

où $\rho_1 = \varrho_1\varphi_1$ et $\rho_2 = \varrho_2\varphi_2$ sont les densités des fluides dans le mélange appelées également densités partielles. On suppose également que chaque phase i possède une vitesse propre, notée $\mathbf{u}_i$, à divergence nulle. Les équations de conservation de la masse de chaque fluide sont données par

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{u}_1) = 0 \tag{III.3a}$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_2 \mathbf{u}_2) = 0 \tag{III.3b}$$

On choisit ici de définir la vitesse du mélange, notée $\mathbf{u}$, comme la moyenne volumique des vitesses propres de chaque phase, c'est-à-dire

$$\mathbf{u} = \varphi_1 \mathbf{u}_1 + \varphi_2 \mathbf{u}_2 \tag{III.4}$$

Nous verrons plus loin que l'intérêt d'une telle définition, en comparaison de la vitesse barycentrique, est que la vitesse du mélange reste à divergence nulle. A partir de la relation (III.4), on peut écrire

$$\mathbf{u}_1 - \mathbf{u} = \varphi_2 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \tag{III.5a}$$
$$\mathbf{u}_2 - \mathbf{u} = -\varphi_1 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) \tag{III.5b}$$

En utilisant les relations (III.5) puis en divisant (III.3a) par ϱ_1 et (III.3b) par ϱ_2, les équations (III.3) s'écrivent sous la forme

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_1 \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{j} \tag{III.6a}$$
$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_2 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \mathbf{j} \tag{III.6b}$$

où $\mathbf{j} = \varphi_1 \varphi_2 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2)$ désigne un flux de diffusion. A partir des équations (III.6), on peut montrer que la vitesse du mélange est à divergence nulle. En effet, en sommant les équations (III.6a) et (III.6b) on obtient

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{III.7}$$

En revanche, cette vitesse ne permet pas de satisfaire le bilan de masse standard. En effet, en multipliant l'équation (III.6a) par ϱ_1 et l'équation (III.6b) par ϱ_2 puis en sommant les relations obtenues, on obtient

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \nabla \cdot [(\varrho_2 - \varrho_1) \mathbf{j}] \tag{III.8}$$

En utilisant (III.7) dans les équations (III.6), l'équation d'évolution pour le paramètre d'ordre φ s'écrit finalement

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{j} \tag{III.9}$$

où $d(\cdot)/dt = \partial(\cdot)/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla(\cdot)$ représente la dérivée particulaire. L'expression du flux de diffusion $\mathbf{j}$ peut être obtenue par différentes méthodes (*e.g.* Thermodynamique des Processus Irréversibles [72], méthode de flot de gradient [106], équations de Maxwell-Stefan [22]). Dans chacune de ces méthodes, la donnée de l'énergie libre du système $\mathcal{F}$ (dans la cas isotherme) est nécessaire aux développements. On adopte généralement l'expression suivante

$$\mathcal{F} = \int_V AW(\varphi) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \varphi|^2 dV \tag{III.10}$$

Les coefficients λ (appelé *coefficient de capillarité*) et A dépendent de *la tension de surface* σ et de *l'épaisseur d'interface* ϵ qui sont deux propriétés intrinsèques des modèles de Cahn-Hilliard. La tension de surface, correspondant à l'excès d'énergie libre à travers l'interface [130], est donnée pour une interface plane à l'équilibre par

$$\sigma = \mathcal{F}^{ex} = \int_{\mathbb{R}} \lambda \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 dx \tag{III.11}$$

Le premier terme, $W(\varphi)$, dans la relation (III.10) est une énergie volumique. Dans le cas d'un système de deux phases non miscibles, ce terme modélise l'immiscibilité entre les phases. Le second terme $\lambda |\nabla \varphi|^2 / 2$ (appelé *terme capillaire*) correspond à une énergie interfaciale. La compétition entre ces deux termes permet de conserver une interface d'épaisseur finie, ce qui constitue une des caractéristiques des modèles de Cahn-Hilliard. Dans la littérature, le potentiel de Cahn-Hilliard est donné soit sous forme logarithmique (*e.g.* [21, 46]) soit sous forme polynomiale (*e.g.* [22]). Il

possède une structure en double puits avec deux minima, en $\varphi = 0$ et en $\varphi = 1$, correspondant aux phases pures (*cf.* Fig.III.2). Sous forme logarithmique, $W(\varphi)$ s'écrit

$$W(\varphi) = \varphi \ln(\varphi) + (1-\varphi)\ln(1-\varphi) + \chi\varphi(1-\varphi) \tag{III.12}$$

Le coefficient χ dans la relation (III.12) modélise l'interaction entre les phases. Par exemple, pour un mélange constitué de deux phases totalement miscibles, il n'y a pas d'interaction. Dans ce cas, le coefficient χ est nul et $W(\varphi)$ est strictement convexe (*cf.* Fig.III.2). Par contre, un mélange est composé de deux phases non miscibles si $\chi > 2$ (*cf.* Fig.III.2) et de deux phases partiellement miscibles si $\chi \in [0, 2[$.

La forme polynomiale correspond à une approximation de la forme logarithmique. Elle est classiquement définie par

$$W(\varphi) = \varphi^2 (1-\varphi)^2 \tag{III.13}$$

A partir de cette expression, on peut montrer que le profil du paramètre d'ordre au travers d'une interface plane à l'équilibre est donné par (*cf.* Fig.III.2)

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad \varphi(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(\sqrt{\frac{2A}{\lambda}}x\right) \tag{III.14}$$

où $A = 12\sigma/\epsilon$ et $\lambda = 3\sigma\epsilon/2$. Dans ces conditions, l'équation d'évolution pour φ s'écrit [85]

$$\frac{d\varphi}{dt} = \nabla \cdot (M_0 \nabla \tilde{\mu}) \tag{III.15a}$$

$$\tilde{\mu} = 12\frac{\sigma}{\epsilon}W'(\varphi) - \frac{3}{2}\sigma\epsilon\nabla^2\varphi \tag{III.15b}$$

où $\tilde{\mu}$ désigne le potentiel chimique, dit *généralisé*, du mélange et M_0 est un coefficient de diffusion appelé *mobilité*. Les équations (III.15) sont appelées *équations de Cahn-Hilliard*.

Pour prendre en compte l'hydrodynamique du système, ces équations sont couplées aux équations de Navier-Stokes (*e.g.* [22, 85, 88, 100, 106])

$$\rho(\varphi)\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\eta(\varphi)\left(\nabla\mathbf{u} + \nabla^T\mathbf{u}\right)\right] - \nabla \cdot \left(\frac{3}{2}\sigma\epsilon\nabla\varphi \otimes \nabla\varphi\right) + \rho\mathbf{g} \tag{III.16a}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{III.16b}$$

où la viscosité dynamique $\eta(\varphi)$ dépend également du paramètre d'ordre et $3\sigma\epsilon/2\nabla\varphi \otimes \nabla\varphi$ est un tenseur, appelé *tenseur de Korteweg* ou *tenseur de capillarité*, modélisant les effets des forces capillaires. Dans [88], Jamet et Chupin proposent une variante de ce modèle dérivée dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles. Dans cette version, le potentiel chimique généralisé $\tilde{\mu}$ est donné par

$$\tilde{\mu} = 12\frac{\sigma}{\epsilon}W'(\varphi) - \frac{3}{2}\sigma\epsilon\nabla^2\varphi + \frac{d\rho}{d\varphi}\frac{\mathbf{u}^2}{2} \tag{III.17}$$

Des extensions dans le cas multiphasique multiconstituant ont été proposées, comme, par exemple, le modèle de Cahn-Hilliard pour un système de trois phases non miscibles développé par Lapuerta *& al.* [26, 106], ou encore le modèle triphasique proposé par Kim et Lowengrub [100].

En revanche, à notre connaissance, il n'existe pas de modèles à interface diffuse pour des systèmes diphasiques compositionnels. On peut néanmoins citer les travaux de Kim [99] et Park *& al.* [121] pour des mélanges partiellement ou totalement miscibles où le terme en bi-laplacien dans l'équation du paramètre d'ordre est assimilé à un terme de diffusion.

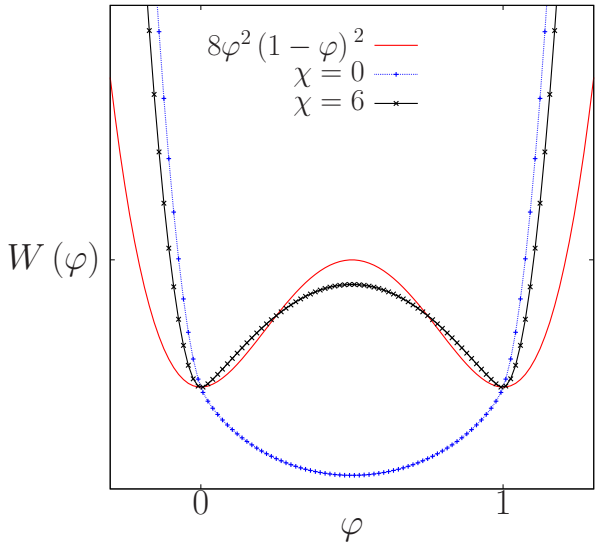


Fig. III.2: Formes logarithmique et polynomiale du potentiel de Cahn-Hilliard.

III.2 Modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel

On présente dans cette partie un modèle de Cahn-Hilliard pour un mélange de deux phases non miscibles où l'une des phases est constituée de deux espèces (ou constituants) complètement miscibles. Nous supposons ici que les tensions de surface entre chacune des espèces miscibles et la phase non miscible sont identiques. Cette hypothèse n'est pas restrictive en vue des applications que nous souhaitons traiter étant donné les incertitudes associées à l'estimation des tensions de surface pour un mélange corium béton fondu. Nous indiquons néanmoins comment deux tensions de surface peuvent être prises en compte dans le développement du modèle.

Comme pour le modèle de Cahn-Hilliard diphasique présenté précédemment, nous supposons que les densités des fluides en présence sont constantes et que les fractions volumiques jouent le rôle des paramètres d'ordre. Nous choisissons également de définir une vitesse de mélange sur la base d'une moyenne volumique. L'intérêt de ce choix réside dans le fait que, lorsqu'une des phases miscibles est absente, on retrouve une vitesse de mélange diphasique à divergence nulle comme les autres méthodes de simulation numérique directe (*e.g.* VOF [81, 20], Level-Set [140, 64], Front-Tracking [145, 146]). En revanche, la vitesse du mélange constitué par les deux espèces miscibles est construite de manière classique sur la base d'une moyenne barycentrique.

III.2.1 Description du système et hypothèses

Pour décrire l'évolution du mélange, on introduit trois paramètres d'ordre φ_1, φ_2 et φ_3 correspondant aux fractions volumiques des fluides dans le mélange. Le système diphasique est associé au couple $(\varphi_1, \varphi_2 + \varphi_3)$ tandis que le couple (φ_2, φ_3) décrit le système compositionnel. Pour fixer les idées, le paramètre d'ordre φ_1 fait référence au gaz, φ_2 au corium et φ_3 au béton fondu. En négligeant à nouveau le volume de mélange en excès, les paramètres d'ordre vérifient la relation

$$\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 = 1 \tag{III.18}$$

Chaque phase (ou constituant) est supposée incompressible de densité constante ϱ_i. La densité du mélange est donnée par

$$\rho = \rho_1 + \rho_{2,3} \tag{III.19}$$

où $\rho_{2,3} = \rho_2 + \rho_3$ désigne la densité de liquide dans le mélange et $\rho_i = \varrho_i \varphi_i$ la densité partielle du constituant i. Les équations de conservation de la masse des trois constituants s'écrivent

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_1 \mathbf{u}_1) = 0 \tag{III.20a}$$
$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_2 \mathbf{u}_2) = 0 \tag{III.20b}$$
$$\frac{\partial \rho_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_3 \mathbf{u}_3) = 0 \tag{III.20c}$$

où $\mathbf{u}_i$ désigne la vitesse propre, à divergence nulle, de la phase i. On choisit ici de définir la vitesse du mélange du liquide, notée $\mathbf{u}_{2,3}$ comme la moyenne barycentrique des vitesses propres de chaque constituant liquide, c'est-à-dire

$$\rho_{2,3}\mathbf{u}_{2,3} = \rho_2\varphi_2\mathbf{u}_2 + \rho_3\varphi_3\mathbf{u}_3 \tag{III.21}$$

L'intérêt de ce choix est double. Tout d'abord, il permet de conserver la masse de liquide dans le mélange. En effet, en sommant les équations (III.20b) et (III.20c) il vient

$$\frac{\partial \rho_{2,3}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{2,3}\mathbf{u}_{2,3}) = 0 \tag{III.22}$$

Ensuite, il justifie pleinement l'utilisation d'une loi de Fick pour modéliser les effets compositionnels dans le liquide (*cf.* section (III.2.4)). En revanche, comme pour le modèle de Cahn-Hilliard diphasique, la vitesse du mélange $\mathbf{u}$ est définie comme la moyenne volumique de la vitesse du gaz $\mathbf{u}_1$ et de la vitesse du liquide $\mathbf{u}_{2,3}$, c'est-à-dire

$$\mathbf{u} = \varphi_1 \mathbf{u}_1 + (1 - \varphi_1)\, \mathbf{u}_{2,3} \tag{III.23}$$

Une telle expression permet, d'une part, de retrouver une vitesse de mélange à divergence nulle lorsqu'un des deux constituants liquides est absent et, d'autre part, de conserver la masse de liquide dans le mélange. En effet, la vitesse du mélange (III.23) vérifie les propriétés de consistance suivantes

$$(\varphi_1 = 0) \ : \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_{2,3} \tag{III.24a}$$
$$(\varphi_2 = 0) \ : \quad \mathbf{u} = \varphi_1 \mathbf{u}_1 + (1 - \varphi_1)\, \mathbf{u}_3 \tag{III.24b}$$
$$(\varphi_3 = 0) \ : \quad \mathbf{u} = \varphi_1 \mathbf{u}_1 + (1 - \varphi_1)\, \mathbf{u}_2 \tag{III.24c}$$

A partir des relations (III.21) et (III.23), on peut écrire

$$\mathbf{u}_1 - \mathbf{u} = (1 - \varphi_1)\, (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_{2,3}) \tag{III.25a}$$
$$\mathbf{u}_2 - \mathbf{u} = \frac{\varrho_3\varphi_3}{\rho_{2,3}} \left[(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_{2,3}) - (\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_{2,3}) \right] - \varphi_1\, (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_{2,3}) \tag{III.25b}$$
$$\mathbf{u}_3 - \mathbf{u} = -\frac{\varrho_2\varphi_2}{\rho_{2,3}} \left[(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_{2,3}) - (\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_{2,3}) \right] - \varphi_1\, (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_{2,3}) \tag{III.25c}$$

où $(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_{2,3})$ et $(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_{2,3})$ pour $i = 2, 3$ désignent, d'une part, la vitesse relative entre le liquide et le gaz et, d'autre part, les vitesses de diffusion barycentriques associées aux liquides. En divisant les équations de conservation (III.20b) par ϱ_i puis en utilisant les relations (III.25), on obtient

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_1 \mathbf{u}) = -\frac{1}{\varrho_1} \nabla \cdot \mathbf{j}_1 \tag{III.26a}$$
$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_2 \mathbf{u}) = -\frac{1}{\varrho_2} \nabla \cdot \mathbf{j}_2 \tag{III.26b}$$
$$\frac{\partial \varphi_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_3 \mathbf{u}) = -\frac{1}{\varrho_3} \nabla \cdot \mathbf{j}_3 \tag{III.26c}$$

où les flux $\mathbf{j}_1$, $\mathbf{j}_2$ et $\mathbf{j}_3$ sont donnés par

$$\mathbf{j}_1 = \varrho_1 (1-\varphi_1) \varphi_1 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_{2,3}) \tag{III.27a}$$

$$\mathbf{j}_2 = \frac{\varrho_2 \varrho_3}{\rho_{2,3}} \varphi_2 \varphi_3 [(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_{2,3}) - (\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_{2,3})] - \rho_2 \varphi_1 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_{2,3}) \tag{III.27b}$$

$$\mathbf{j}_3 = -\frac{\varrho_2 \varrho_3}{\rho_{2,3}} \varphi_2 \varphi_3 [(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_{2,3}) - (\mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_{2,3})] - \rho_3 \varphi_1 (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_{2,3}) \tag{III.27c}$$

Ces flux ne sont pas indépendants et vérifient la relation

$$\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 = (1-\kappa)\, \mathbf{j}_1 \tag{III.28}$$

où $\kappa = \rho_{2,3} / (\varrho_1 - \rho_1)$. D'après les équations (III.20), le bilan de masse du mélange s'écrit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \sum_{i=1}^{3} \mathbf{j}_i \tag{III.29}$$

Soit, à partir de la relation (III.28)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = -\nabla \cdot [(1-\kappa)\, \mathbf{j}_1] \tag{III.30}$$

III.2.2 Fermeture thermodynamique

On rappelle ici que chaque phase est supposée incompressible. En particulier, pour chaque phase i, la densité ne dépend pas de la pression p_i. Dans ce cas, la transformation de Legendre reliant l'énergie de Helmholtz à l'énergie de Gibbs devient dégénérée et l'application $(p_i, T_i) \mapsto (\rho_i, T_i)$ n'est plus bijective [110, 131]. En revanche, une description thermodynamique à partir de l'énergie libre de Gibbs $g_i(p_i, T_i)$ reste encore valable dans ce cas [110, 131]. On suppose ici pour simplifier qu'il existe une seule pression et une seule température pour le mélange, c'est-à-dire $p_i = p$ et $T_i = T$ pour $i = 1, 2, 3$. Dans ce cas, $g_i(p_i, T_i) = g_i(p, T)$ et la différentielle dg_i est donnée par

$$dg_i = \frac{1}{\varrho_i} dp + s_i dT \tag{III.31}$$

avec

$$\frac{1}{\varrho_i} = \left(\frac{\partial g_i}{\partial p} \right)_T \tag{III.32a}$$

$$s_i = -\left(\frac{\partial g_i}{\partial T} \right)_p \tag{III.32b}$$

Puisque ϱ_i ne dépend pas de la pression p, la relation (III.32a) montre que l'énergie de Gibbs $g_i(p, T)$ doit vérifier la relation

$$\left(\frac{\partial^2 g_i}{\partial p^2} \right)_T = 0 \tag{III.33}$$

Les énergies de Gibbs des phases dans le mélange sont donc des fonctions linéaires de la pression et s'écrivent sous la forme

$$g_i(p, T) = \frac{p}{\varrho_i} + a_i(T) \tag{III.34}$$

où $a_i(T)$ est une constante d'intégration reliée à l'entropie par la relation (III.32b). Nous reviendrons ultérieurement sur les fonctions $a_i(T)$ lors de l'étude de l'équation d'évolution pour la température du mélange.

A partir de la donnée des énergies de Gibbs g_i des phases pures dans le mélange, l'énergie libre de Gibbs g du mélange s'écrit sous la forme générale

$$\rho g\left(p,T,\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\right)=\sum_{i=1}^{3}\rho_i g_i\left(p,T\right)+\Delta G\left(p,T,\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\right) \tag{III.35}$$

où ΔG est communément appelée l'énergie libre en excès en thermodynamique classique. On rappelle que le volume en excès du mélange est négligé de sorte que

$$\rho=\varrho_1\varphi_1+\varrho_2\varphi_2+\varrho_3\varphi_3 \tag{III.36}$$

Dans ce cas, ΔG ne dépend pas de la pression p. Nous supposons également ici pour simplifier que ΔG ne dépend pas de la température T. Enfin, dans le cadre d'une modélisation diffuse des interfaces, la contribution ΔG de l'énergie libre de Gibbs g dépend non seulement des paramètres d'ordres mais aussi de leur gradient, et on posera par la suite

$$\Delta G=W\left(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\right)+\mathcal{K}\left(\nabla\varphi_1,\nabla\varphi_2,\nabla\varphi_3\right) \tag{III.37}$$

Le terme $W\left(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\right)$ modélise les propriétés de miscibilité et d'immiscibilité entre les phases et $\mathcal{K}\left(\nabla\varphi_1,\nabla\varphi_2,\nabla\varphi_3\right)$ correspond aux effets capillaires. Ces effets ne s'appliquent pas pour les mélanges d'espèces miscibles. Néanmoins, un phénomène transitoire similaire aux effets de tensions de surface a été observé expérimentalement dans les premiers instants du mélange de deux espèces miscibles caractérisé par une faible diffusion massique (*e.g.* [117] pour des mélanges silicatés). Compte tenu des questions associées à la modélisation de ces effets transitoires [93], ce concept de tension de surface effective ne sera pas pris en compte dans la dérivation du modèle. Dans ces conditions, puisque nous avons également supposé que les tensions de surface entre chacune des espèces miscibles et la phase non miscible sont identiques, on propose par analogie au cas diphasique la fermeture suivante

$$\mathcal{K}\left(\nabla\varphi_1,\nabla\varphi_2,\nabla\varphi_3\right)=\frac{\lambda}{2}|\nabla\varphi_1|^2 \tag{III.38}$$

Une extension possible dans le cas d'un système diphasique compositionnel à deux tensions de surface pourrait s'écrire

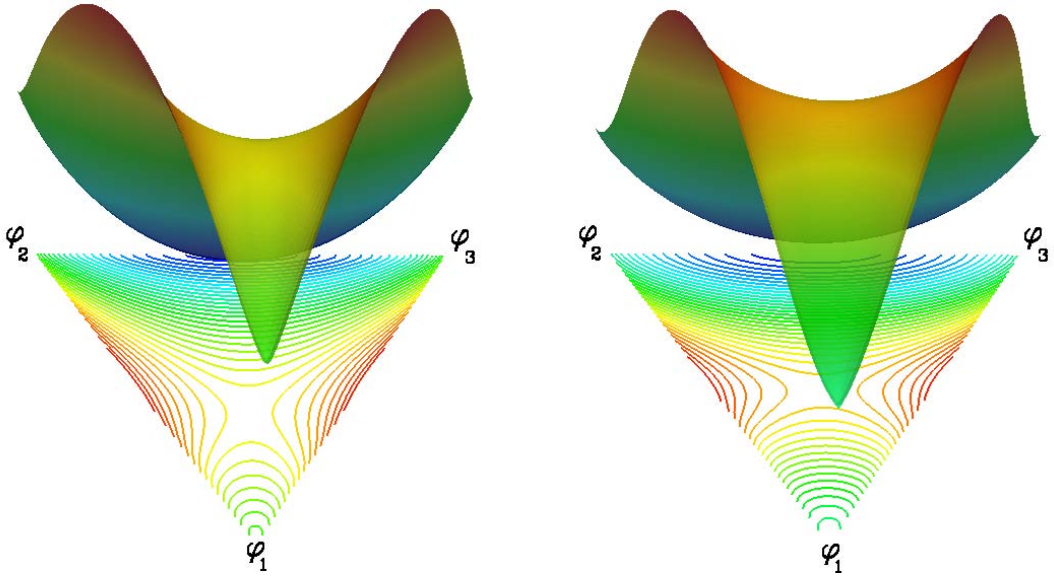
$$\mathcal{K}\left(\nabla\varphi_1,\nabla\varphi_2,\nabla\varphi_3\right)=\frac{\lambda_1}{4}|\nabla\varphi_1|^2+\frac{\lambda_2}{4}|\nabla\varphi_2|^2+\frac{\lambda_3}{4}|\nabla\varphi_3|^2\quad\text{avec }\lambda_2+\lambda_3=0 \tag{III.39}$$

où les coefficients λ_i pour $i=1,2,3$ désignent les coefficients de capillarité.

Concernant $W\left(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\right)$, un modèle de Cahn-Hilliard compositionnel a été développé dans [83] en utilisant la forme logarithmique suivante

$$W\left(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\right)=A\left[\sum_{i=1}^{3}\varphi_i\ln\left(\varphi_i\right)+\chi\varphi_1\left(\varphi_2+\varphi_3\right)\right]\quad\text{avec }\chi\geq 2 \tag{III.40}$$

où χ modélise la non-miscibilité entre les couples (φ_1,φ_2) et (φ_1,φ_3). En pratique, la contribution diphasique de cette expression pose deux problèmes. Le premier est que l'utilisation d'une forme logarithmique ne permet pas de déterminer analytiquement le profil du paramètre d'ordre à l'équilibre dans le cas d'une interface plane. Par conséquent, il est difficile d'exprimer les coefficients A et λ en fonction de la tension de surface et de l'épaisseur d'interface. Le second problème est qu'il est nécessaire d'introduire une régularisation de $W\left(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\right)$ pour effectuer des simulations numériques [52]. Par contre, un des avantages d'une forme logarithmique est qu'elle permet de maintenir plus facilement les paramètres d'ordre dans l'intervalle physique $[0,1]$ [52].



(a) Forme logarithmique (III.38) (b) Forme polynomiale-logarithmique (III.41)

Fig. III.3: Forme logarithmique (gauche) et la forme combinée logarithmique-polynomiale (droite) du potentiel de Cahn-Hilliard sur le triangle de Gibbs.

Dans cette étude, le potentiel de Cahn-Hilliard est proposé sous la forme suivante

$$W(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3) = W_i(\varphi_1) + W_m(\varphi_2,\varphi_3) \tag{III.41}$$

où W_i et W_m sont des potentiels décrivant respectivement les propriétés d'immiscibilité et de miscibilité entre les phases. Ces potentiels, pouvant être vus comme les contributions diphasique et compositionnelle de $W(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3)$, sont définis par

$$W_i(\varphi_1) = A{\varphi_1}^2(1-\varphi_1)^2 \tag{III.42}$$
$$W_m(\varphi_2,\varphi_3) = B\left[\varrho_2\varphi_2\ln(\varrho_2\varphi_2) + \varrho_3\varphi_3\ln(\varrho_3\varphi_3) - (\varrho_2\varphi_2+\varrho_3\varphi_3)\ln(\varrho_2\varphi_2+\varrho_3\varphi_3)\right] \tag{III.43}$$

Le potentiel W_i correspond exactement au potentiel du modèle de Cahn-Hilliard diphasique tel qu'il a été défini dans la section (III.1). Dans ce cas, comme dans le cas diphasique, on peut montrer que $A = 12\sigma/\epsilon$ et $\lambda = 3\sigma\epsilon/2$. L'extension au cas de deux tensions de surface pourrait s'écrire

$$W_i(\varphi_1) = \frac{12}{\epsilon}\left(\sigma_{1,2}{\varphi_1}^2{\varphi_2}^2 + \sigma_{1,3}{\varphi_1}^2{\varphi_3}^2 + (\sigma_{1,2}+\sigma_{1,3}){\varphi_1}^2\varphi_2\varphi_3\right) \tag{III.44}$$

où $\sigma_{1,i} = \lambda_1 + \lambda_i$ pour $i = 2,3$ désigne la tension de surface entre les constituants 1 et i.

La contribution compositionnelle W_m (*cf.* (III.43)) est quant à elle composée de deux termes avec B une constante strictement positive ayant la dimension de l'inverse d'une masse volumique. Le premier est semblable à une entropie idéale de mélange tandis que le second permet de vérifier les propriétés de consistance telles qu'elles sont définies dans la section (III.2.4). En effet, la relation (III.41) vérifie les relations suivantes

$$W(0,\varphi,1-\varphi) = B\left[\varrho_2\varphi\ln(\varrho_2\varphi) + \varrho_3(1-\varphi)\ln(\varrho_3(1-\varphi)) - \rho_{2,3}\ln(\rho_{2,3})\right] \tag{III.45a}$$
$$W(\varphi,1-\varphi,0) = 12\frac{\sigma}{\epsilon}\varphi^2(1-\varphi)^2 \tag{III.45b}$$
$$W(\varphi,0,1-\varphi) = 12\frac{\sigma}{\epsilon}\varphi^2(1-\varphi)^2 \tag{III.45c}$$

La structure du potentiel $W(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ défini par la relation (III.41) est similaire à celle du potentiel écrit sous forme logarithmique (Fig.III.3). Le minimum local présent sur l'axe (φ_2, φ_3) caractérise la miscibilité entre les constituants liquides lorsque le gaz est absent. Par analogie, le maximum local présent, d'une part, sur l'axe (φ_1, φ_2) et, d'autre part, sur l'axe (φ_1, φ_3) traduit la non miscibilité entre le gaz et chacun des constituants liquides. De la même manière mais dans le cas diphasique compositionnel, le point selle présent sur la hauteur de sommet φ_1 et de base (φ_2, φ_3) caractérise la démixtion totale entre le gaz et le liquide.

III.2.3 Etablissement des équations de bilan

Notre objectif ici est de dériver les équations de bilan permettant de décrire l'évolution du mélange diphasique compositionnel. Ces équations sont dérivées dans le cadre de la théorie de la thermodynamique des processus irréversibles [72, 102, 125] à partir de la fermeture thermodynamique proposée dans la section précédente.

La première étape consiste à se donner un système d'équations de conservation pour le mélange. A partir des développements proposés dans la section (III.2.1), on pose

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = -\sum_{i=1}^{3} \nabla \cdot \mathbf{j}_i \tag{III.46a}$$

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_i \mathbf{u}) = -\frac{1}{\varrho_i} \nabla \cdot \mathbf{j}_i \qquad i = 1, 2, 3 \tag{III.46b}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{g} \tag{III.46c}$$

$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e_t \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_{e_t} + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u}) + \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{u} \tag{III.46d}$$

$$\frac{\partial \rho s}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho s \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{q}_s + \Delta_s \tag{III.46e}$$

où $\mathbf{g}$, e_t et Δ_s sont respectivement la gravité, l'énergie totale spécifique et le taux de production d'entropie. Dans le système d'équations (III.46), les flux $\mathbf{j}_i$, $\boldsymbol{\sigma}$, $\mathbf{q}_{e_t}$ et $\mathbf{q}_s$ doivent être déterminés de telle sorte que le second principe de la thermodynamique soit vérifié, c'est-à-dire

$$\Delta_s \geq 0 \tag{III.47}$$

Des combinaisons entre les différentes équations de conservation vont être effectuées pour écrire le taux de production d'entropie comme une combinaison linéaire de flux et de forces thermodynamiques.

L'énergie libre de Gibbs étant une fonction de la pression, de la température, des paramètres d'ordre et de leurs gradients, sa différentielle s'écrit

$$dg = -sdT + vdp + \sum_{i=1}^{3} \frac{\mu_i}{\rho} d\varphi_i + \sum_{i=1}^{3} \frac{\boldsymbol{\psi}_i}{\rho} \cdot d(\nabla \varphi_i) \tag{III.48}$$

où le volume spécifique $v = 1/\rho$, l'entropie spécifique s et les potentiels chimiques μ_i et $\boldsymbol{\psi}_i$ associés

aux paramètres d'ordre et leur gradient sont définis par

$$v = \left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_{T,\{\varphi_i\},\{\nabla\varphi_i\}} \tag{III.49a}$$

$$s = -\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_{p,\{\varphi_i\},\{\nabla\varphi_i\}} \tag{III.49b}$$

$$\mu_i = \rho\left(\frac{\partial g}{\partial \varphi_i}\right)_{p,T,\{\varphi_k\},\{\nabla\varphi_i\}} \tag{III.49c}$$

$$\boldsymbol{\psi}_i = \rho\left(\frac{\partial g}{\partial \nabla\varphi_i}\right)_{p,T,\{\varphi_i\},\{\nabla\varphi_k\}} \tag{III.49d}$$

L'application d'une transformée de Legendre à l'énergie libre de Gibbs permet de définir formellement une énergie de Helmholtz f qui dépend non pas des variables $(\rho, T, \{\varphi_i\}, \{\nabla\varphi_i\})$ mais des variables $(p, T, \{\varphi_i\}, \{\nabla\varphi_i\})$ [110]

$$f = g - p\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_{T,\{\varphi_i\},\{\nabla\varphi_i\}} \tag{III.50}$$

En appliquant à nouveau une transformée de Legendre à f, on peut définir formellement l'énergie interne spécifique e sous la forme

$$e = g - T\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_{p,\{\varphi_i\},\{\nabla\varphi_i\}} - p\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_{T,\{\varphi_i\},\{\nabla\varphi_i\}} \tag{III.51}$$

En utilisant les relations (III.49) puis en multipliant l'équation (III.51) par la densité du mélange, il vient

$$\rho e = \rho g + T\rho s - p + \beta\sum_{i=1}^{3}(\varphi_i - 1) \tag{III.52}$$

où β est un multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte (III.18). A partir de la relation (III.52), on peut écrire

$$d(\rho e) = \rho dg + g d\rho + T d(\rho s) + \rho s dT - dp + \beta\sum_{i=1}^{3} d\varphi_i \tag{III.53}$$

En substituant l'expression (III.48) de la différentielle de g dans la relation (III.53), il vient

$$d(\rho e) = g d\rho + T d(\rho s) + \sum_{i=1}^{3}(\mu_i + \beta)\, d\varphi_i + \sum_{i=1}^{3}\boldsymbol{\psi}_i \cdot d(\nabla\varphi_i) \tag{III.54}$$

Soit, dans les conditions d'état d'équilibre thermodynamique local [72]

$$\frac{d\rho e}{dt} = g\frac{d\rho}{dt} + T\frac{d\rho s}{dt} + \sum_{i=1}^{3}(\mu_i + \beta)\frac{d\varphi_i}{dt} + \sum_{i=1}^{3}\boldsymbol{\psi}_i \cdot \frac{d(\nabla\varphi_i)}{dt} \tag{III.55}$$

Par ailleurs, on note l'identité suivante

$$\boldsymbol{\psi}_i \cdot \frac{d(\nabla\varphi_i)}{dt} = \nabla\cdot\left(\boldsymbol{\psi}_i\frac{d\varphi_i}{dt}\right) - \frac{d\varphi_i}{dt}\nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_i - (\boldsymbol{\psi}_i \otimes \nabla\varphi_i) : \nabla\mathbf{u} \tag{III.56}$$

La substitution de (III.56) dans (III.55) conduit alors à

$$\frac{d\rho e}{dt} = g\frac{d\rho}{dt} + T\frac{d\rho s}{dt} + \sum_{i=1}^{3}\left(\mu_i - \nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_i + \beta\right)\frac{d\varphi_i}{dt} + \sum_{i=1}^{3}\left[\nabla\cdot\left(\boldsymbol{\psi}_i\frac{d\varphi_i}{dt}\right) - \left(\boldsymbol{\psi}_i\otimes\nabla\varphi_i\right):\nabla\mathbf{u}\right] \quad \text{(III.57)}$$

L'étape suivante consiste à substituer le bilan de masse du mélange (III.46a) et le bilan de masse de chaque constituant (III.46b) dans l'équation (III.57). On obtient alors

$$\begin{aligned}\frac{d\rho e}{dt} &= -\left[\left(\sum_{i=1}^{3}\left(\beta+\tilde{\mu}_i\right)\varphi_i\right)\mathbf{I} + \boldsymbol{\psi}_i\otimes\nabla\varphi_i\right]:\nabla\mathbf{u} + T\frac{d\rho s}{dt} - \sum_{i=1}^{3}\frac{1}{\varrho_i}\left(\tilde{\mu}_i+\beta\right)\nabla\cdot\mathbf{j}_i \\ &\quad + \sum_{i=1}^{3}\nabla\cdot\left(\boldsymbol{\psi}_i\frac{d\varphi_i}{dt}\right) \qquad \text{(III.58)}\end{aligned}$$

où $\tilde{\mu}_i$ désigne le potentiel chimique généralisé de la phase i défini par

$$\tilde{\mu}_i = \mu_i - \nabla\cdot\boldsymbol{\psi}_i + \varrho_i g \quad \text{(III.59)}$$

On rappelle que l'énergie totale est définie comme la somme de l'énergie interne et de l'énergie cinétique. Dans ces conditions, on peut écrire

$$\frac{d\rho e}{dt} = \frac{d\rho e_t}{dt} - \frac{1}{2}\frac{d\rho\mathbf{u}^2}{dt} = \frac{d\rho e_t}{dt} - \mathbf{u}\frac{d\rho\mathbf{u}}{dt} + \frac{\mathbf{u}^2}{2}\frac{d\rho}{dt} \quad \text{(III.60)}$$

A partir du bilan d'énergie (III.46d), le bilan de quantité de mouvement (III.46c) et le bilan de masse du mélange (III.46a), la relation (III.60) devient

$$\frac{d\rho e}{dt} = -\nabla\cdot\mathbf{q}_{e_t} + \left[\boldsymbol{\sigma} - \rho e\mathbf{I}\right]:\nabla\mathbf{u} - \frac{\mathbf{u}^2}{2}\sum_{i=1}^{3}\nabla\cdot\mathbf{j}_i \quad \text{(III.61)}$$

La substitution de la relation (III.28) dans (III.61) donne

$$\frac{d\rho e}{dt} = -\nabla\cdot\mathbf{q}_{e_t} + \left[\boldsymbol{\sigma} - \rho e\mathbf{I}\right]:\nabla\mathbf{u} - \nabla\cdot\left[\frac{\mathbf{u}^2}{2}\left(1-\kappa\right)\mathbf{j}_1\right] + \left(1-\kappa\right)\mathbf{j}_1\cdot\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right) \quad \text{(III.62)}$$

En utilisant la relation (III.62) dans (III.59), le bilan d'entropie s'écrit alors sous la forme

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho s}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\rho s\mathbf{u}\right) &= \frac{1}{T}\left[\left(\boldsymbol{\sigma}+\tilde{p}\mathbf{I}+\boldsymbol{\psi}_i\otimes\nabla\varphi_i\right):\nabla\mathbf{u} + \sum_{i=1}^{3}\frac{1}{\varrho_i}\left(\tilde{\mu}_i+\beta\right)\nabla\cdot\mathbf{j}_i + \left(1-\kappa\right)\mathbf{j}_1\cdot\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right] \\ &\quad -\frac{1}{T}\nabla\cdot\left(\mathbf{q}_{e_t} + \frac{\mathbf{u}^2}{2}\left(1-\kappa\right)\mathbf{j}_1 + \sum_{i=1}^{3}\boldsymbol{\psi}_i\frac{d\varphi_i}{dt}\right) \qquad \text{(III.63)}\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho s}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\rho s\mathbf{u}\right) &= -\frac{1}{T}\left\{\sum_{i=2}^{3}\mathbf{j}_i\cdot\left[\frac{1}{\varrho_i}\nabla\left(\tilde{\mu}_i+\beta\right)\right] + \mathbf{j}_1\cdot\left[\frac{1}{\varrho_1}\nabla\left(\tilde{\mu}_1+\beta\right) - \left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right]\right\} \\ &\quad -\nabla\cdot\left(\frac{1}{T}\mathbf{q}'\right) - \frac{1}{T^2}\mathbf{q}'\cdot\nabla T + \frac{1}{T}\boldsymbol{\tau}:\nabla\mathbf{u} \qquad \text{(III.64)}\end{aligned}$$

avec $\tilde{p}$, $\mathbf{q}'$ et $\boldsymbol{\tau}$ définis par

$$\tilde{p} = -\rho g + p + \sum_{i=1}^{3} (\beta + \tilde{\mu}_i)\,\varphi_i \tag{III.65}$$

$$\mathbf{q}' = \sum_{i=1}^{3} \left[\boldsymbol{\psi}_i \frac{d\varphi_i}{dt} + \frac{\mathbf{u}^2}{2}(1-\kappa)\,\mathbf{j}_1 - \frac{1}{\varrho_i}(\tilde{\mu}_i + \beta)\,\mathbf{j}_i \right] + \mathbf{q}_{e_t} \tag{III.66}$$

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\sigma} + \tilde{p}\mathbf{I} + \sum_{i=1}^{3} \boldsymbol{\psi}_i \otimes \nabla\varphi_i \tag{III.67}$$

En identifiant la relation (III.64) au bilan d'entropie défini par la relation (III.46e), il vient

$$\mathbf{q}_s = \frac{1}{T}\mathbf{q}' \tag{III.68}$$

$$\Delta_s = \frac{1}{T}\boldsymbol{\tau} : \nabla\mathbf{u} - \frac{1}{T}\left\{ \sum_{i=1}^{2} \frac{\mathbf{j}_i}{\varrho_i} \cdot \nabla(\tilde{\mu}_i + \beta) + \mathbf{j}_1 \cdot \left[\frac{1}{\varrho_1}\nabla(\tilde{\mu}_1 + \beta) - (1-\kappa)\,\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right) \right] \right\}$$
$$- \frac{1}{T^2}\mathbf{q}' \cdot \nabla T \tag{III.69}$$

Nous venons d'écrire le taux de production d'entropie comme une combinaison linéaire des forces $\left(\nabla(\tilde{\mu}_i + \beta)/\varrho_i, \nabla(\tilde{\mu}_1 + \beta)/\varrho_1 - (1-\kappa)\nabla\mathbf{u}^2/2,\ \nabla T/T, \nabla\mathbf{u}\right)$ et des flux $\left(\mathbf{j}_i,\ \boldsymbol{\tau},\ \mathbf{q}'\right)$ thermodynamiques (responsables des processus irréversibles) [72]. La prochaine étape consiste à déterminer ces flux de telle sorte que le second principe soit vérifié. Dans le cadre de la théorie des processus irréversibles, si le système reste suffisamment proche d'un état d'équilibre thermodynamique local alors les flux $\mathbf{J}_i$ peuvent s'écrire comme une combinaison linéaire des forces thermodynamiques $\mathbf{X}_k$ [125]. Ces relations, appelées *relations phénoménologiques*, sont données par

$$\forall\, i, \quad \mathbf{J}_i = \sum_k L_{i,k}\mathbf{X}_k \tag{III.70}$$

où les coefficients phénoménologiques $L_{i,k} = (\partial\mathbf{J}_i/\partial\mathbf{X}_k)^{eq}$ sont également appelés coefficients de Onsager [120]. D'après le principe de Curie [72], si le système est isotrope, ce que nous supposons ici, alors les flux $\mathbf{J}_i$ et les forces $\mathbf{X}_k$ de degré tensoriel différent sont indépendants. De manière classique, nous proposons ici les relations phénoménologiques suivantes

$$\mathbf{q}' = -k\nabla T \tag{III.71a}$$

$$\boldsymbol{\tau} = \eta\left(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T\right) - \frac{2}{3}\eta\,(\nabla\cdot\mathbf{u})\,\mathbf{I} \tag{III.71b}$$

$$\mathbf{j}_i = -M_i\nabla(\tilde{\mu}_i + \beta) \quad i = 2,3 \tag{III.71c}$$

$$\mathbf{j}_1 = -M_1\nabla(\tilde{\mu}_1 + \beta) + \varrho_1 M_1 (1-\kappa)\,\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right) \tag{III.71d}$$

Les effets Soret (flux de chaleur causés par un gradient de concentration) et les effets Dufour (flux de masse dus à un gradient de température) ont été négligés. Le flux $\mathbf{q}'$ est donné par la loi de Fourier (III.71a) où $k := k(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ désigne la conductivité thermique. La relation (III.71b) constitue la forme la plus simple du tenseur des contraintes visqueuses où $\eta := \eta(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ désigne la viscosité dynamique. La substitution de la relation (III.71b) dans (III.46c) et l'utilisation de l'expression de l'énergie libre de Gibbs (III.35) conduisent à l'expression suivante du bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}) = -\nabla\tilde{p} + \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} - \nabla\cdot(\lambda\nabla\varphi_1\otimes\nabla\varphi_1) + \rho\mathbf{g} \tag{III.72}$$

La relation (III.72) correspond aux équations de Navier-Stokes dans lesquelles le tenseur de type Korteweg $\lambda\nabla\varphi_1 \otimes \nabla\varphi_1$ modélise les effets capillaires entre le gaz et le liquide. Dans les relations phénoménologiques (III.71c) et (III.71d), les coefficients M_i sont des coefficients de diffusion appelés *mobilités*. Pour exprimer les flux $\mathbf{j}_1$, $\mathbf{j}_2$ et $\mathbf{j}_3$, il est nécessaire de déterminer le multiplicateur de Lagrange β. Pour y parvenir, on utilise la contrainte (III.28) qui s'écrit encore

$$\mathbf{j}_2 + \mathbf{j}_3 + \kappa\mathbf{j}_1 = 0 \tag{III.73}$$

En substituant les relations phénoménologiques (III.71a) et (III.71b) dans la contrainte (III.73), il vient

$$\nabla\beta = -\frac{1}{M_T}\left(\kappa M_1\nabla\tilde{\mu}_1 + M_2\nabla\tilde{\mu}_2 + M_3\nabla\tilde{\mu}_3 - \varrho_1 M_1\kappa\left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right) \tag{III.74}$$

où $M_T = \kappa M_1 + M_2 + M_3$. A partir de la relation (III.74), les flux $\mathbf{j}_1$, $\mathbf{j}_2$ et $\mathbf{j}_3$ s'écrivent

$$\mathbf{j}_1 = -\left(M_{12}+M_{13}\right)\left[\nabla\tilde{\mu}_1 - \varrho_1\left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right] + M_{12}\nabla\tilde{\mu}_2 + M_{13}\nabla\tilde{\mu}_3 \tag{III.75a}$$

$$\mathbf{j}_2 = M_{12}\kappa\left[\nabla\tilde{\mu}_1 - \varrho_1\left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right] - \left(\kappa M_{12}+M_{23}\right)\nabla\tilde{\mu}_2 + M_{23}\nabla\tilde{\mu}_3 \tag{III.75b}$$

$$\mathbf{j}_3 = M_{13}\kappa\left[\nabla\tilde{\mu}_1 - \varrho_1\left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right] + M_{23}\nabla\tilde{\mu}_2 - \left(\kappa M_{13}+M_{23}\right)\nabla\tilde{\mu}_3 \tag{III.75c}$$

où les coefficients M_{ij} sont donnés par

$$M_{12} = \frac{M_1 M_2}{M_T} \quad ; \quad M_{13} = \frac{M_1 M_3}{M_T} \quad ; \quad M_{23} = \frac{M_2 M_3}{M_T} \tag{III.76}$$

Le système d'équations de bilan permettant de décrire l'évolution d'un système diphasique compositionnel s'écrit finalement

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\right) = -\sum_{i=1}^{3}\nabla\cdot\mathbf{j}_i \tag{III.77a}$$

$$\frac{\partial\varphi_1}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\varphi_1\mathbf{u}\right) = \nabla\cdot\left\{\frac{\left(M_{12}+M_{13}\right)}{\varrho_1}\left[\nabla\tilde{\mu}_1 - \varrho_1\left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right] - \frac{1}{\varrho_1}\left(M_{12}\nabla\tilde{\mu}_2 + M_{13}\nabla\tilde{\mu}_3\right)\right\} \tag{III.77b}$$

$$\frac{\partial\varphi_2}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\varphi_2\mathbf{u}\right) = \nabla\cdot\left\{-\frac{M_{12}\kappa}{\varrho_2}\left[\nabla\tilde{\mu}_1 - \varrho_1\left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right] + \frac{\left(\kappa M_{12}+M_{23}\right)}{\varrho_2}\nabla\tilde{\mu}_2 - \frac{M_{23}}{\varrho_2}\nabla\tilde{\mu}_3\right\} \tag{III.77c}$$

$$\frac{\partial\varphi_3}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\varphi_3\mathbf{u}\right) = \nabla\cdot\left\{-\frac{M_{13}\kappa}{\varrho_3}\left[\nabla\tilde{\mu}_1 - \varrho_1\left(1-\kappa\right)\nabla\left(\frac{\mathbf{u}^2}{2}\right)\right] - \frac{M_{23}}{\varrho_3}\nabla\tilde{\mu}_2 + \frac{\left(\kappa M_{13}+M_{23}\right)}{\varrho_3}\nabla\tilde{\mu}_3\right\} \tag{III.77d}$$

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}\right) = -\nabla\tilde{p} + \nabla\cdot\boldsymbol{\tau} - \nabla\cdot\left(\lambda\nabla\varphi_1\otimes\nabla\varphi_1\right) + \rho\mathbf{g} \tag{III.77e}$$

$$T\left[\frac{\partial\rho s}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\rho s\mathbf{u}\right)\right] = \nabla\cdot\left(k\nabla T\right) + \boldsymbol{\tau}:\nabla\mathbf{u} + \sum_{i=1}^{3}\frac{1}{\varrho_i M_i}|\mathbf{j}_i|^2 \tag{III.77f}$$

où les potentiels chimiques généralisés sont donnés par

$$\tilde{\mu}_1 = W_i'(\varphi_1) - \lambda\nabla^2\varphi_1 \tag{III.78a}$$

$$\tilde{\mu}_2 = \frac{\partial W_m}{\partial\varphi_2} = B\varrho_2\left[\ln(\varrho_2\varphi_2) - \ln(\varrho_2\varphi_2 + \varrho_3\varphi_3)\right] \tag{III.78b}$$

$$\tilde{\mu}_3 = \frac{\partial W_m}{\partial\varphi_3} = B\varrho_3\left[\ln(\varrho_3\varphi_3) - \ln(\varrho_2\varphi_2 + \varrho_3\varphi_3)\right] \tag{III.78c}$$

L'ensemble des équations (III.77) constitue le *modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel* écrit sous sa forme anisotherme. Pour fermer ce système d'équations, la forme des mobilités M_1, M_2 et M_3 doit être déterminée. Pour cela, nous effectuons dans la section (III.2.4) une étude des *propriétés de consistance* du modèle.

En pratique, en vue de la résolution numérique du modèle, l'équation d'évolution pour la température est préférée à celle pour l'entropie. On présente ici les développements conduisant à cette équation en reprenant les développements de Ruyer [131] appliqués ici au modèle de Cahn-Hilliard compositionnel. Pour cela, on rappelle que l'entropie du mélange est définie à partir de l'énergie libre de Gibbs du mélange par la relation (III.49b). Etant donné que g dépend de p, T, φ_1, φ_2, φ_3 et $\nabla\varphi_1$, la différentielle de s s'écrit à partir des relations (III.49)

$$\begin{aligned} ds &= -\left[\frac{\partial^2 g}{\partial T\partial p}dp + \frac{\partial^2 g}{\partial T^2}dT + \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial^2 g}{\partial T\partial\varphi_i}d\varphi_i + \frac{\partial^2 g}{\partial T\partial\nabla\varphi_1}\cdot d\nabla\varphi_1\right] \\ &= -\left[\frac{\partial v}{\partial T}dp - \frac{\partial s}{\partial T}dT + \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\mu_i}{\rho}\right)d\varphi_i + \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\boldsymbol{\psi}_1}{\rho}\right)\cdot d\nabla\varphi_1\right] \end{aligned} \tag{III.79}$$

Soit, dans les conditions d'état d'équilibre thermodynamique local

$$\frac{ds}{dt} = -\left[\frac{\partial v}{\partial T}\frac{dp}{dt} - \frac{\partial s}{\partial T}\frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\mu_i}{\rho}\right)\frac{d\varphi_i}{dt} + \frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{\boldsymbol{\psi}_1}{\rho}\right)\cdot\frac{d(\nabla\varphi_1)}{dt}\right] \tag{III.80}$$

On rappelle ici que la chaleur spécifique à pression constante C_p est définie par

$$C_p = T\frac{\partial s}{\partial T} \tag{III.81}$$

Puisque les densités ρ_i et le coefficient de capillarité λ ne dépendent pas de la température, on obtient

$$\frac{ds}{dt} = \frac{C_p}{T}\frac{dT}{dt} - \frac{1}{\rho}\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\mu_i}{\partial T}\frac{d\varphi_i}{dt} \tag{III.82}$$

Soit, en multipliant par ρT et en substituant l'équation d'évolution pour l'entropie du mélange

$$\rho C_p\frac{dT}{dt} = \nabla\cdot(k\nabla T) + \boldsymbol{\tau}:\nabla\mathbf{u} + \sum_{i=1}^{3}\frac{|\mathbf{j}_i|^2}{\varrho_i M_i} - \rho T s\nabla\cdot\mathbf{u} + T\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial\mu_i}{\partial T}\frac{d\varphi_i}{dt} \tag{III.83}$$

A partir des relations (III.49) et de la fermeture proposée pour l'énergie libre du mélange, l'équation d'évolution pour la température s'écrit finalement

$$\rho C_p\frac{dT}{dt} = \nabla\cdot(k\nabla T) + \boldsymbol{\tau}:\nabla\mathbf{u} + \sum_{i=1}^{3}\frac{|\mathbf{j}_i|^2}{\varrho_i M_i} + T\sum_{i=1}^{3}\varrho_i a_i'(T)\frac{d\varphi_i}{dt} \tag{III.84}$$

La contribution des deux derniers termes du membre de droite de l'équation (III.84) n'est pas prise en compte dans la suite de ce travail.

Nous précisons désormais les fonctions $a_i(T)$ à partir de la définition de la chaleur spécifique du mélange qui s'écrit à partir de la fermeture de l'énergie libre du mélange sous la forme suivante

$$C_p = -T\sum_{i=1}^{3}\frac{\rho_i}{\rho}a_i''(T) \tag{III.85}$$

On peut ainsi définir les fonctions $a_i(T)$ en posant

$$a_i''(T) = -\frac{C_{p_i}}{T} \tag{III.86}$$

où C_{p_i} désigne la chaleur spécifique du constituant i. On obtient ainsi la relation classique de mélange

$$\rho C_p = \sum_{i=1}^{3}\varrho_i\varphi_i C_{p_i} \tag{III.87}$$

Dans la suite de ce travail, pour simplifier, la contribution des termes en énergie cinétique dans les équations de Cahn-Hilliard (III.77b)-(III.77d) ne sera pas prise en compte. Comme justification partielle, il semble que la présence de ces termes n'a pas d'impact significatif sur la dynamique des interfaces dans le cas d'un mélange de deux phases non miscibles [88]. Il serait néanmoins intéressant d'étudier l'influence de ces termes dans le cas d'un système diphasique compositionnel mais une telle étude sort du cadre de cette thèse.

III.2.4 Propriétés de consistance et fermetures des mobilités

On effectue ici une étude des propriétés de consistance du modèle. Cette étude, menée sans perte de généralité dans le cas isotherme, a pour but de déterminer les mobilités M_1, M_2 et M_3 de telle manière que le modèle soit consistant vis-à-vis, d'une part, du cas purement diphasique et, d'autre part, du cas purement compositionnel. Dans le premier cas, si un des constituants liquides est absent alors le modèle doit dégénérer sous la forme du modèle diphasique tel qu'il a été défini dans [88] et rappelé dans la section (III.1). Dans le second cas, lorsque la phase gazeuse est absente, le modèle doit coïncider avec un modèle compositionnel [93] couplé aux équations de Navier-Stokes. Notons que, dans chacun de ces cas, le potentiel $W(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ vérifie les propriétés de consistance (*cf.* Eqs.(III.45) de la section (III.2.2)).

On commence par proposer et justifier la forme générale des mobilités. Les mobilités M_2 et M_3 sont ensuite déterminées par une étude de consistance dans le cas purement compositionnel tandis que la mobilité M_1 est obtenue dans le cas purement diphasique.

III.2.4.a Forme générale des mobilités

Le modèle précédemment développé doit satisfaire la propriété de consistance suivante

$$\varphi_i(t=0) = 0 \quad \Rightarrow \quad \forall t > 0,\ \varphi_i(t) = 0 \quad \text{pour } i = 1,2,3 \tag{III.88}$$

Pour cela, il est nécessaire que le flux $\mathbf{j}_i$ s'annule lorsque $\varphi_i = 0$. Puisque la contribution en énergie cinétique dans les équations de Cahn-Hilliard (III.77b)-(III.77d) n'est pas prise en compte, la propriété (III.88) est satisfaite indépendamment de la forme des mobilités pour $i = 1$. Par contre, si les mobilités M_2 et M_3 sont constantes, la présence du terme $\nabla\tilde{\mu}_1$ dans les flux $\mathbf{j}_2$ et $\mathbf{j}_3$ ne permet

pas de satisfaire la propriété (III.88). Il est donc nécessaire que les mobilités M_i, avec $i = 2, 3$, dégénèrent lorsque $\varphi_i = 0$. On propose alors la fermeture suivante

$$M_i = \ell_i \varphi_i \qquad \text{pour } i = 2, 3 \tag{III.89}$$

Les coefficients ℓ_2 et ℓ_3 vont être déterminés à partir d'une étude de consistance dans le cas purement compositionnel. La mobilité M_1 est quant à elle obtenue par une étude de consistance dans le cas purement diphasique.

III.2.4.b Cas purement compositionnel ($\varphi_1 = 0$)

On suppose ici que la phase gazeuse est absente (*i.e.* $\varphi_1 = 0$). Le flux $\mathbf{j}_1$ s'annule et le modèle dégénère sous la forme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \tag{III.90a}$$

$$\frac{\partial \varrho_2 \varphi_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_2 \varphi_2 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\frac{\ell_2 \varphi_2 \ell_3 \varphi_3}{\ell_2 \varphi_2 + \ell_3 \varphi_3} \nabla \left(\tilde{\mu}_2 - \tilde{\mu}_3 \right) \right] \tag{III.90b}$$

$$\frac{\partial \varrho_3 \varphi_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_3 \varphi_3 \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \left[\frac{\ell_2 \varphi_2 \ell_3 \varphi_3}{\ell_2 \varphi_2 + \ell_3 \varphi_3} \nabla \left(\tilde{\mu}_2 - \tilde{\mu}_3 \right) \right] \tag{III.90c}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \tag{III.90d}$$

En prenant le gradient des expressions (III.78b) et (III.78c), il vient

$$\nabla \left(\tilde{\mu}_2 - \tilde{\mu}_3 \right) = B \frac{\varrho_2 \varrho_3}{\varphi_2 \varphi_3 \rho_{2,3}} \left(\varphi_2 + \varphi_3 \right) \left(\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3 \right) \tag{III.91}$$

La substitution de cette relation dans (III.90) et l'utilisation de la relation $\varphi_2 + \varphi_3 = 1$ conduisent au système suivant

$$\frac{\partial \varrho_2 \varphi_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_2 \varphi_2 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left(B \frac{\varrho_2 \ell_2 \varrho_3 \ell_3}{\ell_2 \varphi_2 + \ell_3 \varphi_3} \frac{\nabla \varphi_2}{\rho_{2,3}} \right) \tag{III.92a}$$

$$\frac{\partial \varrho_3 \varphi_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_3 \varphi_3 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left(B \frac{\varrho_2 \ell_2 \varrho_3 \ell_3}{\ell_2 \varphi_2 + \ell_3 \varphi_3} \frac{\nabla \varphi_3}{\rho_{2,3}} \right) \tag{III.92b}$$

Dans le cas purement compositionnel, on souhaite que les équations de Cahn-Hilliard soient consistantes avec le modèle de Fick défini par

$$\frac{\partial \varrho_2 \varphi_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_2 \varphi_2 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\frac{\varrho_2 \varrho_3}{\rho_{2,3}} D \nabla \varphi_2 \right] \tag{III.93a}$$

$$\frac{\partial \varrho_3 \varphi_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_3 \varphi_3 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\frac{\varrho_2 \varrho_3}{\rho_{2,3}} D \nabla \varphi_3 \right] \tag{III.93b}$$

où $D := D(\varphi_2, \varphi_3)$ est un coefficient de diffusion massique. Pour vérifier cette propriété de consistance, on propose la fermeture suivante

$$\ell_2 = \ell_3 = \frac{D}{B} \tag{III.94}$$

A partir de la relation (III.94) et de la fermeture proposée pour les mobilités, on obtient

$$M_2 = \frac{D}{B} \varphi_2 \quad ; \quad M_3 = \frac{D}{B} \varphi_3 \tag{III.95}$$

Dans le cas diphasique compositionnel (*i.e.* $\varphi_1 \neq 0$), sans perte de consistance, la généralisation suivante est proposée

$$M_2 = \frac{\rho_{2,3} D}{\rho B} \varphi_2 \quad ; \quad M_3 = \frac{\rho_{2,3} D}{\rho B} \varphi_3 \tag{III.96}$$

III.2.4.c Cas purement diphasique ($\varphi_2 = 0$ ou $\varphi_3 = 0$)

L'objectif ici est de construire la mobilité M_1 pour que le modèle soit consistant vis-à-vis du cas purement diphasique. En particulier, si un des constituants liquides est absent (*i.e.* $\varphi_2 = 0$ ou $\varphi_3 = 0$) alors le modèle doit dégénérer sous la forme du modèle diphasique proposé dans [22] et rappelé dans la section (III.1). Les développements présentés ci-dessous sont indépendants du choix du constituant liquide absent. C'est pourquoi la notation $\star_\ell$ est adoptée pour faire référence au liquide présent dans le mélange.

En l'absence d'un des deux liquides, le modèle se simplifie sous la forme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = (\varrho_1 - \varrho_\ell) \nabla \cdot \left(\frac{M_1 M_\ell}{\varrho_\ell M_1 + \varrho_1 M_\ell} \nabla \tilde{\mu}_1 \right) \tag{III.97a}$$

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_1 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left(\frac{M_1 M_\ell}{\varrho_\ell M_1 + \varrho_1 M_\ell} \nabla \tilde{\mu}_1 \right) \tag{III.97b}$$

$$\frac{\partial \varphi_\ell}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_\ell \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \left(\frac{M_1 M_\ell}{\varrho_\ell M_1 + \varrho_1 M_\ell} \nabla \tilde{\mu}_1 \right) \tag{III.97c}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla \cdot (\lambda \nabla \varphi_1 \otimes \nabla \varphi_1) + \rho \mathbf{g} \tag{III.97d}$$

Afin d'être totalement consistant avec le modèle diphasique rappelé dans la section (III.1), la mobilité M_1 est construite en identifiant le groupe $M_1 M_\ell / (\varrho_\ell M_1 + \varrho_1 M_\ell)$ à une mobilité diphasique notée M_0 et définie ici par

$$M_0 = M_d(\varphi_1) + M_c \tag{III.98}$$

où $M_d(\varphi_1)$ et M_c désignent les parties respectivement dégénérée et constante de la mobilité diphasique. Pour la partie dégénérée, on adopte la fermeture classique [22]

$$M_d(\varphi_1) = M {\varphi_1}^2 (1 - \varphi_1)^2 \tag{III.99}$$

où M est une constante pouvant être assimilée à un nombre de Péclet caractérisant la diffusion dans l'interface (*cf.* (A.4)). Dans ces conditions, la mobilité M_1 est donnée par

$$M_1 = \frac{\varrho_1 M_0 M_\ell}{M_\ell - M_0 \varrho_\ell} \tag{III.100}$$

Cette relation est valable quel que soit le constituant liquide considéré et conduit au système d'équations suivant

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = (\varrho_1 - \varrho_\ell) \nabla \cdot (M_0 \nabla \tilde{\mu}_d) \tag{III.101a}$$

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_1 \mathbf{u}) = \nabla \cdot (M_0 \nabla \tilde{\mu}_d) \tag{III.101b}$$

$$\frac{\partial \varphi_\ell}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_\ell \mathbf{u}) = -\nabla \cdot (M_0 \nabla \tilde{\mu}_d) \tag{III.101c}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla \cdot (\lambda \nabla \varphi_1 \otimes \nabla \varphi_1) + \rho \mathbf{g} \tag{III.101d}$$

Finalement, on retrouve bien le modèle diphasique proposé par [22]. A partir de la relation (III.100) et sans perte de consistance, la mobilité M_1 est proposée sous la forme générale suivante

$$M_1 = \frac{\varrho_1 M_0 (M_2 + M_3)}{(M_2 + M_3) - \varrho_1 \kappa M_0} \tag{III.102}$$

III.2.5 Formes alternatives du modèle

Nous proposons ici différentes formes du modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel. Tout d'abord, nous présentons le modèle initial obtenu après la substitution des mobilités dans le système d'équations (III.77). Les équations de Cahn-Hilliard sont ensuite reformulées en utilisant une vitesse solénoïdale (*i.e.* un champ de vitesse à divergence nulle). Enfin, les équations de Navier-Stokes sont reformulées, d'une part, en une forme alternative sur la base des développements proposés par Guermond et Quartapelle [78] et, d'autre part, sous une forme dite *potentielle*.

III.2.5.a Forme initiale

La substitution des relations (III.96) et (III.102) dans (III.77) permet d'écrire le modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel sous la forme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left(M_0 \frac{\varrho_1 - \rho}{1 - \varphi_1} \nabla \tilde{\mu}_1 \right) \tag{III.103a}$$

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_1 \mathbf{u}) = \nabla \cdot (M_0 \nabla \tilde{\mu}_1) \tag{III.103b}$$

$$\tilde{\mu}_1 = W_i'(\varphi_1) - \lambda \nabla^2 \varphi_1 \tag{III.103c}$$

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_2 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[-\frac{M_0 \varphi_2 \rho_{2,3}}{\varrho_2 (1 - \varphi_1)^2} \nabla \tilde{\mu}_1 + \frac{\varrho_3 D}{\rho} (\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3) \right] \tag{III.103d}$$

$$\frac{\partial \varphi_3}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi_3 \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[-\frac{M_0 \varphi_3 \rho_{2,3}}{\varrho_3 (1 - \varphi_1)^2} \nabla \tilde{\mu}_1 - \frac{\varrho_2 D}{\rho} (\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3) \right] \tag{III.103e}$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla \cdot (\lambda \nabla \varphi_1 \otimes \nabla \varphi_1) + \rho \mathbf{g} \tag{III.103f}$$

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) + \boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u} \tag{III.103g}$$

III.2.5.b Forme alternative des équations de Cahn-Hilliard

Nous proposons ici une forme alternative des équations de Cahn-Hilliard utilisant une vitesse solénoïdale. Comme nous le verrons dans la section (III.3), l'intérêt de cette forme par rapport aux équations de Cahn-Hilliard écrites sous forme conservative réside dans le fait qu'elle permet naturellement de vérifier la contrainte $\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 = 1$ lors de la résolution numérique du système.

La première étape consiste à construire une vitesse solénoïdale $\mathbf{w}$ en nous inspirant des travaux réalisés par Joseph [93] sur les mélanges de liquides miscibles et incompressibles. La somme des équations (III.103b)-(III.103e) conduit à

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot \left[-\frac{M_0 \varphi_2 \varphi_3}{(1 - \varphi_1)^2} \frac{(\varrho_3 - \varrho_2)^2}{\varrho_2 \varrho_3} \nabla \tilde{\mu}_1 + (\varrho_3 - \varrho_2) \frac{D}{\rho} (\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3) \right]$$

Cette relation suggère de définir la vitesse solénoïdale $\mathbf{w}$ comme

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + \frac{M_0 \varphi_2 \varphi_3}{(1 - \varphi_1)^2} \frac{(\varrho_3 - \varrho_2)^2}{\varrho_2 \varrho_3} \nabla \tilde{\mu}_1 - (\varrho_3 - \varrho_2) \frac{D}{\rho} (\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3) \tag{III.104}$$

Dans la relation (III.104), le dernier terme du membre de droite est un champ de vitesse à divergence non nulle associé à la dilatation du mélange liquide-liquide. Dans le cas purement compositionnel (*i.e.* $\varphi_1 = 0$), ce terme coïncide exactement avec la vitesse de dilatation proposée dans [93]. La signification du second terme reste encore à clarifier. Néanmoins, de par sa structure triphasique, on peut penser qu'il s'agit d'une vitesse de dilatation agissant dans l'interface liquide-gaz où les deux liquides sont nécessairement présents.

La substitution de la relation (III.104) dans (III.103b)-(III.103e) permet d'écrire les équations de Cahn-Hilliard sous la forme alternative suivante

$$\frac{\partial\varphi_1}{\partial t}+\mathbf{w}\cdot\nabla\varphi_1 = \nabla\cdot\left[\mathcal{M}_1\nabla\tilde{\mu}_1+\left(D_3-D_2\right)\left(\varphi_3\nabla\varphi_2-\varphi_2\nabla\varphi_3\right)\right] \quad \text{(III.105a)}$$

$$\frac{\partial\varphi_2}{\partial t}+\mathbf{w}\cdot\nabla\varphi_2 = \nabla\cdot\left[\mathcal{M}_2\nabla\tilde{\mu}_1+D_2\left(\varphi_3\nabla\varphi_2-\varphi_2\nabla\varphi_3\right)\right] \quad \text{(III.105b)}$$

$$\frac{\partial\varphi_3}{\partial t}+\mathbf{w}\cdot\nabla\varphi_3 = \nabla\cdot\left[\mathcal{M}_3\nabla\tilde{\mu}_1-D_3\left(\varphi_3\nabla\varphi_2-\varphi_2\nabla\varphi_3\right)\right] \quad \text{(III.105c)}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{w} = \nabla\cdot\left[\mathbf{u}+\mathcal{M}_w\nabla\tilde{\mu}_1-D_w\left(\varphi_3\nabla\varphi_2-\varphi_2\nabla\varphi_3\right)\right] \quad \text{(III.105d)}$$

où les coefficients $\mathcal{M}_i$ et D_i sont donnés par

$$\mathcal{M}_w = M_0\frac{\varphi_2\varphi_3}{\left(1-\varphi_1\right)^2}\frac{\left(\varrho_3-\varrho_2\right)^2}{\varrho_2\varrho_3} \quad \text{(III.106a)}$$

$$\mathcal{M}_1 = M_0+\mathcal{M}_w\varphi_1 \quad \text{(III.106b)}$$

$$\mathcal{M}_2 = -M_0\frac{\varphi_2}{1-\varphi_1}-\rho\frac{\mathcal{M}_w}{\left(\varrho_3-\varrho_2\right)}\left[1+\left(\frac{\varrho_3-\varrho_1}{\rho}\right)\varphi_1\right] \quad \text{(III.106c)}$$

$$\mathcal{M}_3 = -M_0\frac{\varphi_3}{1-\varphi_1}+\rho\frac{\mathcal{M}_w}{\left(\varrho_3-\varrho_2\right)}\left[1+\left(\frac{\varrho_2-\varrho_1}{\rho}\right)\varphi_1\right] \quad \text{(III.106d)}$$

$$D_w = \left(\varrho_3-\varrho_2\right)\frac{D}{\rho} \quad \text{(III.106e)}$$

$$D_2 = D\left[1+\left(\frac{\varrho_3-\varrho_1}{\rho}\right)\varphi_1\right] \quad \text{(III.106f)}$$

$$D_3 = D\left[1+\left(\frac{\varrho_2-\varrho_1}{\rho}\right)\varphi_1\right] \quad \text{(III.106g)}$$

Dans la suite de ce travail, pour simplifier, nous négligerons la contribution du gradient du potentiel chimique généralisé dans (III.105d). Il serait néanmoins intéressant d'étudier l'impact de ces termes sur la dynamique des interfaces.

III.2.5.c Forme alternative des équations de Navier-Stokes

On propose ici une forme alternative des équations de Navier-Stokes basée sur celle présentée par Guermond et Quartapelle [78] pour des écoulements incompressibles à densité variable et utilisée par Boyer *& al.* [26] dans le cadre d'un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes pour un mélange de trois phases non miscibles. Cette forme permet notamment d'assurer un contrôle de l'énergie cinétique si le bilan de masse n'est pas vérifié comme c'est souvent le cas en discret.

L'idée principale est de remarquer que le membre de gauche de l'équation (III.103f) peut encore s'écrire

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}\right)=\sqrt{\rho}\frac{\partial(\sqrt{\rho}\mathbf{u})}{\partial t}+\rho\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}+\frac{1}{2}\mathbf{u}\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\right)+\frac{1}{2}\mathbf{u}\left[\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\right)\right] \quad \text{(III.107)}$$

Puisque la vitesse $\mathbf{u}$ ne permet pas de vérifier le bilan de masse standard mais la relation (III.103a), l'expression (III.107) devient

$$\frac{\partial\rho\mathbf{u}}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}\right) = \sqrt{\rho}\frac{\partial(\sqrt{\rho}\mathbf{u})}{\partial t}+\rho\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}+\frac{1}{2}\mathbf{u}\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\right)+\frac{1}{2}\mathbf{u}\nabla\cdot\left(M_0\frac{\varrho_1-\rho}{1-\varphi_1}\nabla\tilde{\mu}_1\right) \quad \text{(III.108)}$$

La relation (III.108) permet d'écrire les équations de Navier-Stokes sous la forme

$$\begin{aligned}\sqrt{\rho}\frac{\partial(\sqrt{\rho}\mathbf{u})}{\partial t}+\rho\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u}+\frac{1}{2}\mathbf{u}\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{u}\right) &= -\nabla\tilde{p}+\nabla\cdot\boldsymbol{\tau}-\nabla\cdot\left(\lambda\nabla\varphi_1\otimes\nabla\varphi_1\right)+\rho\mathbf{g}\\ &- \frac{1}{2}\mathbf{u}\nabla\cdot\left(M_0\frac{\varrho_1-\rho}{1-\varphi_1}\nabla\tilde{\mu}_1\right)\end{aligned} \quad \text{(III.109)}$$

Cette forme alternative des équations de Navier-Stokes tient compte d'une contribution supplémentaire associée à la non conservation de la masse dans l'interface liquide-gaz. Comme dans [26], nous négligerons cette contribution dans la suite de ce travail. Il serait néanmoins intéressant d'étudier l'impact de ces termes sur la dynamique des interfaces mais une telle étude sort du cadre de cette thèse.

III.2.5.d Forme potentielle des équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes définies par la relation (III.109) peuvent à nouveau être reformulées en utilisant la relation suivante

$$\nabla \cdot (\lambda \nabla \varphi_1 \otimes \nabla \varphi_1) = \lambda \nabla \nabla \varphi_1 \nabla \varphi_1 + \lambda \nabla^2 \varphi_1 \nabla \varphi_1 \tag{III.110}$$

ou encore

$$\nabla \cdot (\lambda \nabla \varphi_1 \otimes \nabla \varphi_1) = \nabla \left(W_i(\varphi_1) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \varphi_1|^2 \right) - \tilde{\mu}_1 \nabla \varphi_1 \tag{III.111}$$

A partir de la relation (III.111), les équations de Navier-Stokes s'écrivent

$$\sqrt{\rho} \frac{\partial (\sqrt{\rho}\mathbf{u})}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{2} \mathbf{u} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = -\nabla \tilde{\tilde{p}} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap} + \rho \mathbf{g} \tag{III.112}$$

où la force capillaire $\boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}$ et la pression potentielle $\tilde{\tilde{p}}$ sont données par

$$\boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap} = \tilde{\mu}_1 \nabla \varphi_1 \tag{III.113a}$$

$$\tilde{\tilde{p}} = \tilde{p} + W_i(\varphi_1) + \frac{\lambda}{2} |\nabla \varphi_1|^2 \tag{III.113b}$$

La relation (III.112) est appelée *forme potentielle* des équations de Navier-Stokes.

III.3 Schéma numérique et résolution du problème discret

Cette section est consacrée au schéma numérique utilisé dans l'ensemble de nos applications. Ce schéma s'appuie essentiellement sur le schéma de discrétisation en temps et en espace adopté pour le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes triphasique développé par Lapuerta *& al.* [25].

La démarche consiste dans un premier temps à discrétiser temporellement (*cf.* section (III.3.1)) puis spatialement (*cf.* section (III.3.2)) les équations. La discrétisation adoptée doit permettre au problème discret de vérifier certaines propriétés importantes satisfaites par le problème continu. On s'attachera ici en particulier aux propriétés de consistance (*cf.* section (III.2.4)) et, comme dans [106], à la contrainte associée à la somme des paramètres d'ordre.

Nous commençons par rappeler le système d'équations

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla \varphi_1 = \nabla \cdot [\mathcal{M}_1 \nabla \tilde{\mu}_1 + (D_3 - D_2)(\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3)] \tag{III.114a}$$

$$\tilde{\mu}_1 = W_i'(\varphi_1) - \lambda \nabla^2 \varphi_1 \tag{III.114b}$$

$$\frac{\partial \varphi_2}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla \varphi_2 = \nabla \cdot [\mathcal{M}_2 \nabla \tilde{\mu}_1 + D_2(\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3)] \tag{III.114c}$$

$$\frac{\partial \varphi_3}{\partial t} + \mathbf{w} \cdot \nabla \varphi_3 = \nabla \cdot [\mathcal{M}_3 \nabla \tilde{\mu}_1 - D_3(\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_3)] \tag{III.114d}$$

$$\sqrt{\rho} \frac{\partial (\sqrt{\rho}\mathbf{u})}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{2} \mathbf{u} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) - \nabla \tilde{\tilde{p}} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap} + \rho \mathbf{g} \tag{III.114e}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \nabla \cdot [D_w(\varphi_3 \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \nabla \varphi_2)] \tag{III.114f}$$

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{III.114g}$$

où le tenseur des contraintes et la force capillaire sont donnés par

$$\boldsymbol{\tau} = \eta\left(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^T\right) - \frac{2}{3}\eta\nabla\cdot\mathbf{u}\mathbf{I} \tag{III.115}$$

$$\boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap} = \tilde{\mu}_1\nabla\varphi_1 \tag{III.116}$$

On rappelle que les propriétés physiques telles que la conductivité thermique, la chaleur spécifique, la densité et la viscosité dépendent des paramètres d'ordre. Dans certaines de nos applications numériques (*cf.* section (IV.1)), la viscosité dépend également de la température.

Les conditions aux limites associées au système (III.114) s'écrivent

$$\forall\, i = 1,2,3 \quad \varphi_i = \varphi_{i,D} \quad \text{et} \quad \mathbf{n}\cdot(\mathcal{M}_i\nabla\tilde{\mu}_1) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D^{\varphi} \tag{III.117}$$

$$\mathbf{n}\cdot(\lambda\nabla\varphi_1) = \mathcal{A}(\alpha) \quad \text{et} \quad \forall\, i = 1,2,3 \quad \mathbf{n}\cdot(\mathcal{M}_i\nabla\tilde{\mu}_1) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^{\varphi} \tag{III.118}$$

$$\forall\, i = 2,3 \quad \mathbf{n}\cdot(D_i\nabla\varphi_i) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^{\varphi} \tag{III.119}$$

$$T = T_D \quad \text{sur } \Gamma_D^T \tag{III.120}$$

$$\mathbf{n}\cdot(k\nabla T) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^T \tag{III.121}$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D \quad \text{sur } \Gamma_D^{\mathbf{u}} \tag{III.122}$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{u} = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{t}\cdot(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\tau}) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{D_s}^{\mathbf{u}} \tag{III.123}$$

$$\mathbf{n}\cdot\left(\tilde{p}\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}\right) = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^{\mathbf{u}} \tag{III.124}$$

où $\Gamma = \Gamma_D^{\varphi} \cup \Gamma_N^{\varphi}$, $\Gamma = \Gamma_D^T \cup \Gamma_N^T$ et $\Gamma = \Gamma_D^{\mathbf{u}} \cup \Gamma_{D_s}^{\mathbf{u}} \cup \Gamma_N^{\mathbf{u}}$ sont des partitions régulières du bord du domaine Γ. La condition (III.118) pour le paramètre d'ordre φ_1 est une condition de mouillabilité dans laquelle l'angle de contact est noté α. Dans les conditions aux limites de Dirichlet (III.117), (III.120) et (III.122), $\varphi_{i,D}$, T_D et $\mathbf{u}_D$ sont des données du problème.

III.3.1 Semi-discrétisation en temps

Le schéma numérique en temps est un *schéma semi-implicite* basé sur une méthode à pas fractionnaire en trois étapes permettant de découpler et de résoudre séquentiellement les équations de Cahn-Hilliard, l'équation d'énergie et les équations de Navier-Stokes dans un pas de temps $\left[t^n, t^{n+1}\right]$.

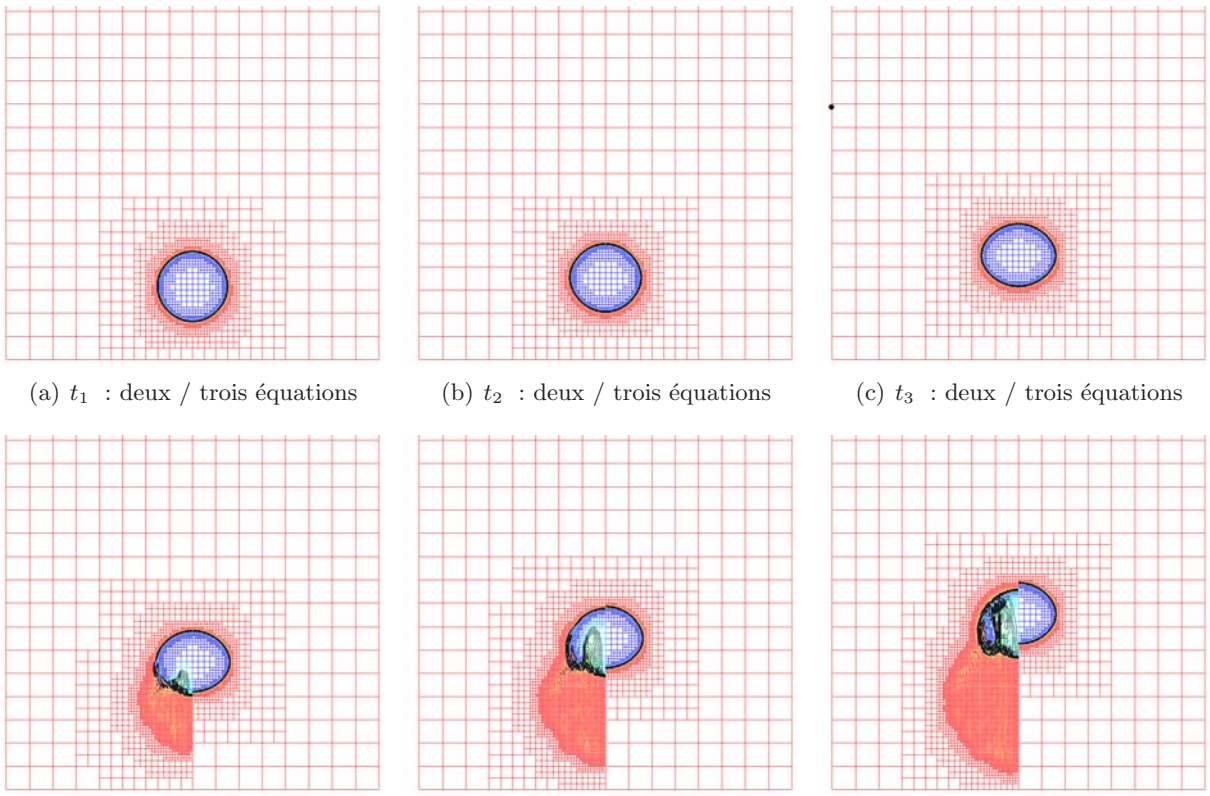
La première étape consiste à résoudre les équations de Cahn-Hilliard avec la donnée de la vitesse solénoïdale $\mathbf{w}^n$ au temps t^n. De cette manière, les paramètres d'ordres et le potentiel chimique généralisé sont calculés au temps $t^{n+1} = t^n + \Delta t$ et peuvent être utilisés pour calculer, d'une part, les propriétés physiques dépendant des paramètres d'ordre (*e.g.* la densité, la conductivité thermique) et, d'autre part, la force capillaire qui est utilisée dans les équations de Navier-Stokes.

La seconde étape est dédiée à la résolution de l'équation d'énergie et au calcul de la température. A partir de là, la viscosité peut être calculée et les équations de Navier-Stokes peuvent être résolues pour obtenir le couple vitesse-pression $\left(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1}\right)$ au temps t^{n+1}. Connaissant la vitesse $\mathbf{u}^{n+1}$, on peut calculer $\mathbf{w}^{n+1}$ puis réitérer l'algorithme pour un nouveau pas de temps.

III.3.1.a Discrétisation en temps des équations de Cahn-Hilliard

Le modèle a été développé de telle sorte que la propriété $\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 = 1$ soit vérifiée. Dans ce cas, seulement deux équations de Cahn-Hilliard sur trois peuvent être résolues, la troisième pouvant être déduite des deux premières [26, 106]. En pratique, certaines de nos simulations dans le cas purement diphasique ont révélé la présence d'instabilités numériques au voisinage de l'interface liquide-gaz pouvant conduire à l'apparition de la phase absente lorsque celle-ci correspondait à l'équation non résolue (*cf.* Fig.III.4 et Fig.III.5). De notre point de vue, ces instabilités semblent être associées au caractère dégénéré des mobilités diphasiques. Une étude approfondie de ce phénomène sort du

cadre de ce travail c'est pourquoi aucune étude de consistance dynamique comme celle proposée dans [106] n'a été menée ici. En revanche, notre choix a été de discrétiser les trois équations de Cahn-Hilliard ce qui présente l'avantage d'éviter toute erreur numérique associée au calcul du paramètre d'ordre non résolu dans les mobilités diphasiques. On présente sur les figures (III.4) et (III.5) un exemple de comparaison entre les deux types de discrétisations sur un cas de montée de bulle dans un liquide par gravité. Les résultats illustrent bien le développement des instabilités et l'apparition de la troisième phase dans le cas d'un système à deux équations.



(a) t_1 : deux / trois équations (b) t_2 : deux / trois équations (c) t_3 : deux / trois équations

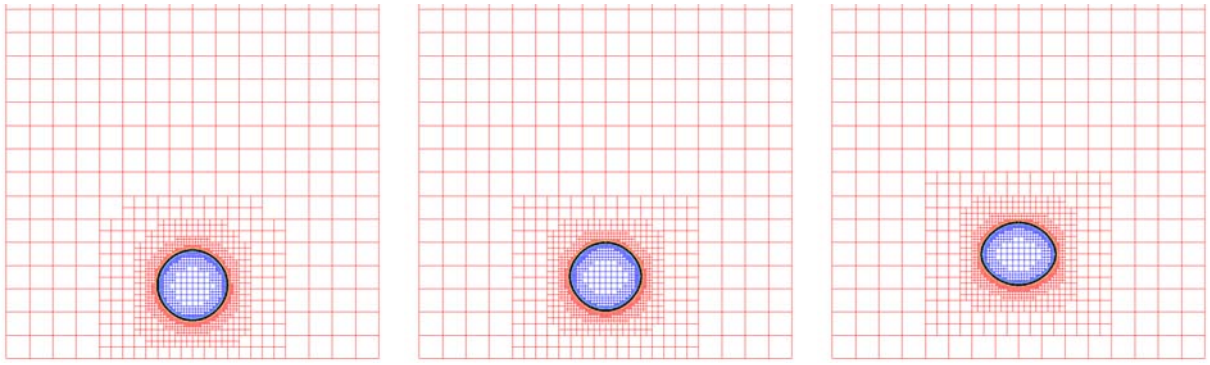
(d) t_4 : deux / trois équations (e) t_5 : deux / trois équations (f) t_6 : deux / trois équations

Fig. III.4: Comparaison des schémas numériques à deux (gauche) et trois (droite) équations sur un problème diphasique de montée d'une bulle de gaz dans un liquide. 20 isovaleurs du paramètre d'ordre $\varphi_2 = 1 - \varphi_1$ dans l'intervalle $[0.25; 0.75]$ à différents instants.

En dépit de ces instabilités, le système à deux équations sera utilisé avec succès dans le cadre de nos applications purement compositionnelles réalisées dans le contexte de l'interaction corium-béton (*cf.* chapitre (IV)). Ce faisant, on se propose ici de décrire les deux types de discrétisations.

Un schéma d'Euler implicite d'ordre un a été choisi pour discrétiser la dérivée en temps. Les coefficients de diffusion D_i et les mobilités $\mathcal{M}_i$ sont discrétisés de manière explicite ce qui a l'avantage de réduire le coût numérique. Afin de simplifier les développements, les notations suivantes sont introduites

$$\mathcal{M}_i^n = \mathcal{M}_i\left(\varphi_1^n, \varphi_2^n, \varphi_3^n\right) \quad ; \quad D_i^n = D_i\left(\varphi_1^n, \varphi_2^n, \varphi_3^n\right) \quad ; \quad \rho^n = \rho\left(\varphi_1^n, \varphi_2^n, \varphi_3^n\right)$$



(a) t_1 : deux / trois équations (b) t_2 : deux / trois équations (c) t_3 : deux / trois équations

(d) t_4 : deux / trois équations (e) t_5 : deux / trois équations (f) t_6 : deux / trois équations

Fig. III.5: Comparaison des schémas numériques à deux (gauche) et trois (droite) équations sur un problème diphasique de montée d'une bulle de gaz dans un liquide par gravité. 20 isovaleurs des paramètres d'ordre $\varphi_3 = 1 - \varphi_1$ (gauche) et $\varphi_2 = 1 - \varphi_1$ (droite) dans l'intervalle $[0.25; 0.75]$ à différents instants.

où les coefficients $\mathcal{M}_i^n$ et D_i^n sont donnés par

$$
\begin{aligned}
\mathcal{M}_w^n &= \left[M_d \min\left(1, |\varphi_1^n|^+\right)^2 + \frac{M_c}{(1 - \min\left(1, |\varphi_1^n|^+\right))^2 + \epsilon} \right] \min\left(1, |\varphi_2^n|^+\right) \min\left(1, |\varphi_3^n|^+\right) \frac{(\varrho_3 - \varrho_2)^2}{\varrho_2 \varrho_3} \\
\mathcal{M}_1^n &= M_d (\varphi_1^n)^2 |1 - \varphi_1^n| \left(|\varphi_2^n| + |\varphi_3^n|\right) + M_c \frac{|\varphi_2^n| + |\varphi_3^n|}{|\varphi_2^n| + |\varphi_3^n| + \epsilon} + \mathcal{M}_w^n \min\left(1, |\varphi_1^n|^+\right) \\
\mathcal{M}_2^n &= -M_d (\varphi_1^n)^2 |1 - \varphi_1^n| |\varphi_2^n| - M_c \frac{|\varphi_2^n|}{|\varphi_2^n| + |\varphi_3^n| + \epsilon} - \frac{\mathcal{M}_w^n}{(\varrho_3 - \varrho_2)} \left[\rho^n + (\varrho_3 - \varrho_1) \min\left(1, |\varphi_1^n|^+\right)\right] \\
\mathcal{M}_3^n &= -M_d (\varphi_1^n)^2 |1 - \varphi_1^n| |\varphi_3^n| - M_c \frac{|\varphi_3^n|}{|\varphi_2^n| + |\varphi_3^n| + \epsilon} + \frac{\mathcal{M}_w^n}{(\varrho_3 - \varrho_2)} \left[\rho^n + (\varrho_2 - \varrho_1) \min\left(1, |\varphi_1^n|^+\right)\right] \\
D_2^n &= D \left[1 + \left(\frac{\varrho_3 - \varrho_1}{\rho^n} \right) \min\left(1, |\varphi_1^n|^+\right) \right] \\
D_3^n &= D \left[1 + \left(\frac{\varrho_2 - \varrho_1}{\rho^n} \right) \min\left(1, |\varphi_1^n|^+\right) \right]
\end{aligned}
$$

où $|\varphi_1^n|^+$ désigne la partie positive de φ_1^n et ϵ une constante strictement positive inférieure à un. Cette discrétisation assure la positivité des coefficients de diffusion lorsque les paramètres d'ordre sortent de l'intervalle physique $[0, 1]$ et permet de vérifier la relation $\varphi_1^{n+1} + \varphi_2^{n+1} + \varphi_3^{n+1} = 1$.

Avec ces notations, la discrétisation semi-implicite en temps des équations de Cahn-Hilliard est

donnée par

- **Système I** *(deux équations)*

$$\frac{\varphi_1^{n+1}-\varphi_1^n}{\Delta t}+\mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_1^{n+1} = \nabla\cdot\left[\mathcal{M}_1^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1}+\left(D_3^n-D_2^n\right)\mathbf{j}^{n+1}\right] \quad \text{(III.125a)}$$

$$\tilde{\mu}_1^{n+1} = W_i'\left(\varphi_1^{n+1},\varphi_1^n\right)-\frac{3}{2}\sigma\epsilon\left[\theta\nabla^2\varphi_1^{n+1}+(1-\theta)\nabla^2\varphi_1^n\right] \quad \text{(III.125b)}$$

$$\frac{\varphi_2^{n+1}-\varphi_2^n}{\Delta t}+\mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_2^{n+1} = \nabla\cdot\left(\mathcal{M}_2^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1}+D_2^n\mathbf{j}^{n+1}\right) \quad \text{(III.125c)}$$

Le troisième paramètre d'ordre est quant à lui déduit par $\varphi_3^{n+1}=1-\varphi_1^{n+1}-\varphi_2^{n+1}$.

- **Système II** *(trois équations)*

$$\frac{\varphi_1^{n+1}-\varphi_1^n}{\Delta t}+\mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_1^{n+1} = \nabla\cdot\left[\mathcal{M}_1^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1}+\left(D_3^n-D_2^n\right)\mathbf{j}^{n+1}\right] \quad \text{(III.126a)}$$

$$\tilde{\mu}_1^{n+1} = W_i'\left(\varphi_1^{n+1},\varphi_1^n\right)-\frac{3}{2}\sigma\epsilon\left[\theta\nabla^2\varphi_1^{n+1}+(1-\theta)\nabla^2\varphi_1^n\right] \quad \text{(III.126b)}$$

$$\frac{\varphi_2^{n+1}-\varphi_2^n}{\Delta t}+\mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_2^{n+1} = \nabla\cdot\left(\mathcal{M}_2^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1}+D_2^n\mathbf{j}^{n+1}\right) \quad \text{(III.126c)}$$

$$\frac{\varphi_3^{n+1}-\varphi_3^n}{\Delta t}+\mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_3^{n+1} = \nabla\cdot\left(\mathcal{M}_3^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1}-D_3^n\mathbf{j}^{n+1}\right) \quad \text{(III.126d)}$$

où par souci de simplicité, on a introduit le flux $\mathbf{j}^{n+1}$ défini par

$$\mathbf{j}^{n+1}=\begin{cases}|1-\varphi_1^n|\nabla\varphi_2^{n+1}+|\varphi_2^n|\nabla\varphi_1^{n+1} & \textit{(deux équations)}\\ |\varphi_3^n|\nabla\varphi_2^{n+1}-|\varphi_2^n|\nabla\varphi_3^{n+1} & \textit{(trois équations)}\end{cases} \quad \text{(III.127)}$$

Cette contribution compositionnelle est discrétisée de manière semi-implicite pour réduire le coût numérique et des valeurs absolues sont utilisées pour assurer à nouveau la positivité des paramètres d'ordre discrétisés de manière explicite. Concernant le terme non linéaire $W_i'\left(\varphi_1^{n+1},\varphi_1^n\right)$ plusieurs discrétisations ont été proposées. On cite ici en particulier (*cf.* tableau (III.1)) la forme linéairement implicite présentée dans [18], la forme semi-implicite proposée par Boyer et Minjeaud [116] ou encore la forme totalement implicite. Cette dernière discrétisation ne permet pas d'obtenir une

implicite ($\theta=1$)	$W'\left(\varphi_1^{n+1}\right)$
linéairement implicite ($\theta=1$)	$W_i'\left(\varphi_1^n\right)+W_i''\left(\varphi_1^n\right)\left(\varphi_1^{n+1}-\varphi_1^n\right)$
semi-implicite ($\theta\geq 0.5$)	$W_i'\left(\dfrac{\varphi_1^{n+1}+\varphi_1^n}{2}\right)-\dfrac{1}{2}\left(1-\varphi_1^n-\varphi_1^{n+1}\right)\left(\varphi_1^{n+1}-\varphi_1^n\right)^2$

Tab. III.1: Discrétisations possibles du terme non-linéaire $W_i'\left(\varphi_1^{n+1},\varphi_1^n\right)$

estimation d'énergie ce qui conduit en pratique dans certains cas à la divergence de l'algorithme de Newton-Raphson. La forme linéairement implicite a l'avantage de faire disparaître les non linéarités. Dans ce cas, la résolution du système d'équation ne nécessite plus l'utilisation d'une méthode de type Newton-Raphson. Enfin, la discrétisation semi-implicite assure non seulement un contrôle de l'énergie de Cahn-Hilliard mais aussi une convergence d'ordre deux (pour Cahn-Hilliard) lorsqu'elle est associée à un θ-schéma avec $\theta\sim 0.5$. On présente sur la figure (III.6)-(III.8) une comparaison numérique de ces trois discrétisations sur un calcul diphasique de montée de bulle dans un milieu semi-infini sous l'effet des forces de flottaison avec Bo = 10 et Mo = 10^{-2}. Il s'agit d'un problème documentée dans [20] et repris ultérieurement dans le cadre de nos expériences numériques (*cf.*

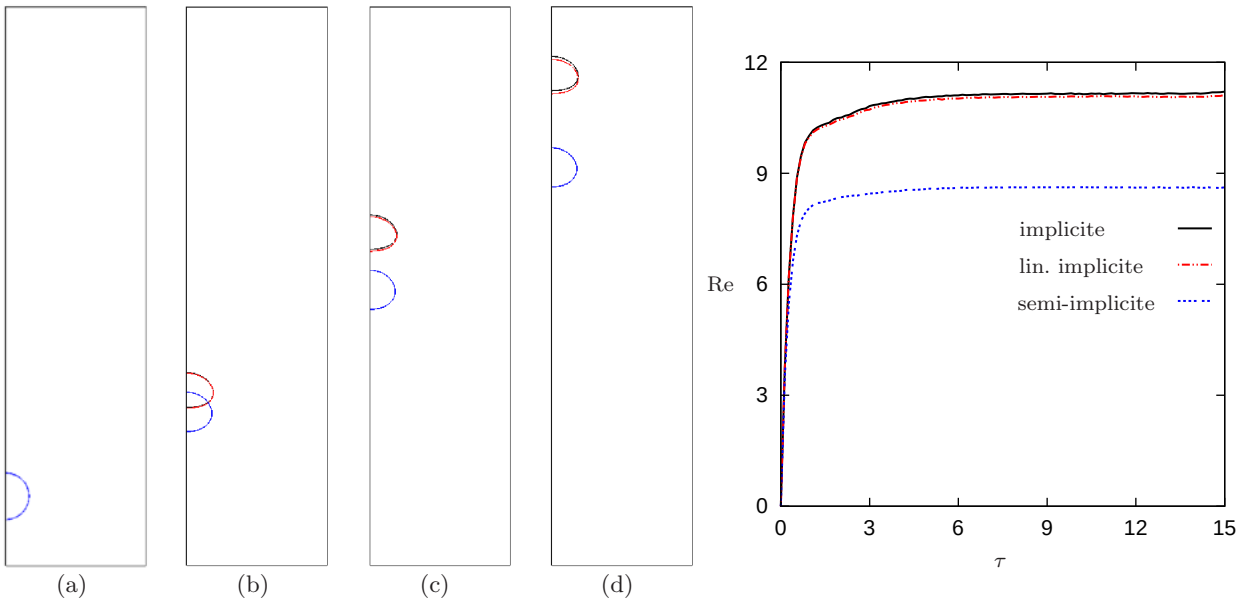


Fig. III.6: Comparaison des discrétisations implicite (noir, (a)), linéairement implicite (rouge,(b)) et semi-implicite (bleu, (c)) du terme non linéaire $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ pour un pas de temps $\Delta t = 10^{-4}$

(III.6)). Les résultats montrent l'évolution de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ à différents instants et l'évolution au cours du temps du nombre de Reynolds calculé à partir de la vitesse terminale de bulle. Ces résultats sont présentés pour les pas de temps $\Delta t = \{10^{-4}, 2\times10^{-5}, 4\times10^{-6}\}$. A partir des résultats proposés dans [20], on adopte ici comme résultats de référence ceux obtenus avec la discrétisation totalement implicite. On remarque pour ce problème que la discrétisation semi-implicite converge moins rapidement vers la solution de référence par rapport à la discrétisation linéairement implicite et nécessite l'utilisation de petits pas de temps.

En pratique, dans certaines de nos applications numériques réalisées dans le contexte de l'interaction corium-béton, nous avons été confrontés à des problèmes de non convergence de l'algorithme de Newton-Raphson lorsque le terme non linéaire $W_i'\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n\right)$ était discrétisé de manière totalement implicite ou linéairement implicite. En outre, les simulations numériques effectuées dans ce contexte mettent en jeu des fluides beaucoup plus complexes que ceux considérés dans ce problème et nécessitent souvent l'utilisation de petits pas de temps. Dans ces circonstances, afin de pouvoir effectuer ces simulations numériques sur des temps longs sans risque majeur d'une non convergence de l'algorithme de Newton-Raphson, on choisit dans ce travail la discrétisation semi-implicite qui assure un contrôle de l'énergie de Cahn-Hilliard.

Enfin, les conditions aux limites associées à cette discrétisation sont données par

$$\forall\, i = 1,2,3 \quad \varphi_i^{n+1} = \varphi_{i,D}^{n+1} \quad \text{et} \quad \mathbf{n}\cdot\left[\mathcal{M}_i^n \nabla \tilde{\mu}_1^{n+1}\right] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D^\varphi \tag{III.128a}$$

$$\mathbf{n}\cdot\left[\frac{3}{2}\sigma\epsilon\nabla\varphi_1^{n+1}\right] = \mathcal{A}(\alpha) \quad \text{et} \quad \forall\, i = 1,2,3\ \mathbf{n}\cdot\left[\mathcal{M}_i^n \nabla \tilde{\mu}_1^{n+1}\right] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^\varphi \tag{III.128b}$$

$$\forall\, i = 2,3 \quad \mathbf{n}\cdot\left[D_i^n \nabla \varphi_i^{n+1}\right] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^\varphi \tag{III.128c}$$

III.3.1.b Discrétisation en temps de l'équation d'énergie

Les paramètres d'ordre ayant été calculés au temps t^{n+1}, les propriétés physiques telles que la densité, la chaleur spécifique et la conductivité thermique sont discrétisées ici de manière implicite.

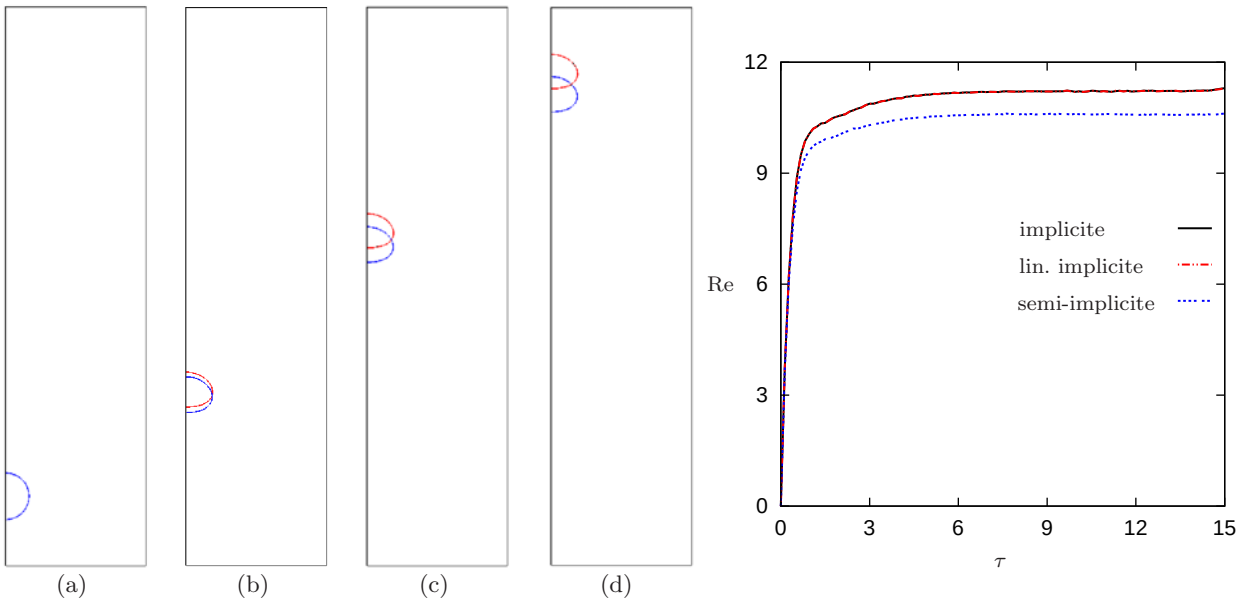


Fig. III.7: Comparaison des discrétisations implicite (noir, (a)), linéairement implicite (rouge,(b)) et semi-implicite (bleu, (c)) du terme non linéaire $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ pour un pas de temps $\Delta t = 2 \times 10^{-5}$.

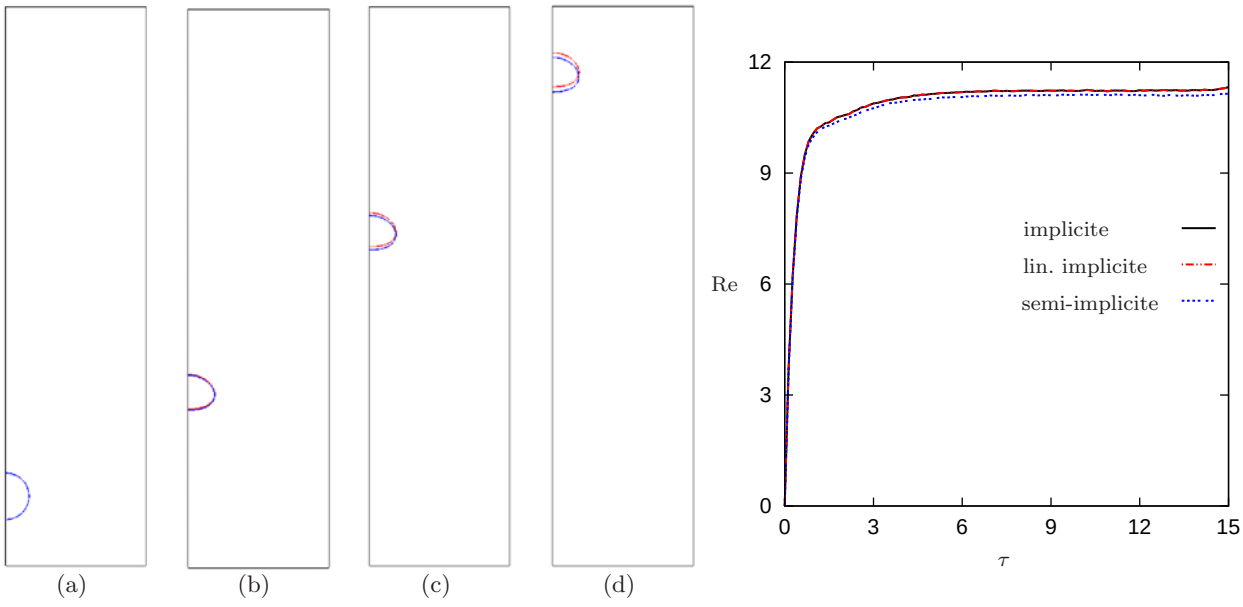


Fig. III.8: Comparaison des discrétisations implicite (noir, (a)), linéairement implicite (rouge,(b)) et semi-implicite (bleu, (c)) du terme non linéaire $W'(\varphi_1^{n+1}, \varphi_1^n)$ pour un pas de temps $\Delta t = 4 \times 10^{-6}$.

On introduit alors les notations suivantes

$$\rho^{n+1} = \rho\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_2^{n+1}, \varphi_3^{n+1}\right) \ ; \ k^{n+1} = k\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_2^{n+1}, \varphi_3^{n+1}\right) \ ; \ C_p^{n+1} = C_p\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_2^{n+1}, \varphi_3^{n+1}\right)$$

La dérivée en temps est également approchée par un schéma d'Euler implicite d'ordre un. La discrétisation en temps de l'équation d'énergie s'écrit

$$\rho^{n+1} C_p^{n+1} \left(\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla T^{n+1} \right) = \nabla \cdot \left(k^{n+1} \nabla T^{n+1} \right) \tag{III.129}$$

Les conditions aux bords associées sont données par

$$T^{n+1} = T_D^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_D^T \tag{III.130a}$$
$$\mathbf{n} \cdot \left[k^{n+1} \nabla T^{n+1} \right] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^T \tag{III.130b}$$

III.3.1.c Discrétisation en temps des équations de Navier-Stokes

On propose ici une extension de la discrétisation temporelle présentée dans [26] dans le cas où la vitesse du mélange est à divergence non nulle. La dérivée en temps est à nouveau approchée par un schéma d'Euler implicite d'ordre un et la vitesse d'advection est discrétisée de manière explicite. Dans cette dernière étape du schéma à pas fractionnaire, le potentiel chimique généralisé, les paramètres d'ordre ainsi que la température ont été calculés au temps t^{n+1}. La viscosité et la force capillaire peuvent ainsi être discrétisées de manière implicite et on notera par la suite

$$\eta^{n+1} := \eta\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_2^{n+1}, \varphi_3^{n+1}\right) \tag{III.131}$$
$$\boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1} = \tilde{\mu}^{n+1} \nabla \varphi_1^{n+1} \tag{III.132}$$

La discrétisation temporelle des équations de Navier-Stokes est donnée par [26]

$$\sqrt{\rho^{n+1}} \frac{\sqrt{\rho^{n+1}}\mathbf{u}^{n+1} - \sqrt{\rho^n}\mathbf{u}^n}{\Delta t} + \rho^{n+1}\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} + \frac{1}{2}\mathbf{u}^{n+1} \nabla \cdot \left(\rho^{n+1}\mathbf{u}^n\right) = -\nabla \tilde{p}^{n+1} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right) + \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1} + \rho^{n+1}\mathbf{g} \tag{III.133}$$

où le tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right)$ est donné par

$$\boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right) = \left[\eta^{n+1} \left(\nabla \mathbf{u}^{n+1} + \nabla^T \mathbf{u}^{n+1} \right) - \frac{2}{3} \eta^{n+1} \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} \mathbf{I} \right] \tag{III.134}$$

Les conditions aux limites associées à cette discrétisation sont données par

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_D^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_D^{\mathbf{u}} \tag{III.135a}$$
$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{t} \cdot \left[\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right) \right] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{D_s}^{\mathbf{u}} \tag{III.135b}$$
$$\mathbf{n} \cdot \left[\tilde{p}^{n+1} \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right) \right] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N^{\mathbf{u}} \tag{III.135c}$$

De nombreuses méthodes ont été proposées pour résoudre le problème couplé vitesse-pression dans le contexte des écoulements dilatables. On cite ici en particulier les méthodes de lagrangien augmenté, les méthodes de projection et les méthodes mixtes de pénalité-projection (*e.g.* [91]). Si les méthodes de lagrangien augmenté ou de pénalité-projection sont plus précises que la méthode de projection (*e.g.* conservation de la masse, couche limite de pression, ...), elles peuvent en revanche s'avérer moins performantes. Dans le cadre de nos applications, puisqu'on utilise des éléments finis inf-sup stables de type $\mathbb{Q}_2/\mathbb{Q}_1$ pour le couple vitesse-pression, le terme de pénalisation conduit à un mauvais conditionnement de la matrice ce qui provoque une augmentation considérable du temps de calcul et empêche parfois la résolution du problème discret. Dans ce travail, pour simplifier la

résolution et réduire significativement le temps de calcul, on utilise une méthode de projection incrémentale qui sera utilisée sous sa forme algébrique dans le cadre de nos applications numériques (*cf.* la section (III.3.2)). Cela consiste à résoudre le bilan de quantité de mouvement sous la contrainte de la conservation de la masse à l'aide d'un schéma à pas fractionnaire en trois étapes.

La première étape dite de prédiction de vitesse consiste à résoudre le bilan de quantité de mouvement avec une pression discrétisée de manière explicite. Cette étape s'écrit

$$\sqrt{\rho^{n+1}}\frac{\sqrt{\rho^{n+1}}\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}-\sqrt{\rho^{n}}\mathbf{u}^{n}}{\Delta t}+\rho^{n+1}\mathbf{u}^{n}\cdot\nabla\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}+\frac{1}{2}\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}\nabla\cdot\left(\rho^{n+1}\mathbf{u}^{n}\right)=-\nabla\tilde{\tilde{p}}^{n}$$
$$+\nabla\cdot\boldsymbol{\tau}\left(\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}\right)+\boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1}+\rho^{n+1}\mathbf{g} \quad \text{(III.136)}$$

La seconde étape consiste à projeter la vitesse $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ dans l'espace affine des vitesses satisfaisant le bilan de masse. Cette étape dite de projection s'écrit

$$\rho^{n+1}\left(\frac{\mathbf{u}^{n+1}-\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\Delta t}\right)+\nabla\phi = 0 \quad \text{(III.137a)}$$
$$\frac{\rho^{n+1}-\rho^{n}}{\Delta t}+\nabla\cdot\left(\rho^{n+1}\mathbf{u}^{n+1}\right) = 0 \quad \text{(III.137b)}$$
$$\rho^{n+1}\mathbf{u}^{n+1}\cdot\mathbf{n} = \rho^{n+1}\mathbf{u}_{D}\cdot\mathbf{n} \quad \text{sur } \Gamma_{D}^{\mathbf{u}} \quad \text{(III.137c)}$$

où ϕ est appelé incrément de pression. Ces schémas ont été appliqués avec succès comme par exemple dans le contexte des écoulements de convection naturelle à faible nombre de Mach (*e.g.* [91]). Néanmoins, dans le cadre de nos applications, nous avons rencontré des difficultés numériques qui nous ont conduit à remplacer la contrainte de conservation de la masse par la contrainte de divergence

$$\nabla\cdot\mathbf{u}^{n+1} = \nabla\cdot\left(D_{w}^{n+1}\mathbf{j}^{n+1}\right) \quad \text{(III.138)}$$

Cette contrainte présente également l'intérêt de dégénérer directement sous la contrainte de divergence nulle dans le cas purement diphasique et dans le cas où la diffusion massique est nulle. Dans ce cadre, la seconde étape consiste à projeter la vitesse $\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}$ dans l'espace affine des vitesses satisfaisant la contrainte de divergence (III.138). Elle s'écrit

$$\rho^{n+1}\left(\frac{\mathbf{u}^{n+1}-\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}}{\Delta t}\right)+\nabla\phi = 0 \quad \text{(III.139a)}$$
$$\nabla\cdot\mathbf{u}^{n+1} = \nabla\cdot\left(D_{w}^{n+1}\mathbf{j}^{n+1}\right) \quad \text{(III.139b)}$$
$$\rho^{n+1}\mathbf{u}^{n+1}\cdot\mathbf{n} = \rho^{n+1}\mathbf{u}_{D}\cdot\mathbf{n} \quad \text{sur } \Gamma_{D}^{\mathbf{u}} \quad \text{(III.139c)}$$

En pratique, cette étape est reformulé en un problème elliptique pour l'incrément de pression ϕ sous la forme

$$\nabla\cdot\left(\frac{\Delta t}{\rho^{n+1}}\nabla\phi\right) = \nabla\cdot\left(\tilde{\mathbf{u}}^{n+1}\right)-\nabla\cdot\left(D_{w}^{n+1}\mathbf{j}^{n+1}\right) \quad \text{(III.140a)}$$
$$\mathbf{n}\cdot\nabla\phi = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{D}^{\mathbf{u}} \quad \text{(III.140b)}$$
$$\phi = 0 \quad \text{sur } \Gamma_{N}^{\mathbf{u}} \quad \text{(III.140c)}$$

Enfin, la dernière étape consiste à réactualiser la vitesse $\mathbf{u}^{n+1}$ et la pression p^{n+1} sous la forme suivante

$$\mathbf{u}^{n+1} = \tilde{\mathbf{u}}^{n+1}-\frac{\Delta t}{\rho^{n+1}}\nabla\phi \quad \text{(III.141)}$$
$$p^{n+1} = p^{n}+\phi \quad \text{(III.142)}$$

III.3.2 Discrétisation en espace

Cette section est consacrée à la discrétisation spatiale des équations du modèle. Il s'agit d'une approximation éléments finis de type Galerkin avec des éléments linéaires de type $\mathbb{Q}_1$ pour les paramètres d'ordre et le potentiel chimique généralisé, des éléments linéaires de type $\mathbb{Q}_1$ pour la température et enfin des éléments quadratiques/linéaires inf-sup stables de type $\mathbb{Q}_2/\mathbb{Q}_1$ pour le couple vitesse-pression.

III.3.2.a Discrétisation en espace des équations de Cahn-Hilliard

Pour écrire la formulation variationnelle des équations de Cahn-Hilliard, les espaces fonctionnels suivants sont introduits

$$\begin{aligned}\mathscr{S}_D^{\varphi_i} &:= \left\{\varphi_i \in \mathrm{H}^1(\Omega) \mid \varphi_i = \varphi_{i,D} \text{ sur } \Gamma_D^{\varphi_i}\right\}\\ \mathscr{S}^{\varphi_i} &:= \left\{\varphi_i \in \mathrm{H}^1(\Omega) \mid \varphi_i = 0 \text{ sur } \Gamma_D^{\varphi_i}\right\}\\ \mathscr{S}^{\tilde{\mu}} &:= \mathrm{H}^1(\Omega)\end{aligned}$$

La formulation variationnelle des équations de Cahn-Hilliard s'écrit à partir des conditions aux limites (III.128) sous la forme

- **Système I** *(deux équations)*
  Trouver $\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_2^{n+1}, \tilde{\mu}^{n+1}\right) \in \mathscr{S}_D^{\varphi_1} \times \mathscr{S}_D^{\varphi_2} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$ tels que $\forall \left(\nu^{\varphi_1}, \nu^{\varphi_2}, \nu^{\tilde{\mu}}\right) \in \mathscr{S}^{\varphi_1} \times \mathscr{S}^{\varphi_2} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$

$$\begin{aligned}\int_\Omega \frac{\varphi_1^{n+1}-\varphi_1^n}{\Delta t}\nu^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_1^{n+1}\nu^{\tilde{\mu}} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_1^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1} + \left(D_3^n - D_2^n\right)\mathbf{j}^{n+1}\right]\cdot\nabla\nu^{\tilde{\mu}} &\text{(III.143a)}\\ \int_\Omega \tilde{\mu}_1^{n+1}\nu^{\varphi_1} - W_i'\left(\varphi_1^{n+1},\varphi_1^n\right)\nu^{\varphi_1} &= \int_\Omega \lambda\left[\theta\nabla^2\varphi_1^{n+1} + (1-\theta)\nabla^2\varphi_1^n\right]\cdot\nabla\nu^{\varphi_1} &\text{(III.143b)}\\ \int_\Omega \frac{\varphi_2^{n+1}-\varphi_2^n}{\Delta t}\nu^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_2^{n+1}\nu^{\varphi_2} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_2^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1} + D_2^n\mathbf{j}^{n+1}\right]\cdot\nabla\nu^{\varphi_2} &\text{(III.143c)}\end{aligned}$$

- **Système II** *(trois équations)*
  Trouver $\left(\varphi_1^{n+1}, \varphi_2^{n+1}, \varphi_3^{n+1}, \tilde{\mu}^{n+1}\right) \in \mathscr{S}_D^{\varphi_1} \times \mathscr{S}_D^{\varphi_2} \times \mathscr{S}_D^{\varphi_3} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$ tels que
  $\forall \left(\nu^{\varphi_1}, \nu^{\varphi_2}, \nu^{\varphi_3}, \nu^{\tilde{\mu}}\right) \in \mathscr{S}^{\varphi_1} \times \mathscr{S}^{\varphi_2} \times \mathscr{S}^{\varphi_3} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$

$$\begin{aligned}\int_\Omega \frac{\varphi_1^{n+1}-\varphi_1^n}{\Delta t}\nu^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_1^{n+1}\nu^{\tilde{\mu}} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_1^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1} + \left(D_3^n - D_2^n\right)\mathbf{j}^{n+1}\right]\cdot\nabla\nu^{\tilde{\mu}} &\text{(III.144a)}\\ \int_\Omega \tilde{\mu}_1^{n+1}\nu^{\varphi_1} - W_i'\left(\varphi_1^{n+1},\varphi_1^n\right)\nu^{\varphi_1} &= \int_\Omega \lambda\left[\theta\nabla^2\varphi_1^{n+1} + (1-\theta)\nabla^2\varphi_1^n\right]\cdot\nabla\nu^{\varphi_1} &\text{(III.144b)}\\ \int_\Omega \frac{\varphi_2^{n+1}-\varphi_2^n}{\Delta t}\nu^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_2^{n+1}\nu^{\varphi_2} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_2^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1} + D_2^n\mathbf{j}^{n+1}\right]\cdot\nabla\nu^{\varphi_2} &\text{(III.144c)}\\ \int_\Omega \frac{\varphi_3^{n+1}-\varphi_3^n}{\Delta t}\nu^{\varphi_3} + \mathbf{w}^n\cdot\nabla\varphi_3^{n+1}\nu^{\varphi_3} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_3^n\nabla\tilde{\mu}_1^{n+1} - D_3^n\mathbf{j}^{n+1}\right]\cdot\nabla\nu^{\varphi_3} &\text{(III.144d)}\end{aligned}$$

Les paramètres d'ordres vérifient des conditions aux limites de Dirichlet non homogènes sur Γ_D^{φ} ce qui nous amène à introduire les relèvements suivants

$$\forall\, i = 1,2,3 \quad \overline{\varphi}_i^n = \varphi_i^n - \varphi_{i,D} \quad \text{avec } \overline{\varphi}^n \in \mathscr{S}^{\varphi_i} \tag{III.145}$$

Avec ces notations, la formulation variationnelle s'écrit

- **Système I** *(deux équations)*
  Trouver $\left(\overline{\varphi}_1^{n+1}, \overline{\varphi}_2^{n+1}, \tilde{\mu}^{n+1}\right) \in \mathscr{S}^{\varphi_1} \times \mathscr{S}^{\varphi_2} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$ tels que $\forall \left(\nu^{\varphi_1}, \nu^{\varphi_2}, \nu^{\tilde{\mu}}\right) \in \mathscr{S}^{\varphi_1} \times \mathscr{S}^{\varphi_2} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$

$$\begin{aligned}
\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_1^{n+1} - \overline{\varphi}_1^n}{\Delta t} \nu^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_1^{n+1} \nu^{\tilde{\mu}} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_1^n \nabla \tilde{\mu}_1^{n+1} + \left(D_3^n - D_2^n\right) \mathbf{j}^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\tilde{\mu}} && \text{(III.146a)} \\
\int_\Omega \tilde{\mu}_1^{n+1} \nu^{\varphi_1} - W_i'\left(\overline{\varphi}_1^{n+1}, \overline{\varphi}_1^n\right) \nu^{\varphi_1} &= \int_\Omega \lambda \left[\theta \left(\nabla^2 \overline{\varphi}_1^{n+1} - \nabla^2 \overline{\varphi}_1^n\right) + \nabla \varphi_1^n\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_1} && \text{(III.146b)} \\
\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_2^{n+1} - \overline{\varphi}_2^n}{\Delta t} \nu^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_2^{n+1} \nu^{\varphi_2} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_2^n \nabla \tilde{\mu}_1^{n+1} + D_2^n \mathbf{j}^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_2} && \text{(III.146c)}
\end{aligned}$$

- **Système II** *(trois équations)*
  Trouver $\left(\overline{\varphi}_1^{n+1}, \overline{\varphi}_2^{n+1}, \overline{\varphi}_3^{n+1}, \tilde{\mu}^{n+1}\right) \in \mathscr{S}^{\varphi_1} \times \mathscr{S}^{\varphi_2} \times \mathscr{S}^{\varphi_3} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$ tels que
  $\forall \left(\nu^{\varphi_1}, \nu^{\varphi_2}, \nu^{\varphi_3}, \nu^{\tilde{\mu}}\right) \in \mathscr{S}^{\varphi_1} \times \mathscr{S}^{\varphi_2} \times \mathscr{S}^{\varphi_3} \times \mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$

$$\begin{aligned}
\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_1^{n+1} - \overline{\varphi}_1^n}{\Delta t} \nu^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_1^{n+1} \nu^{\tilde{\mu}} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_1^n \nabla \tilde{\mu}_1^{n+1} + \left(D_3^n - D_2^n\right) \mathbf{j}^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\tilde{\mu}} && \text{(III.147a)} \\
\int_\Omega \tilde{\mu}_1^{n+1} \nu^{\varphi_1} - W_i'\left(\overline{\varphi}_1^{n+1}, \overline{\varphi}_1^n\right) \nu^{\varphi_1} &= \int_\Omega \lambda \left[\theta \left(\nabla^2 \overline{\varphi}_1^{n+1} - \nabla^2 \overline{\varphi}_1^n\right) + \nabla \varphi_1^n\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_1} && \text{(III.147b)} \\
\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_2^{n+1} - \overline{\varphi}_2^n}{\Delta t} \nu^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_2^{n+1} \nu^{\varphi_2} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_2^n \nabla \tilde{\mu}_1^{n+1} + D_2^n \mathbf{j}^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_2} && \text{(III.147c)} \\
\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_3^{n+1} - \overline{\varphi}_3^n}{\Delta t} \nu^{\varphi_3} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_3^{n+1} \nu^{\varphi_3} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_3^n \nabla \tilde{\mu}_1^{n+1} - D_3^n \mathbf{j}^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_3} && \text{(III.147d)}
\end{aligned}$$

On introduit ici $\mathscr{S}_h^{\varphi_i}$ et $\mathscr{S}_h^{\tilde{\mu}}$ les espaces éléments finis approchant $\mathscr{S}^{\varphi_i}$ et $\mathscr{S}^{\tilde{\mu}}$ définis par

$$\begin{aligned}
\mathscr{S}_h^{\varphi_i} &:= \text{vect}\left\{\nu_k^{\varphi_i} \mid k \in [0, N_{inc}^{\varphi_i}]\right\} \\
\mathscr{S}_h^{\tilde{\mu}} &:= \text{vect}\left\{\nu_k^{\tilde{\mu}} \mid k \in [0, N_{inc}^{\tilde{\mu}}]\right\}
\end{aligned}$$

Dans ces conditions, le problème discret est donné par

- **Système I** *(deux équations)*
  Trouver $\left(\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1}, \overline{\varphi}_{2,h}^{n+1}, \tilde{\mu}_h^{n+1}\right) \in \mathscr{S}_h^{\varphi_1} \times \mathscr{S}_h^{\varphi_2} \times \mathscr{S}_h^{\tilde{\mu}}$ tels que $\forall \left(\nu_h^{\varphi_1}, \nu_h^{\varphi_2}, \nu_h^{\tilde{\mu}}\right) \in \mathscr{S}_h^{\varphi_1} \times \mathscr{S}_h^{\varphi_2} \times \mathscr{S}_h^{\tilde{\mu}}$

$$\begin{aligned}
\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{1,h}^n}{\Delta t} \nu^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} \nu^{\tilde{\mu}} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_{1,h}^n \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} + \left(D_{3,h}^n - D_{2,h}^n\right) \mathbf{j}_h^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\tilde{\mu}} && \text{(III.148a)} \\
\int_\Omega \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} \nu^{\varphi_1} - W_i'\left(\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1}, \overline{\varphi}_{1,h}^n\right) \nu^{\varphi_1} &= \int_\Omega \lambda \left[\theta \left(\nabla^2 \overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} - \nabla^2 \overline{\varphi}_{1,h}^n\right) + \nabla \varphi_{1,h}^n\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_1} && \text{(III.148b)} \\
\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{2,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{2,h}^n}{\Delta t} \nu^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_{2,h}^{n+1} \nu^{\varphi_2} &= -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_{2,h}^n + D_{2,h}^n \mathbf{j}_h^{n+1}\right] \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} \cdot \nabla \nu^{\varphi_2} && \text{(III.148c)}
\end{aligned}$$

- **Système II** *(trois équations)*
  Trouver $\left(\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1}, \overline{\varphi}_{2,h}^{n+1}, \overline{\varphi}_{3,h}^{n+1}, \tilde{\mu}_h^{n+1}\right) \in \mathscr{S}_h^{\varphi_1} \times \mathscr{S}_h^{\varphi_2} \times \mathscr{S}_h^{\varphi_3} \times \mathscr{S}_h^{\tilde{\mu}}$ tels que

$$\forall \left(\nu_h^{\varphi_1}, \nu_h^{\varphi_2}, \nu_h^{\varphi_3}, \nu_h^{\tilde{\mu}}\right) \in \mathscr{S}_h^{\varphi_1} \times \mathscr{S}_h^{\varphi_2} \times \mathscr{S}_h^{\varphi_3} \times \mathscr{S}_h^{\tilde{\mu}}$$

$$\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{1,h}^{n}}{\Delta t} \nu^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} \nu^{\tilde{\mu}} = -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_{1,h}^n \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} + \left(D_{3,h}^n - D_{2,h}^n\right) \mathbf{j}_h^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\tilde{\mu}} \quad \text{(III.149a)}$$

$$\int_\Omega \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} \nu^{\varphi_1} - W_i'\left(\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1}, \overline{\varphi}_{1,h}^{n}\right) \nu^{\varphi_1} = \int_\Omega \lambda \left[\theta\left(\nabla^2 \overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} - \nabla^2 \overline{\varphi}_{1,h}^{n}\right) + \nabla \varphi_{1,h}^n\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_1} \quad \text{(III.149b)}$$

$$\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{2,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{2,h}^{n}}{\Delta t} \nu^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_{2,h}^{n+1} \nu^{\varphi_2} = -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_{2,h}^n \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} + D_{2,h}^n \mathbf{j}_h^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_2} \quad \text{(III.149c)}$$

$$\int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{3,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{3,h}^{n}}{\Delta t} \nu^{\varphi_3} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_{3,h}^{n+1} \nu^{\varphi_3} = -\int_\Omega \left[\mathcal{M}_{3,h}^n \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} - D_{3,h}^n \mathbf{j}_h^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu^{\varphi_3} \quad \text{(III.149d)}$$

où le flux $\mathbf{j}_h^{n+1}$ est donné par

$$\mathbf{j}_h^{n+1} = \begin{cases} |1 - \varphi_{1,h}^n| \nabla \varphi_{2,h}^{n+1} + |\varphi_{2,h}^n| \nabla \varphi_{1,h}^{n+1} & \textit{(deux équations)} \\ |\varphi_{3,h}^n| \nabla \varphi_{2,h}^{n+1} - |\varphi_{2,h}^n| \nabla \varphi_{3,h}^{n+1} & \textit{(trois équations)} \end{cases} \quad \text{(III.150)}$$

Les paramètres d'ordre et le potentiel chimique généralisé sont respectivement décomposés dans les bases éléments finis sous la forme

$$\overline{\varphi}_{i,h}^{n+1} = \sum_j \Phi_{i,j}^{n+1} \nu_{j,h}^{\varphi_i} \quad \forall\, j \in [1, N_{inc}^{\varphi}[$$

$$\tilde{\mu}_h^{n+1} = \sum_j \Lambda_j^{n+1} \nu_{j,h}^{\tilde{\mu}} \quad \forall\, j \in [1, N_{inc}^{\tilde{\mu}}[$$

Avec ces notations, le problème discret peut encore s'écrire sous la forme d'un problème non linéaire donné par

$$\mathbf{R}^{\varphi_1}\left(\Phi^{n+1}, \Lambda^{n+1}\right) = 0 \quad \text{(III.151a)}$$

$$\mathbf{R}^{\tilde{\mu}}\left(\Phi^{n+1}, \Lambda^{n+1}\right) = 0 \quad \text{(III.151b)}$$

$$\mathbf{R}^{\varphi_2}\left(\Phi^{n+1}, \Lambda^{n+1}\right) = 0 \quad \text{(III.151c)}$$

$$\mathbf{R}^{\varphi_3}\left(\Phi^{n+1}, \Lambda^{n+1}\right) = 0 \quad \textit{(trois équations)} \quad \text{(III.151d)}$$

où Λ^{n+1} et Φ^{n+1} désignent respectivement le vecteur des composantes du potentiel chimique généralisé et la matrice des composantes des paramètres d'ordre dans les bases éléments finis définie par

$$\Phi^{n+1} = \begin{cases} \left(\Phi_1^{n+1}, \Phi_2^{n+1}\right) & \textit{(deux équations)} \\ \left(\Phi_1^{n+1}, \Phi_2^{n+1}, \Phi_3^{n+1}\right) & \textit{(trois équations)} \end{cases}$$

Les fonctions $\mathbf{R}^{\varphi_i}$ et $\mathbf{R}^{\tilde{\mu}}$ sont données par

$$\mathbf{R}_i^{\varphi_1} = \int_\Omega \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} \nu_i^{\varphi_1} - W_i'\left(\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1}, \overline{\varphi}_{1,h}^{n}\right) \nu_i^{\varphi_1} - \lambda \left[\theta\left(\nabla \overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} - \nabla \overline{\varphi}_{1,h}^{n}\right) + \nabla \varphi_{1,h}^n\right] \cdot \nabla \nu_i^{\varphi_1} \quad \text{(III.152a)}$$

$$\mathbf{R}_i^{\tilde{\mu}} = \int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{1,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{1,h}^{n}}{\Delta t} \nu_i^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_1^{n+1} \nu_i^{\tilde{\mu}} + \left[\mathcal{M}_{1,h}^n \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} + \left(D_{3,h}^n - D_{2,h}^n\right) \mathbf{j}_h^{n+1}\right] \cdot \nabla \nu_i^{\tilde{\mu}} \quad \text{(III.152b)}$$

$$\mathbf{R}_i^{\varphi_2} = \int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{2,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{2,h}^{n}}{\Delta t} \nu_i^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_{2,h}^{n+1} \nu_i^{\varphi_2} + \left(\mathcal{M}_{2,h}^n \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} + D_{2,h}^n \mathbf{j}_h^{n+1}\right) \cdot \nabla \nu_i^{\varphi_2} \quad \text{(III.152c)}$$

$$\mathbf{R}_i^{\varphi_3} = \int_\Omega \frac{\overline{\varphi}_{3,h}^{n+1} - \overline{\varphi}_{3,h}^{n}}{\Delta t} \nu_i^{\varphi_3} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \overline{\varphi}_{3,h}^{n+1} \nu_i^{\varphi_3} + \left(\mathcal{M}_{3,h}^n \nabla \tilde{\mu}_{1,h}^{n+1} - D_{3,h}^n \mathbf{j}_h^{n+1}\right) \cdot \nabla \nu_i^{\varphi_3} \quad \text{(III.152d)}$$

Pour résoudre le problème non linéaire (A.9c), on utilise une méthode de type Newton-Raphson. L'algorithme de résolution pour un système à deux ou trois équations s'écrit sous la forme suivante

- **Etape 0 :** initialisation $\left(\Phi^{(0)}, \Lambda^{(0)}\right) = (\Phi^n, \Lambda^n)$
- **Etape** $(k+1)$ **:** $\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right)$ étant donnés par l'étape k, calculer $\left(\Phi^{(k+1)}, \Lambda^{(k+1)}\right)$ tels que

$$\left(\begin{array}{ccc:c} \mathbf{J}^{\varphi_1\varphi_1} & \mathbf{J}^{\varphi_1\tilde{\mu}} & 0 & 0 \\ \mathbf{J}^{\tilde{\mu}\varphi_1} & \mathbf{J}^{\tilde{\mu}\tilde{\mu}} & \mathbf{J}^{\tilde{\mu}\varphi_2} & \mathbf{J}^{\tilde{\mu}\varphi_3} \\ \mathbf{J}^{\varphi_2\varphi_1} & \mathbf{J}^{\varphi_2\tilde{\mu}} & \mathbf{J}^{\varphi_2\varphi_2} & \mathbf{J}^{\varphi_2\varphi_3} \\ \hdashline 0 & \mathbf{J}^{\varphi_3\tilde{\mu}} & \mathbf{J}^{\varphi_3\varphi_2} & \mathbf{J}^{\varphi_3\varphi_3} \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \Phi_1^{(k+1)} - \Phi_1^{(k)} \\ \Lambda^{(k+1)} - \Lambda^{(k)} \\ \Phi_2^{(k+1)} - \Phi_2^{(k)} \\ \hdashline \Phi_3^{(k+1)} - \Phi_3^{(k)} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c} -\mathbf{R}^{\varphi_1}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) \\ -\mathbf{R}^{\tilde{\mu}}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) \\ -\mathbf{R}^{\varphi_2}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) \\ \hdashline -\mathbf{R}^{\varphi_3}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) \end{array}\right) \tag{III.153}$$

La solution du problème est donnée par $\left(\Phi^{(k_0)}, \Lambda^{(k_0)}\right)$ où k_0 est la première valeur de k vérifiant le critère

$$\|\mathbf{R}(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)})\| < \epsilon \tag{III.154}$$

où ϵ est une constante de précision donnée. Les blocs de la matrice Jacobienne sont définis sous la forme suivante

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}^{\varphi_1\varphi_1} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\varphi_1}}{\partial \Phi_1}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1 \le i \le N_{inc}^{\varphi} \text{ et } 1 \le j \le N_{inc}^{\varphi} \\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\varphi_1}}{\partial \Phi_{1,j}}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) = -\theta \int_\Omega \nabla \nu_j^{\varphi_1} \cdot \nabla \nu_i^{\varphi_1} - \int_\Omega \frac{\partial W'}{\partial \varphi_1}\left(\varphi_1^{(k)}, \varphi_1^n\right) \nu_j^{\varphi_1} \nu_i^{\varphi_1} \\
\mathbf{J}^{\varphi_1\tilde{\mu}} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\varphi_1}}{\partial \Lambda}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1 \le i \le N_{inc}^{\varphi} \text{ et } 1 \le j \le N_{inc}^{\tilde{\mu}} \\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\varphi_1}}{\partial \Lambda_j}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) = \int_\Omega \nu_j^{\tilde{\mu}} \nu_i^{\varphi_1} \\
\mathbf{J}^{\tilde{\mu}\varphi_1} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_1}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1 \le i \le N_{inc}^{\tilde{\mu}} \text{ et } 1 \le j \le N_{inc}^{\varphi} \\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_{1,j}}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) \\
&= \int_\Omega \frac{1}{\Delta t} \nu_j^{\varphi_1} \nu_i^{\tilde{\mu}} + \mathbf{w}^n \cdot \nabla \nu_j^{\varphi_1} \nu_i^{\tilde{\mu}} + \begin{cases} \int_\Omega \left(D_{3,h}^n - D_{2,h}^n\right) |\varphi_{2,h}^n| \nabla \nu_j^{\varphi_1} \cdot \nabla \nu_i^{\tilde{\mu}} \textit{ (deux équations)} \\ 0 \textit{ (trois équations)} \end{cases} \\
\mathbf{J}^{\tilde{\mu}\tilde{\mu}} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\tilde{\mu}}}{\partial \Lambda}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1 \le i \le N_{inc}^{\tilde{\mu}} \text{ et } 1 \le j \le N_{inc}^{\tilde{\mu}} \\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\tilde{\mu}}}{\partial \Lambda_j}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) = \int_\Omega \mathcal{M}_{1,h}^n \nabla \nu_j^{\tilde{\mu}} \cdot \nabla \nu_i^{\tilde{\mu}} \\
\mathbf{J}^{\tilde{\mu}\varphi_2} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_2}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1 \le i \le N_{inc}^{\tilde{\mu}} \text{ et } 1 \le j \le N_{inc}^{\varphi} \\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_{2,j}}\left(\Phi^{(k)}, \Lambda^{(k)}\right) = \begin{cases} \int_\Omega \left(D_{3,h}^n - D_{2,h}^n\right) |1 - \varphi_{1,h}^n| \nabla \nu_j^{\varphi_2} \cdot \nabla \nu_i^{\tilde{\mu}} \textit{ (deux équations)} \\ \int_\Omega \left(D_{3,h}^n - D_{2,h}^n\right) |\varphi_{3,h}^n| \nabla \nu_j^{\varphi_2} \cdot \nabla \nu_i^{\tilde{\mu}} \textit{ (trois équations)} \end{cases}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{J}^{\tilde{\mu}\varphi_3} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_3}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1\leq i\leq N_{inc}^{\tilde{\mu}} \text{ et } 1\leq j\leq N_{inc}^{\varphi}\\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_{3,j}}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right) = -\int_\Omega \left(D_{3,h}^n - D_{2,h}^n\right)|\varphi_{2,h}^n|\nabla\nu_j^{\varphi_3}\cdot\nabla\nu_i^{\tilde{\mu}}\\
\mathbf{J}^{\varphi_2\varphi_1} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\varphi_2}}{\partial \Phi_1}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1\leq i\leq N_{inc}^{\varphi} \text{ et } 1\leq j\leq N_{inc}^{\varphi}\\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\varphi_2}}{\partial \Phi_{1,j}}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right) = \begin{cases}\displaystyle\int_\Omega D_{2,h}^n|\varphi_{2,h}^n|\nabla\nu_j^{\varphi_1}\cdot\nabla\nu_i^{\varphi_2} \textit{ (deux équations)}\\ 0 \textit{ (trois équations)}\end{cases}\\
\mathbf{J}^{\varphi_2\varphi_2} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\varphi_2}}{\partial \Phi_2}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1\leq i\leq N_{inc}^{\varphi} \text{ et } 1\leq j\leq N_{inc}^{\varphi}\\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_{2,j}}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right)\\
&= \int_\Omega \frac{1}{\Delta t}\nu_j^{\varphi_2}\nu_i^{\varphi_2} + \mathbf{w}^n\cdot\nabla\nu_j^{\varphi_2}\nu_i^{\varphi_2} + \begin{cases}\displaystyle\int_\Omega D_{2,h}^n|1-\varphi_{1,h}^n|\nabla\nu_j^{\varphi_2}\cdot\nabla\nu_i^{\varphi_2} \textit{ (deux équations)}\\ \displaystyle\int_\Omega D_{2,h}^n|\varphi_{3,h}^n|\nabla\nu_j^{\varphi_2}\cdot\nabla\nu_i^{\varphi_2} \textit{ (trois équations)}\end{cases}\\
\mathbf{J}^{\varphi_3\varphi_3} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\varphi_3}}{\partial \Phi_3}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1\leq i\leq N_{inc}^{\varphi} \text{ et } 1\leq j\leq N_{inc}^{\varphi}\\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\tilde{\mu}}}{\partial \Phi_{3,j}}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right) = \int_\Omega \frac{1}{\Delta t}\nu_j^{\varphi_3}\nu_i^{\varphi_3} + \mathbf{w}^n\cdot\nabla\nu_j^{\varphi_3}\nu_i^{\varphi_3} + D_{3,h}^n|\varphi_{2,h}^n|\nabla\nu_j^{\varphi_3}\cdot\nabla\nu_i^{\varphi_3}\\
\mathbf{J}^{\varphi_\ell\varphi_m} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\varphi_\ell}}{\partial \Phi_m}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1\leq i\leq N_{inc}^{\varphi}\ ;\ 1\leq j\leq N_{inc}^{\varphi} \text{ et } \ell,m=2,3\\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\varphi_\ell}}{\partial \Phi_{m,j}}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right) = -\int_\Omega D_{\ell,h}^n|\varphi_{\ell,h}^n|\nabla\nu_j^{\varphi_m}\cdot\nabla\nu_i^{\varphi_\ell}\\
\mathbf{J}^{\varphi_\ell\tilde{\mu}} &= \left[\frac{\partial \mathbf{R}^{\varphi_\ell}}{\partial \Lambda}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right)\right]_{i,j} \quad 1\leq i\leq N_{inc}^{\varphi}\ ;\ 1\leq j\leq N_{inc}^{\tilde{\mu}} \text{ et } \ell=2,3\\
&= \frac{\partial \mathbf{R}_i^{\varphi_\ell}}{\partial \Lambda_j}\left(\Phi^{(k)},\Lambda^{(k)}\right) = \int_\Omega \mathcal{M}_\ell\nabla\nu_j^{\tilde{\mu}}\cdot\nabla\nu_i^{\varphi_\ell}
\end{aligned}
$$

On constate ici qu'à l'exception du bloc $\mathbf{J}^{\varphi_1\varphi_1}$, l'ensemble des autres blocs ne changent pas d'une itération à l'autre dans l'algorithme de Newton. Par conséquent, pour diminuer le temps de calcul, seuls les termes qui interviennent dans le bloc $\mathbf{J}^{\varphi_1\varphi_1}$ seront réassemblés à chaque itération.

Dans le cadre de nos applications, la résolution du système (III.153) est effectuée soit à l'aide d'un solveur direct proposé par la librairie UMFPACK [44], soit par un solveur itératif GMRES avec un préconditionnement ILU0.

III.3.2.b Discrétisation en espace de l'équation d'énergie

Les conditions aux limites associées à l'équation d'énergie (III.130) nous amènent à définir les espaces fonctionnels suivants

$$\mathscr{T}_D := \left\{\mathcal{T}\in \mathrm{H}^1(\Omega)^d \mid \mathcal{T} = T_D \text{ sur } \Gamma_D^T\right\} \quad ; \quad \mathscr{T} := \left\{\mathcal{T}\in \mathrm{H}^1(\Omega)^d \mid \mathcal{T} = 0 \text{ sur } \Gamma_D^T\right\}$$

Avec ces notations, la formulation variationnelle de l'équation d'énergie (III.129) s'écrit

Trouver $T^{n+1} \in \mathscr{T}_D$ tel que pour tout $\mathcal{T} \in \mathscr{T}_D$

$$\int_\Omega \rho^{n+1} C_p^{n+1} \left[\left(\frac{T^{n+1} - T^n}{\Delta t} \right) \mathcal{T} + \left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla T^{n+1} \right) \mathcal{T} \right] = - \int_\Omega k^{n+1} \nabla T^{n+1} \cdot \nabla \mathcal{T} \quad \text{(III.155)}$$

Comme la température vérifie des conditions aux limites de Dirichlet non-homogènes sur Γ_D^T, on introduit le relèvement suivant

$$\overline{T}^n = T^n - T_D \quad \text{avec } \overline{T}^n \in \mathscr{T} \quad \text{(III.156)}$$

La formulation variationnelle est alors donnée par

Trouver $\overline{T}^{n+1} \in \mathscr{T}$ tel que pour tout $\mathcal{T} \in \mathscr{T}$

$$\int_\Omega \rho^{n+1} C_p^{n+1} \left[\left(\frac{\overline{T}^{n+1} - \overline{T}^n}{\Delta t} \right) \mathcal{T} + \left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla \overline{T}^{n+1} \right) \mathcal{T} \right] = - \int_\Omega k^{n+1} \nabla \overline{T}^{n+1} \cdot \nabla \mathcal{T} - \int_\Omega \rho^{n+1} C_p^{n+1} \left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla T_D \right) \mathcal{T} - \int_\Omega k^{n+1} \nabla T_D \cdot \nabla \mathcal{T} \quad \text{(III.157)}$$

On définit par $\mathscr{T}_h$ l'espace éléments finis approchant $\mathscr{T}$ défini par

$$\mathcal{T}_h := \text{vect} \left\{ \mathcal{T}_i \mid i \in [0, N_{inc}^T] \right\} \quad \text{(III.158)}$$

Finalement, l'approximation éléments finis de type Galerkin pour l'équation d'énergie s'écrit

Trouver $\overline{T}_h^{n+1} \in \mathscr{T}_h$ tel que pour tout $i \in [0, N_{inc}^T]$

$$\int_\Omega \rho^{n+1} C_p^{n+1} \left[\left(\frac{\overline{T}_h^{n+1} - \overline{T}_h^n}{\Delta t} \right) \mathcal{T}_i + \left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla \overline{T}_h^{n+1} \right) \mathcal{T}_i \right] = - \int_\Omega k^{n+1} \nabla \overline{T}_h^{n+1} \cdot \nabla \mathcal{T}_i - \int_\Omega \rho^{n+1} C_p^{n+1} \left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla T_D \right) \mathcal{T}_i - \int_\Omega k^{n+1} \nabla T_D \cdot \nabla \mathcal{T}_i \quad \text{(III.159)}$$

Le système linéaire associé est résolu soit à l'aide d'un solveur direct proposé par la librairie UMFPACK [44], soit par un solveur itératif GMRES avec un préconditionnement ILU0.

III.3.2.c Discrétisation en espace des équations de Navier-Stokes

Pour écrire la formulation variationnelle des équations de Navier-Stokes (III.136), les espaces fonctionnels suivants sont introduits

$$\begin{aligned} \mathcal{U} &:= \left\{ \mathbf{v} \in \mathrm{H}^1(\Omega)^d \mid \mathbf{v} = \mathbf{u}_D \text{ sur } \Gamma_D^{\mathbf{u}} \text{ et } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_{D_s}^{\mathbf{u}} \right\} \\ \mathcal{X} &:= \left\{ \mathbf{v} \in \mathrm{H}^1(\Omega)^d \mid \mathbf{v} = 0 \text{ sur } \Gamma_D^{\mathbf{u}} \text{ et } \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_{D_s}^{\mathbf{u}} \right\} \\ \mathcal{Q} &:= \left\{ q \in \mathrm{L}^2(\Omega) \right\} \end{aligned}$$

Afin de simplifier les notations, on définit $\boldsymbol{\mathcal{F}}^{n+1} = \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1} + \rho^{n+1} \mathbf{g}$. Les conditions aux limites associées aux équations de Navier-Stokes conduisent à la formulation variationnelle suivante

Trouver $\mathbf{u}^{n+1} \in \mathcal{U}$ et $p^{n+1} \in \mathcal{Q}$ tels que $\forall\, \mathbf{v} \in \mathcal{X}$ et $\forall\, q \in \mathcal{Q}$

$$\int_\Omega \sqrt{\rho^{n+1}} \frac{\sqrt{\rho^{n+1}} \mathbf{u}^{n+1} - \sqrt{\rho^n} \mathbf{u}^n}{\Delta t} \cdot \mathbf{v} + \int_\Omega \boldsymbol{\tau} \left(\mathbf{u}^{n+1} \right) : \nabla \mathbf{v} + \frac{1}{2} \int_\Omega \left[\rho^{n+1} \left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla \right) \mathbf{u}^{n+1} \right] \cdot \mathbf{v} - \frac{1}{2} \int_\Omega \left[\rho^{n+1} \left(\mathbf{u}^n \cdot \nabla \right) \mathbf{v} \right] \cdot \mathbf{u}^{n+1} = \int_\Omega \tilde{p} \nabla \cdot \mathbf{v} + \int_\Omega \boldsymbol{\mathcal{F}}^{n+1} \cdot \mathbf{v} \quad \text{(III.160a)}$$

$$\int_\Omega q \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = - \int_\Omega D_w^{n+1} \mathbf{j}^{n+1} \cdot \nabla q \quad \text{(III.160b)}$$

Comme la vitesse vérifie des conditions aux limites de Dirichlet non-homogène sur $\Gamma_D^{\mathbf{u}}$, on introduit le relèvement $\overline{\mathbf{u}}^{n+1} = \mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}_D$ sur $\Gamma_D^{\mathbf{u}}$ avec $\overline{\mathbf{u}}^{n+1} \in \mathcal{X}$. La formulation variationnelle (III.160) s'écrit alors

Trouver $\overline{\mathbf{u}}^{n+1} \in \mathcal{X}$ et $p^{n+1} \in \mathcal{Q}$ tels que $\forall\, \mathbf{v} \in \mathcal{X}$ et $\forall\, q \in \mathcal{Q}$

$$\frac{m\left(\overline{\mathbf{u}}^{n+1}, \mathbf{v}\right)}{\Delta t} + \chi\left(\overline{\mathbf{u}}^{n+1}, \mathbf{v}\right) + d\left(\mathbf{v}, p^{n+1}\right) = \frac{m\left(\mathbf{u}_D, \mathbf{v}\right)}{\Delta t} - \chi\left(\mathbf{u}_D, \mathbf{v}\right) + f\left(\mathbf{v}\right) \tag{III.161a}$$

$$d\left(\overline{\mathbf{u}}^{n+1}, q\right) = g\left(q\right) - d\left(\mathbf{u}_D, q\right) \tag{III.161b}$$

où les formes bilinéaires $m(\cdot,\cdot)$, $d(\cdot,\cdot)$, $\chi(\cdot,\cdot)$ et les formes linéaires $f(\cdot)$, $g(\cdot)$ sont données par

$$\begin{aligned}
m\left(\cdot,\cdot\right) &: \mathrm{H}^1(\Omega)^d \times \mathrm{H}^1(\Omega)^d \to \mathbb{R} \\
&\quad (\mathbf{u}, \mathbf{v}) \mapsto \int_\Omega \sqrt{\rho^{n+1}}\sqrt{\rho}\mathbf{u}\cdot\mathbf{v} \\
d\left(\cdot,\cdot\right) &: \mathrm{H}^1(\Omega)^d \times \mathrm{L}^2(\Omega) \to \mathbb{R} \\
&\quad (\mathbf{u}, q) \mapsto -\int_\Omega q \nabla\cdot\mathbf{u} \\
\chi\left(\cdot,\cdot\right) &: \mathrm{H}^1(\Omega)^d \times \mathrm{H}^1(\Omega)^d \to \mathbb{R} \\
&\quad (\mathbf{u}, \mathbf{v}) \mapsto \int_\Omega \boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}\right) : \nabla\mathbf{v} + \frac{\rho^{n+1}}{2}\left\{\left[\rho^{n+1}\left(\mathbf{u}^n\cdot\nabla\right)\mathbf{u}\right]\cdot\mathbf{v} - \left[\rho^{n+1}\left(\mathbf{u}^n\cdot\nabla\right)\mathbf{v}\right]\cdot\mathbf{u}\right\} \\
f\left(\cdot\right) &: \mathrm{H}^1(\Omega)^d \to \mathbb{R} \\
&\quad \mathbf{v} \mapsto \int_\Omega \boldsymbol{\mathcal{F}}^{n+1}\cdot\mathbf{v} \\
g\left(\cdot\right) &: \mathrm{L}^2(\Omega) \to \mathbb{R} \\
&\quad q \mapsto -\int_\Omega D_w^{n+1}\mathbf{j}^{n+1}\cdot\nabla q
\end{aligned}$$

On définit ici $\mathcal{X}_h$ et $\mathcal{Q}_h$ comme les espaces éléments finis approchant $\mathcal{X}$ et $\mathcal{Q}$. Ils sont donnés par

$$\begin{aligned}
\mathcal{X}_h &:= \mathrm{vect}\left\{\mathbf{v}_i \mid i \in [0, N_{inc}^{\mathbf{u}}]\right\} \\
\mathcal{Q}_h &:= \mathrm{vect}\left\{q_i \mid i \in [0, N_{inc}^{p}]\right\}
\end{aligned}$$

Chacune des formes linéaires et bilinéaires est désormais indicée par h. Avec ces notations, le problème discret s'écrit

Trouver $\overline{\mathbf{u}}_h^{n+1} \in \mathcal{X}_h$ et $p_h^{n+1} \in \mathcal{Q}_h$ tels que $\forall\, \mathbf{v}_h \in \mathcal{X}_h$ et $\forall\, q_h \in \mathcal{Q}_h$

$$\frac{m_h\left(\overline{\mathbf{u}}^{n+1}, \mathbf{v}\right)}{\Delta t} + \chi_h\left(\overline{\mathbf{u}}^{n+1}, \mathbf{v}\right) + d_h\left(\mathbf{v}, p^{n+1}\right) = \frac{m_h\left(\mathbf{u}_D, \mathbf{v}\right)}{\Delta} - \chi_h\left(\mathbf{u}_D, \mathbf{v}\right) + f_h\left(\mathbf{v}\right) \tag{III.162a}$$

$$d_h\left(\overline{\mathbf{u}}^{n+1}, q\right) = g_h\left(q\right) - d_h\left(\mathbf{u}_D, q\right) \tag{III.162b}$$

Soit, sous la forme algébrique suivante

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\mathbf{M}}{\Delta t} + \mathbf{K} & \mathbf{D}^T \\ \mathbf{D} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{\mathbf{U}}^{n+1} \\ \mathbf{P}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\mathbf{M}\overline{\mathbf{U}}^n}{\Delta t} + \mathbf{F} \\ \mathbf{G} \end{bmatrix} \tag{III.163}$$

Les blocs matriciels $\mathbf{M}$, $\mathbf{K}$, $\mathbf{D}$, $\mathbf{F}$ et $\mathbf{G}$ sont donnés par

$$
\begin{aligned}
[\mathbf{M}]_{i,j} &= \left[\int_\Omega \sqrt{\rho^{n+1}}\sqrt{\rho}\mathbf{v}_i\cdot\mathbf{v}_j\right] \quad \forall\, i,j\in[0,N^{\mathbf{u}}_{inc}]\\
[\mathbf{K}]_{i,j} &= \left[\int_\Omega \boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{v}_i\right):\nabla\mathbf{v}_j + \frac{\rho^{n+1}}{2}\left\{\left[\left(\mathbf{u}^n\cdot\nabla\right)\mathbf{v}_i\right]\cdot\mathbf{v}_j - \left[\left(\mathbf{u}^n\cdot\nabla\right)\mathbf{v}_j\right]\cdot\mathbf{v}_i\right\}\right] \forall\, i,j\in[0,N^{\mathbf{u}}_{inc}]\\
[\mathbf{D}]_{i,j} &= \left[-\int_\Omega q_i\nabla\cdot\mathbf{v}_j\right] \quad \forall\, i\in[0,N^{p}_{inc}] \text{ et } \forall\, j\in[0,N^{\mathbf{u}}_{inc}]\\
[\mathbf{F}]_{i} &= \left[\int_\Omega \boldsymbol{\mathcal{F}}^{n+1}\cdot\mathbf{v}_i\right] \quad \forall\, i\in[0,N^{\mathbf{u}}_{inc}]\\
[\mathbf{G}]_{i} &= \left[-\int_\Omega D_w^{n+1}\mathbf{j}^{n+1}\cdot\nabla q_i\right] \quad \forall\, i\in[0,N^{p}_{inc}]
\end{aligned}
$$

Les blocs $\overline{\mathbf{U}}^{n+1}$ et $\overline{\mathbf{P}}^{n+1}$ désignent respectivement les composantes des vecteurs $\overline{\mathbf{u}}_h^{n+1}$ et p^{n+1} dans les bases éléments finis $\mathcal{X}_h$ et $\mathcal{Q}_h$.

Pour résoudre le problème (III.163), on utilise la méthode de projection incrémentale précédemment présentée (*cf.* la section (III.3.1)) et proposée ici sous sa forme algébrique. L'algorithme de résolution s'écrit

- Etape de prédiction de vitesse : calcul de $\tilde{\mathbf{U}}^{n+1}$

$$\mathbf{M}\left(\frac{\tilde{\mathbf{U}}^{n+1}-\overline{\mathbf{U}}^{n}}{\Delta t}\right)+\mathbf{K}\tilde{\mathbf{U}}^{n+1}+\mathbf{D}^T\overline{\mathbf{P}}^{n} = \mathbf{F} \tag{III.164}$$

- Etape de projection de vitesse : calcul de $\boldsymbol{\Phi}=\overline{\mathbf{P}}^{n+1}-\overline{\mathbf{P}}^{n}$

$$\Delta t\mathbf{D}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{D}^T\boldsymbol{\Phi} = \mathbf{D}\tilde{\mathbf{U}}^{n+1}-\mathbf{G} \tag{III.165}$$

- Etape de réactualisation : calcul de $\overline{\mathbf{U}}^{n+1}$ et $\overline{\mathbf{P}}^{n+1}$

$$\mathbf{M}\left(\frac{\overline{\mathbf{U}}^{n+1}-\overline{\mathbf{U}}^{n}}{\Delta t}\right)+\mathbf{D}^T\boldsymbol{\Phi} = 0 \tag{III.166}$$

$$\overline{\mathbf{P}}^{n+1} = \overline{\mathbf{P}}^{n}+\boldsymbol{\Phi} \tag{III.167}$$

En pratique, la matrice $\mathbf{D}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{D}^T$ est approchée par la matrice $\mathbf{L}$ de l'opérateur discret associé à un problème de Poisson avec des conditions aux limites de Neumann homogènes sur $\Gamma^{\mathbf{u}}_D\cup\Gamma^{\mathbf{u}}_{D_s}$ et des conditions aux limites de Dirichlet imposées sur $\Gamma^{\mathbf{u}}_N$ par pénalisation (*e.g.* [106]). La matrice $\mathbf{L}$ est donnée par

$$[\mathbf{L}]_{i,j} = \left[\int_\Omega \frac{1}{\rho}\nabla q_i\cdot\nabla q_j+\int_{\Gamma^{\mathbf{u}}_N}\alpha q_i q_j\right] \quad \forall\, i,\in[0,N^{p}_{inc}] \tag{III.168}$$

où α est un coefficient de pénalisation.

III.4 Stabilisation par viscosité entropique

Dans cette section, on s'intéresse à la stabilisation numérique des équations du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes anisotherme précédemment développé. Un tel traitement numérique s'avère nécessaire dans certaines de nos applications où les matériaux mis en jeu sont caractérisés par de faibles valeurs de viscosité, de diffusion massique et de diffusion thermique (*e.g.* $\eta\sim 10^{-4}\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$,

$D \sim 10^{-9}\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$, $k/\rho C_p \sim 10^{-7}\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-1}$ pour les mélanges corium-béton fondu). Plusieurs techniques ont été développées comme par exemple la méthode SUPG [29] ou encore la méthode de stabilisation par pénalité interne [30]. Dans ce travail, on s'intéresse plus particulièrement à la méthode de stabilisation par viscosité entropique récemment développée par Guermond *& al.* (*e.g.* [74, 75]). L'intérêt pratique de cette méthode est qu'elle permet un calcul simple de la viscosité artificielle tout en laissant inchangée la formulation variationnelle du problème considéré ainsi que son algorithme de résolution. De part sa formulation, cette viscosité peut également être vue comme une viscosité de sous-maille [73, 76] lorsque les échelles ne sont pas suffisamment résolues dans les phases. La méthode proposée correspond dans ce cas à une méthode de simulation numérique directe des interfaces avec viscosité de sous-maille [16]. Il n'est pas dans l'objectif de cette section de discuter de la modélisation des contributions sous mailles. Toutefois, le lecteur intéressé pourra se reporter aux références citées ainsi qu'à la discussion proposée sur le sujet dans l'introduction générale (*cf.* (I.4.2)).

A partir des développements réalisés par Guermond *& al.* , on se propose ici de décrire brièvement cette méthode que nous appliquerons par la suite à la contribution compositionnelle des équations de Cahn-Hilliard, à l'équation pour la température et aux équations de Navier-Stokes.

III.4.1 Principe de la méthode

Considérons une quantité, notée c, solution de l'équation de conservation suivante

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \beta \cdot \nabla c = \nabla \cdot (\kappa \nabla c) + \mathbf{f} \tag{III.169}$$

où $\mathbf{f}$, β et κ désignent respectivement les forces extérieures s'appliquant sur le système, la vitesse d'advection et le coefficient de diffusion. Par exemple, si $c = \rho\mathbf{u}$, $\kappa = \eta$ et $\mathbf{f} = \mathbf{g}$ alors l'équation (III.169) correspond exactement aux équations de Navier-Stokes. Le résidu numérique $E_h(\mathbf{x}, t)$ de l'équation d'entropie associée à l'équation (III.169) est défini par

$$E_h(\mathbf{x}, t) := \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{c^2}{2}\right) + \beta \cdot \nabla\left(\frac{c^2}{2}\right) - c\nabla \cdot [\kappa \nabla c] - \mathbf{f}c \tag{III.170}$$

La quantité $E_h(\mathbf{x}, t)$, encore appelée *résidu entropique*, peut être vue comme l'énergie de dissipation du système. La résolution de l'équation (III.169) munie de conditions aux limites et de conditions initiales lorsque $\kappa \ll 1$ conduit généralement à une sous résolution du problème. Dans ce cas, les deux situations suivantes sont envisageables

$$E_h(\mathbf{x}_0, t) \leq 0 \tag{III.171a}$$
$$E_h(\mathbf{x}_0, t) > 0 \tag{III.171b}$$

où $(\mathbf{x}_0, t)$ désigne un voisinage d'une région de forts gradients à un instant t. La première inégalité (III.171a) correspond à une dissipation d'énergie dans la zone de forts gradients. Dans ce cas, il n'est pas nécessaire de stabiliser les équations. Par contre, l'inégalité (III.171b) traduit une création et une accumulation d'énergie au cours du temps qui conduit au développement d'instabilités numériques.

Pour prendre en compte la condition de dissipation d'énergie dans le système d'équation, Guermond *& al.* proposent de calculer une viscosité artificielle appelée *viscosité entropique* s'appuyant sur le calcul du résidu entropique. La première étape consiste à définir un résidu entropique $E_h(\mathbf{x}, t)$ associé à l'équation aux dérivées partielles considérée (*cf.* (III.170)). On définit ensuite la taille locale de la maille K par

$$h_{_K} := \frac{diam(K)}{p} \tag{III.172}$$

où p désigne l'ordre des éléments finis utilisés. La troisième étape consiste à construire une vitesse locale à la maille K, notée $v_{_K}$, à partir du résidu entropique calculé sur la maille K. Cette vitesse est définie par

$$v_{_K} := h_{_K} \frac{\|E_h\|_{\infty,K}}{\|\beta^2\|_{\infty,\Omega}} \tag{III.173}$$

où $\|E_h\|_{\infty,K}$ et $\|\beta^2\|_{\infty,\Omega}$ désignent respectivement la norme maximale de E_h sur la maille K et la norme maximale de ${\beta_h}^2$ sur le domaine de calcul Ω. Enfin, la viscosité entropique, notée $\kappa_{_K}$, est définie à partir de (III.173) sous la forme

$$\kappa_{_K} := h_{_K} \min\left(c_1^{\kappa}\|\beta^2\|_{\infty,K}, c_2^{\kappa} v_{_K}\right) \tag{III.174}$$

où c_1^{κ} et c_2^{κ} sont des constantes. La valeur de la viscosité entropique définie par la relation (III.172) s'active lorsqu'il y a création d'énergie dans une maille et ne peut pas excéder la valeur de la viscosité d'un schéma de type upwind du première ordre (*i.e.* $c_1^{\kappa}\|\beta^2\|_{\infty,K}$). Une fois calculée, la viscosité entropique est finalement prise en compte dans la formulation variationnelle comme suit

$$\int_K \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \beta\cdot\nabla c\right)\phi_{_K} + \int_K (\kappa+\kappa_{_K})\,\nabla c\cdot\nabla\phi_{_K} = \int_K \mathbf{f}\phi_{_K} \tag{III.175}$$

III.4.2 Application au modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel

On se propose ici d'appliquer la méthode de stabilisation par viscosité entropique à la contribution compositionnelle des équations de Cahn-Hilliard. Pour cela, on considère un problème d'instabilités de Rayleigh-Taylor (*e.g.* [62, 144]) avec un nombre d'Atwood $\mathrm{At} = (\varrho_2 - \varrho_3)/(\varrho_2 + \varrho_3) = 0.5$ et un nombre de Reynolds $\mathrm{Re} = 10^3$. La géométrie du problème est $2D$ cartésienne et le domaine de calcul consiste en un rectangle $\Omega = [0, 0.5] \times [-2; 2]$. Sur les parois verticales de ce domaine, on impose des conditions aux limites de symétrie tandis que, sur les parois horizontales, on impose une condition à la limite de non-glissement pour la vitesse et des conditions de Neumann homogène pour les paramètres d'ordre.

Les conditions initiales sont définies par

$$\varphi_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left[10^2\left(z + 0.1\cos\left(2\pi x\right)\right)\right] \tag{III.176}$$

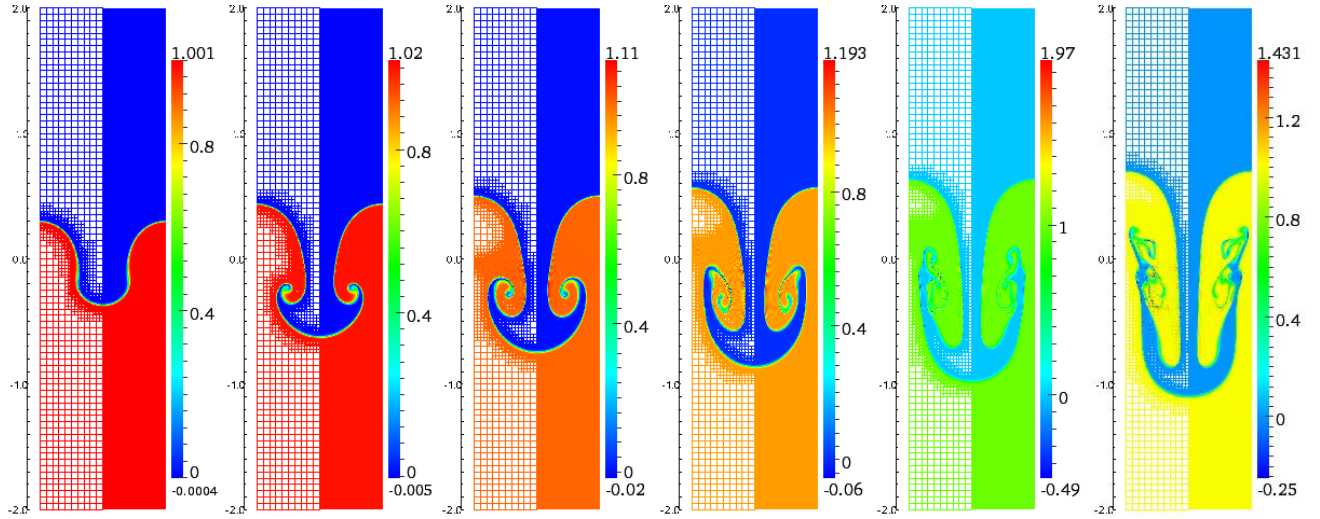
$$\varphi_3 = 1 - \varphi_2 \tag{III.177}$$

Les propriétés physiques et les paramètres numériques utilisés dans le cadre de cette application sont respectivement répertoriés dans les tableaux Tab.III.2 et Tab.III.3. La figure (III.9) présente

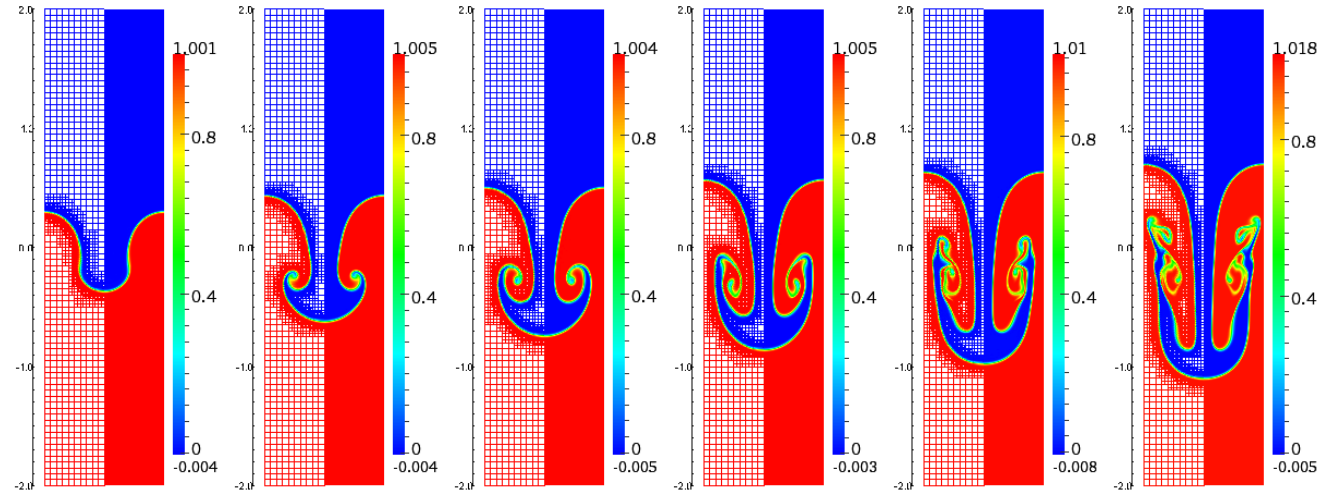
	ρ (kg.m^{-3})	η (Pa.s)	D (m^2.s^{-1})	g (m.s^{-2})
φ_2	3	$\sqrt{g}/\mathrm{Re}$	0	9.81
φ_3	1	η_2		

Tab. III.2: Propriétés physiques : problème d'instabilités de Rayleigh-Taylor

l'évolution des interfaces aux instants $t_{tryg} \in \{1, 1.5, 1.75, 2, 2.25, 2.5\}$ dans l'échelle de Tryggvason (*i.e.* $t_{tryg} = t\sqrt{\mathrm{At}g}$). Les résultats obtenus avec la stabilisation entropique présentent des structures similaires (*cf.* Fig.III.9 (bas)) à celles proposées dans [62] avec néanmoins quelques différences pour des temps longs. L'impact de la stabilisation entropique est également bien illustré par le raffinement de maillage adaptatif. En effet, contrairement au calcul effectué sans stabilisation (*cf.* Fig.III.9 (haut)) où de fortes instabilités numériques se développent, le maillage pour le calcul stabilisé (*cf.*

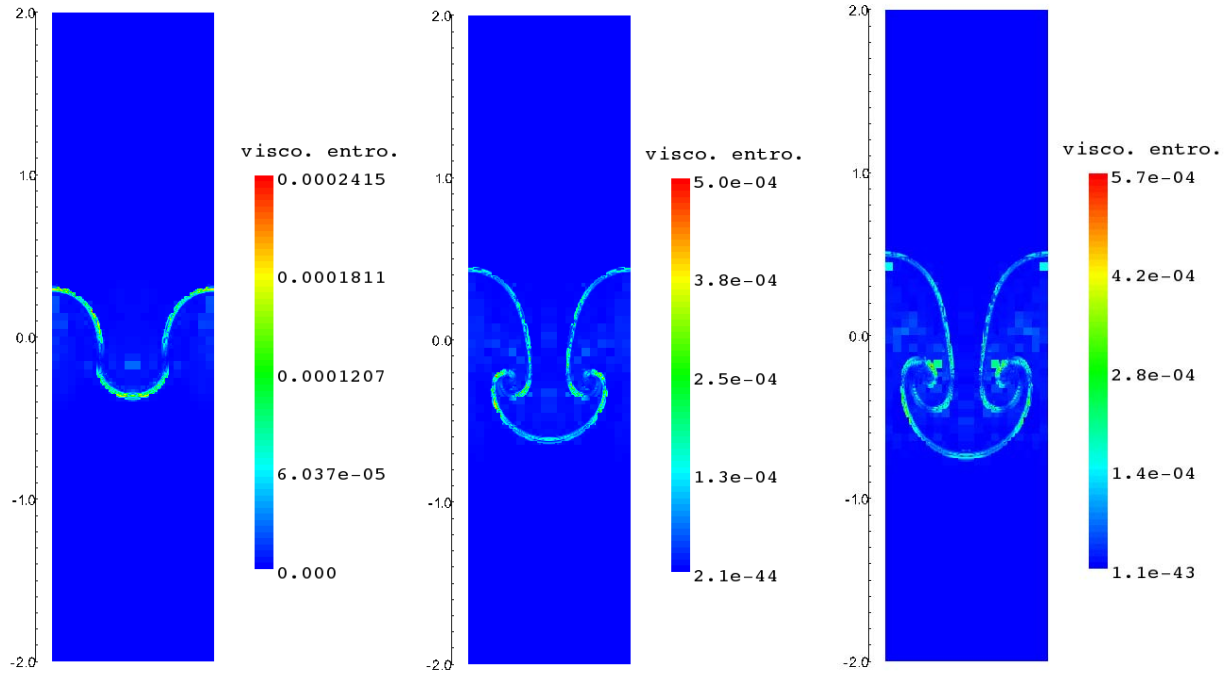


(a) $t_{tryg} = 1$ (b) $t_{tryg} = 1.5$ (c) $t_{tryg} = 1.75$ (d) $t_{tryg} = 2$ (e) $t_{tryg} = 2.25$ (f) $t_{tryg} = 2.5$

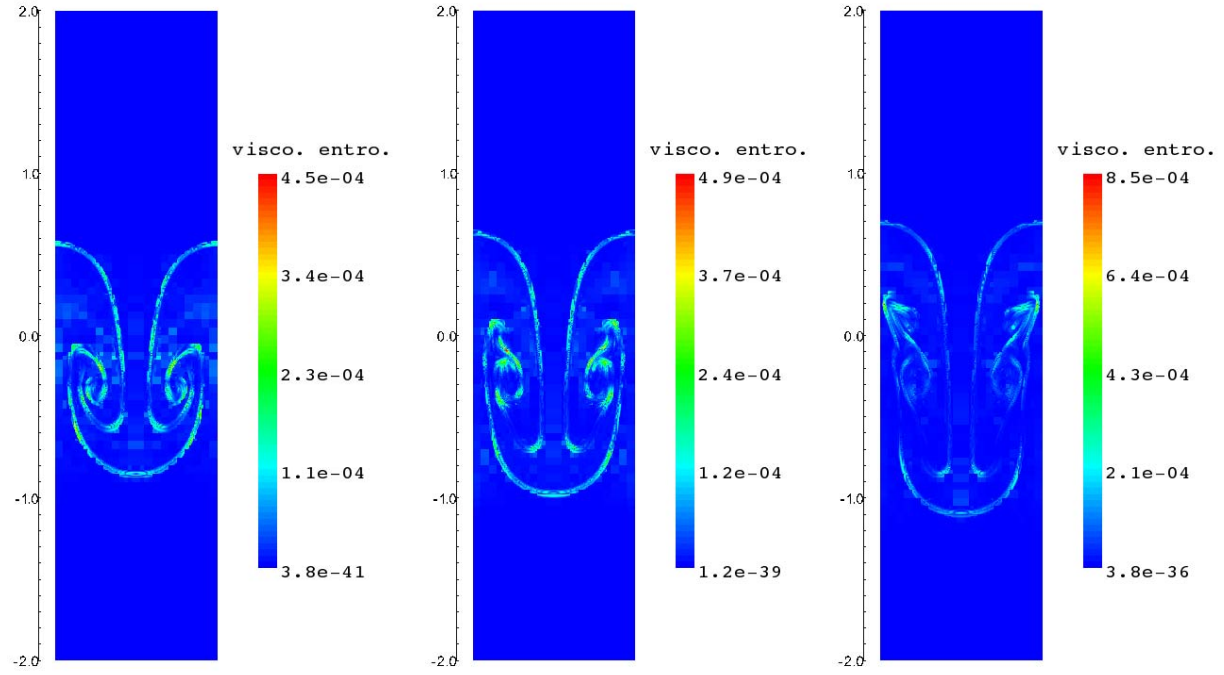


(g) $t_{tryg} = 1$ (h) $t_{tryg} = 1.5$ (i) $t_{tryg} = 1.75$ (j) $t_{tryg} = 2$ (k) $t_{tryg} = 2.25$ (l) $t_{tryg} = 2.5$

Fig. III.9: Instabilité de Rayleigh-Taylor avec At $= 0.5$ et Re $= 10^3$. Evolution de l'interface liquide-liquide (visualisation de φ_3) aux instants $t_{tryg} = \{1, 1.5, 1.75, 2, 2.25, 2.5\}$: sans stabilisation (en haut) , avec stabilisation (en bas).



(a) $t_{tryg} = 1$ (b) $t_{tryg} = 1.5$ (c) $t_{tryg} = 1.75$



(d) $t_{tryg} = 2$ (e) $t_{tryg} = 2.25$ (f) $t_{tryg} = 2.5$

Fig. III.10: Instabilité de Rayleigh-Taylor avec At $= 0.5$ et Re $= 10^3$. Evolution de la viscosité entropique aux instants $t_{tryg} = \{1, 1.5, 1.75, 2, 2.25, 2.5\}$.

discrétisation				stabilisation	
Δ_t	t_{final} (s)	Δ_x	Δ_y	c_1^D	c_2^D
$10^{-3}/\sqrt{\text{At}g}$	$2.5/\sqrt{\text{At}g}$	10	80	0.75	1.25

Tab. III.3: Paramètres numériques : problème d'instabilités de Rayleigh-Taylor

Fig.III.9 (bas)) reste uniquement raffiné dans l'interface liquide-liquide. Sur la figure (III.10), on peut voir l'évolution de la viscosité entropique aux instants $t_{tryg} \in \{1, 1.5, 1.75, 2, 2.25, 2.5\}$. Les résultats montrent que la viscosité entropique est maximale essentiellement dans la transition liquide-liquide où les gradients de φ_2 (*resp.* φ_3) sont importants.

III.5 Traitement numérique des conditions aux limites de sortie

La simulation numérique de nombreux problèmes physiques amène à définir un domaine de calcul borné avec un ou plusieurs bords artificiels. Dans ce cas, toute la difficulté réside dans la construction des conditions aux limites qui doivent être imposées sur ces parois artificielles. Le traitement numérique des conditions aux limites de sortie pour les modèles de type Cahn-Hilliard/Navier-Stokes pour un mélange de phases non miscibles s'inscrit dans cette problématique. Bien que des stratégies aient été proposées pour les équations de Navier-Stokes [24], le traitement des conditions aux limites ouvertes pour les modèles de type Cahn-Hilliard/Navier-Stokes reste encore, à notre connaissance, un problème ouvert. Les conditions aux limites actuellement utilisées pour simuler un bord libre sont données par

$$\text{(Cahn-Hilliard)} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{n} \cdot \left(\frac{3}{2} \sigma \epsilon \nabla \varphi_1 \right) & = & 0 \\ \mathbf{n} \cdot \left(M_0 \nabla \tilde{\mu}_1 \right) & = & 0 \end{bmatrix} \tag{III.178a}$$

$$\begin{aligned} \text{(Navier-Stokes)} \ \mathbf{n} \cdot \left[-\tilde{\tilde{p}} + \eta \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \right) \right] &= \mathbf{n} \cdot \left[-p_0 + \eta \left(\nabla \mathbf{u}_0 + \nabla \mathbf{u}_0^T \right) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \rho(\varphi_1) \left(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} \right)^- \left(\mathbf{u} - \mathbf{u}_0 \right) \end{aligned} \tag{III.178b}$$

où $(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n})^- = \min(\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}, 0)$. Dans (III.178b), $\mathbf{u}_0$ et p_0 désignent respectivement une vitesse et une pression de référence. La relation (III.178a) peut être vue comme une condition à la limite de sortie *ad-hoc* de type Neumann homogène tandis que la relation (III.178a) exprime une condition de flux nul. En pratique, l'utilisation de cette condition à la limite entraîne de fortes perturbations de l'écoulement en sortie du domaine. Pour les équations de Navier-Stokes, puisque la pression n'est pas uniforme dans un mélange de deux phases non miscibles, la condition (III.178b) entraîne une forte différence de pression et la formation de fortes vitesses lorsque les interfaces rentrent en contact avec la paroi artificielle.

Afin de réduire les perturbations et ainsi améliorer le comportement de l'écoulement en sortie du domaine, deux solutions complémentaires sont proposées [23].

III.5.1 Equations de Cahn-Hilliard

Pour remplacer la condition à la limite (III.178a), on suggère de translater les interfaces à travers la paroi artificielle à une vitesse d'advection ϑ_{ex}, c'est-à-dire

$$\frac{\partial \varphi_1}{\partial t} + \vartheta_{ex} \mathbf{n} \cdot \nabla \varphi_1 = 0 \tag{III.179}$$

A partir de l'équation (III.179), on propose une nouvelle condition à la limite de sortie sous la forme

$$\mathbf{n}\cdot\left[\frac{3}{2}\sigma\epsilon\nabla\varphi_1\right]=\begin{cases}-\dfrac{3\sigma\epsilon}{2\vartheta_{ex}}\dfrac{\partial\varphi_1}{\partial t} & \text{si } \vartheta_{ex}>0\\ 0 & \text{sinon}\end{cases} \tag{III.180}$$

Plusieurs choix sont possibles pour la vitesse d'advection comme par exemple une vitesse moyenne ou encore la partie positive de la vitesse normale calculée sur la paroi artificielle. Toutefois, en pratique, dans le cadre de nos applications, les résultats les plus satisfaisants ont été obtenus en considérant $\vartheta_{ex}=(\mathbf{n}\cdot\mathbf{u})^{+}$.

Afin d'illustrer nos propos, on se propose ici de tester numériquement la condition à la limite de sortie (III.180) sur un problème de montée d'une bulle de gaz dans un liquide pour un champ d'advection imposé avec un nombre de Morton $\mathrm{Mo}=g\eta_2^4(\varrho_2-\varrho_1)/\varrho_2^2\sigma^3=10^{-2.1}$ et un nombre de Bond $\mathrm{Bo}=4g(\varrho_2-\varrho_1)r_b^2/\sigma=10$. La géométrie du problème est $3D$ axisymétrique (*cf.* Fig.III.11) et consiste en un cylindre de rayon $R=2.5r_b$ et de hauteur $H=8r_b$ où $r_b=0.5\sqrt{\mathrm{Bo}\sigma/g(\varrho_2-\varrho_1)}$ est le rayon de bulle. Les autres conditions aux limites associées à ce problème s'écrivent

$$\mathbf{n}\cdot[M_0\nabla\tilde{\mu}_1] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_1\cup\Gamma_2\cup\Gamma_3\cup\Gamma_4 \tag{III.181}$$

$$\mathbf{n}\cdot\left[\frac{3}{2}\sigma\epsilon\nabla\varphi_1\right] = 0 \quad \text{sur } \Gamma_1\cup\Gamma_2\cup\Gamma_4 \tag{III.182}$$

Les conditions initiales sont définies par

$$\varphi_1 = \frac{1}{2}+\frac{1}{2}\tanh\left[2\frac{\sqrt{r^2+(z-1.5r_b)^{\,2}}-r_b}{\epsilon}\right] \tag{III.183}$$

$$\varphi_2 = 1-\varphi_1 \tag{III.184}$$

où ϵ désigne l'épaisseur d'interface. Le champ d'advection est défini par

$$\mathbf{u}=\left(0,0.05\left(1-\left(\frac{r}{R}\right)^{2}\right)\right) \tag{III.185}$$

Les tableaux (III.4) et (III.5) répertorient respectivement les propriétés physiques des fluides et les paramètres numériques utilisés pour cette application.

La figure (III.12) présente l'évolution des interfaces en sortie du domaine avec la condition à la limite usuelle (III.178a) (droite, (a),(b),(c)) et la nouvelle condition à la limite de sortie (III.180) (gauche, (a),(b),(c)). Les résultats montrent une nette amélioration du comportement de la bulle en sortie du domaine lorsque l'on utilise la condition à la limite (III.180). Cette condition permet en effet de transporter les interfaces en sortie du domaine tandis que la condition à la limite usuelle (III.178a) provoque la formation d'un angle de contact égal à $\pi/2$ entre l'interface et le bord supérieur du domaine.

	ρ (kg.m^{-3})	η (Pa.s)	σ (N.m^{-1})	g (m.s^{-2})
φ_1	1	$\eta_2/10^2$	7×10^{-2}	9.81
φ_2	10^3	$\left(\mathrm{Mo}{\varrho_1}^2\sigma^3/g(\varrho_2-\varrho_1)\right)^{\frac{1}{3}}$		

Tab. III.4: Propriétés physiques : traitement numérique des conditions aux limites de sorties

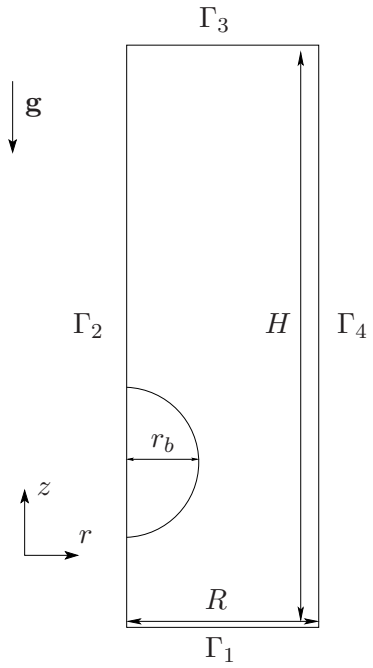


Fig. III.11: Domaine de calcul utilisé pour la validation numérique des conditions aux limites de sortie.

CH/NS			discrétisation			
$M^\star$	M_c	ϵ (m)	Δ_t	t_{final} (s)	Δ_x	Δ_y
5×10^2	0	$r_b/7$	10^{-3}	0.6	8	24

Tab. III.5: Paramètres numériques : traitement numérique des conditions aux limites de sorties

III.5.2 Equations de Navier-Stokes

Comme nous l'avons indiqué en introduction de cette section, la pression uniforme imposée en sortie du domaine de calcul par la condition à la limite (III.178b) entraîne une forte différence de pression et la formation de fortes vitesses. On propose ici un algorithme de séparation de pression [134], encore appelé *méthode de projection capillaire*, qui consiste en un schéma à pas fractionnaire en deux étapes.

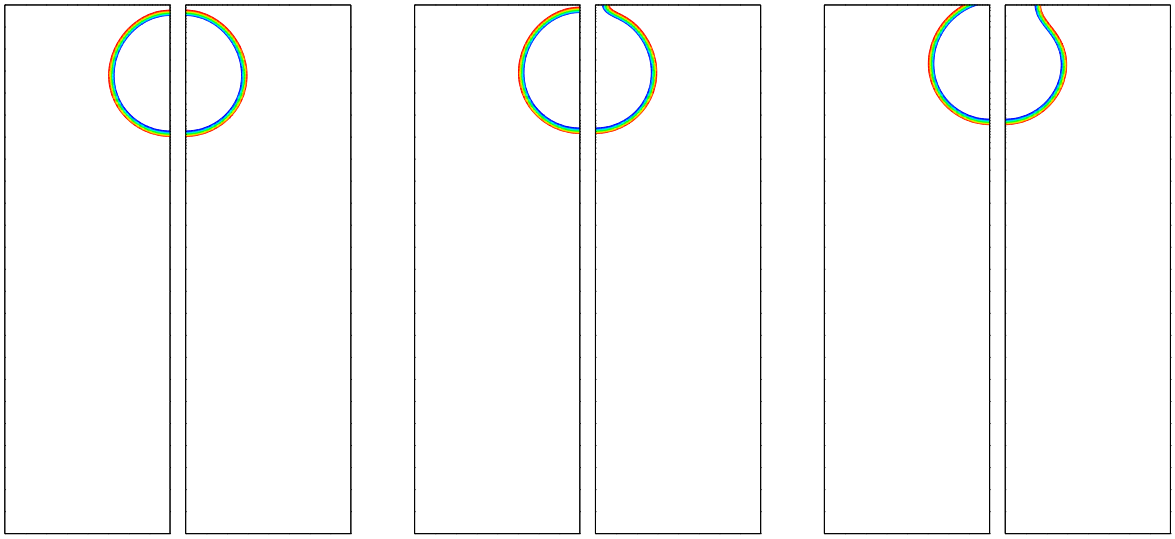
La première étape permet de prendre en compte le saut de pression induit par les forces capillaires dans une pression dite capillaire notée p_{cap}. Il s'agit plus particulièrement de résoudre le problème de type Darcy suivant

$$\sqrt{\rho^{n+1}\rho^n}\left(\frac{\tilde{\mathbf{u}}-\mathbf{u}^n}{\Delta t}\right)+\nabla p_{cap}^{n+1} = \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1} \tag{III.186a}$$

$$\nabla\cdot\tilde{\mathbf{u}} = \nabla\cdot\mathbf{u}^n \tag{III.186b}$$

où $\tilde{\mathbf{u}}$ désigne une vitesse prévisionnelle. En pratique, ce problème est reformulé sous la forme d'un problème elliptique pour la pression p_{cap}. Pour cela, on multiplie l'équation (III.186) par $\Delta t/\sqrt{\rho^{n+1}\rho^n}$ puis on prend la divergence de la relation obtenue

$$\nabla\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{\rho^{n+1}\rho^n}}\nabla p_{cap}^{n+1}\right)=\nabla\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{\rho^{n+1}\rho^n}}\boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1}\right) \tag{III.187}$$



(a) t_1 (b) t_2 (c) t_4

Fig. III.12: Comportement d'une bulle de gaz en sortie du domaine avec un champ de vitesse imposé. Conditions aux limites de sortie proposées (gauche) et usuelles (droite). Isovaleurs (20) du paramètre d'ordre φ_1 dans l'intervalle $[0.25; 0.75]$.

On associe à ce problème la condition à la limite de Neumann suivante

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p_{cap}^{n+1} = \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1} \tag{III.188}$$

La seconde étape consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes avec la condition à la limite de sortie (III.178b) qui s'appliquent désormais sur une pression dite dynamique $p_{dyn} = \tilde{\tilde{p}} - p_{cap}$ exempte des effets capillaires.

$$\sqrt{\rho^{n+1}} \frac{\sqrt{\rho^{n+1}}\mathbf{u}^{n+1} - \sqrt{\rho^n}\tilde{\mathbf{u}}}{\Delta t} + \rho^{n+1}\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} + \frac{1}{2}\mathbf{u}^{n+1}\nabla \cdot \left(\rho^{n+1}\mathbf{u}^n\right) = -\nabla p_{dyn}^{n+1} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right) + \rho^{n+1}\mathbf{g} \tag{III.189a}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \tag{III.189b}$$

Dans l'équation (III.189a), il est intéressant de remarquer que la vitesse prédite peut être éliminée à partir de la relation (III.186) sous la forme

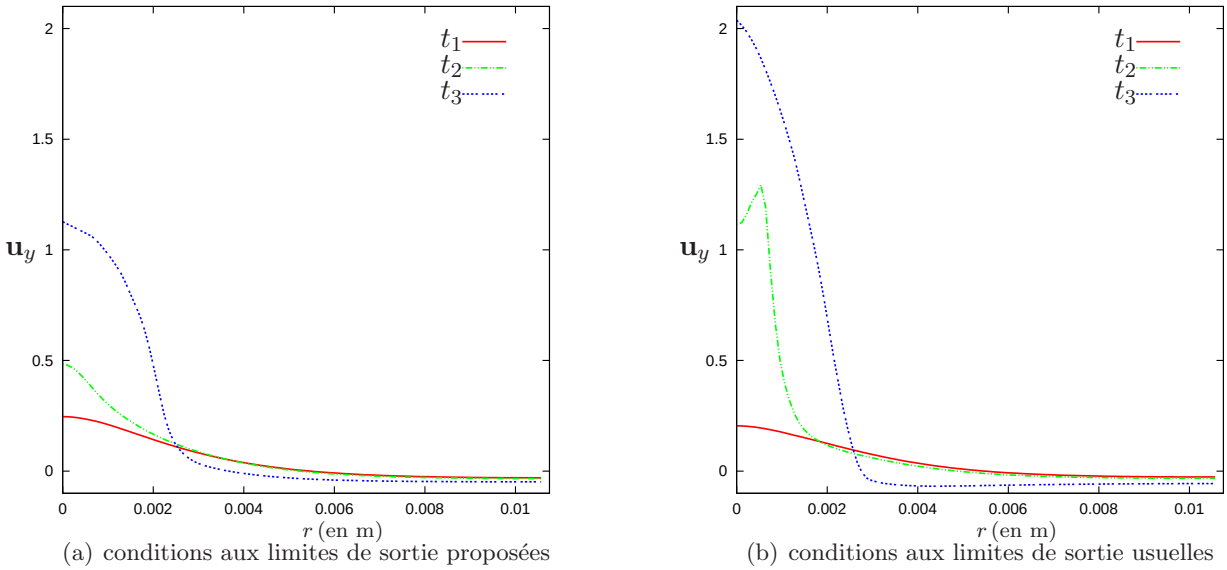
$$\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{u}^n - \frac{\Delta t}{\sqrt{\rho^{n+1}\rho^n}}\left(\nabla p_{cap}^{n+1} - \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1}\right) \tag{III.190}$$

La substitution de la relation (III.190) dans les équations (III.189) permet de réécrire les équations de Navier-Stokes sous la forme suivante

$$\sqrt{\rho^{n+1}} \frac{\sqrt{\rho^{n+1}}\mathbf{u}^{n+1} - \sqrt{\rho^n}\mathbf{u}^n}{\Delta t} + \rho^{n+1}\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^{n+1} + \frac{1}{2}\mathbf{u}^{n+1}\nabla \cdot \left(\rho^{n+1}\mathbf{u}^n\right) = -\nabla p_{dyn}^{n+1} - \nabla p_{cap}^{n+1} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}\left(\mathbf{u}^{n+1}\right) + \boldsymbol{\mathcal{F}}_{cap}^{n+1} + \rho^{n+1}\mathbf{g} \tag{III.191a}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \tag{III.191b}$$

Ce schéma numérique à pas fractionnaire en deux étapes consiste bien en un algorithme de séparation de pression [134] où la pression p_{cap}^{n+1} dans (III.191a) est déterminée par les équations (III.187).



(a) conditions aux limites de sortie proposées

(b) conditions aux limites de sortie usuelles

Fig. III.13: Composante verticale de la vitesse en sortie du domaine. Comparaison entre les conditions aux limites proposées (gauche) et les conditions de sorties usuelles (droite).

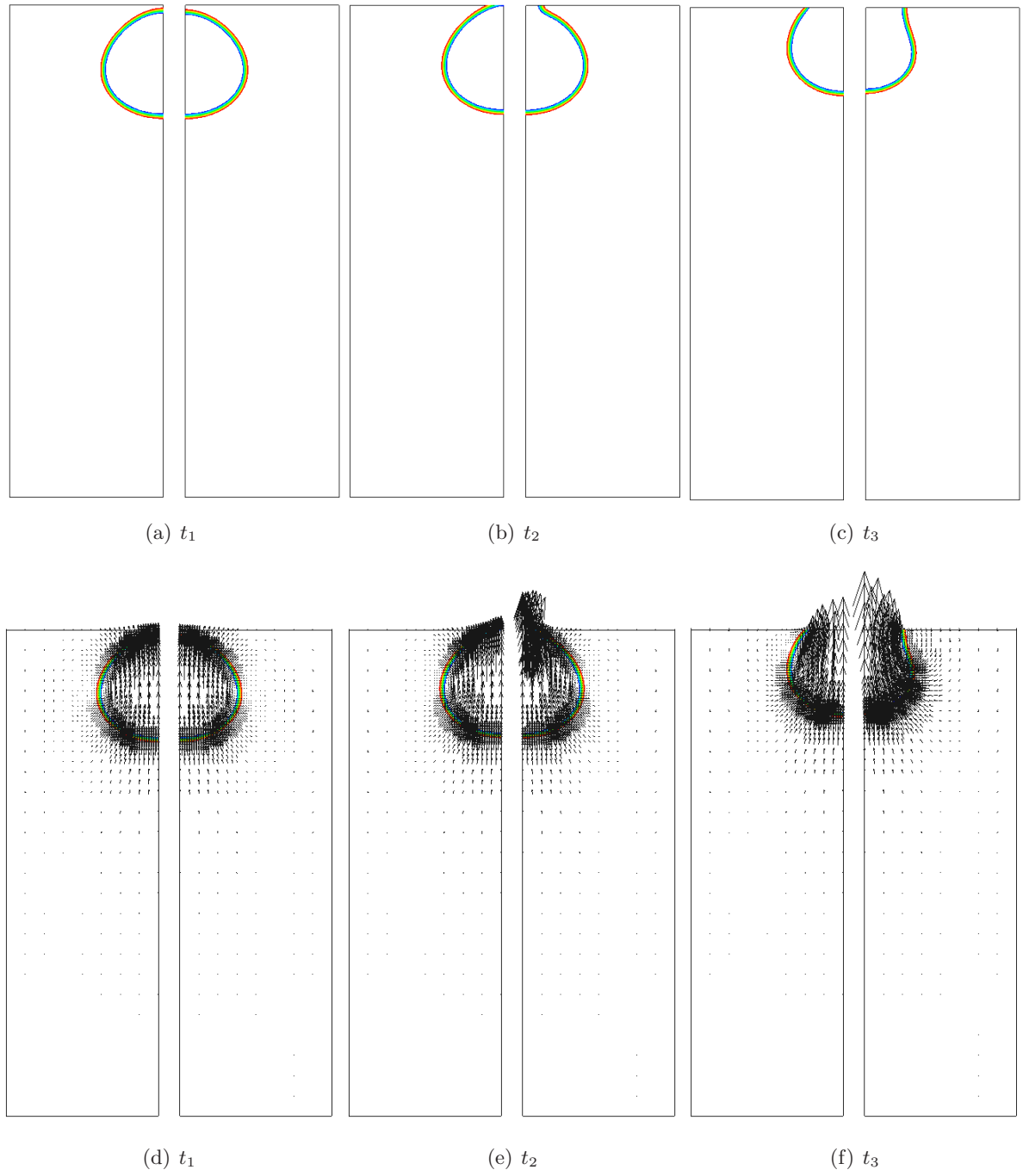
On se propose désormais de reprendre la précédente application numérique avec un champ de vitesse déterminé par la résolution des équations de Navier-Stokes. Comme le montrent les figures (III.14) et (III.15), l'aspiration de la bulle provoquée par la condition (III.178b) ainsi que la vitesse normale sur la paroi artificielle sont nettement diminuées. L'algorithme de séparation de pression améliore considérablement le comportement de la bulle en sortie du domaine.

III.6 Expériences numériques

Après avoir construit un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel, effectué son analyse asymptotique et décrit les schémas numériques associés, on présente ici quelques applications numériques dont l'objectif est non seulement de vérifier numériquement les propriétés de consistance énoncées dans la section (III.2.4) mais aussi de montrer, en vue de nos applications dans le contexte de l'interaction corium-béton (*cf.* chapitre (IV)), les potentialités d'application du modèle sur des problèmes complexes avec de forts contrastes de propriétés physiques.

La première application est "le test de Laplace compositionnel" (*cf.* section (III.6.1)) qui consiste en une bulle de gaz à l'équilibre autour de laquelle une couche de liquide va se mélanger dans un autre liquide. Il s'agit ici de vérifier numériquement les propriétés de consistance de la section (III.2.4) en comparant, d'une part, le saut de pression calculé par le modèle avec le saut de pression théorique donné par la loi de Laplace et, d'autre part, l'évolution en temps du paramètre d'ordre φ_2 associé à l'un des deux liquides à l'évolution en temps de la concentration c calculée par un modèle de Fick dans un domaine de calcul où la bulle de gaz est remplacée par une condition de flux nul.

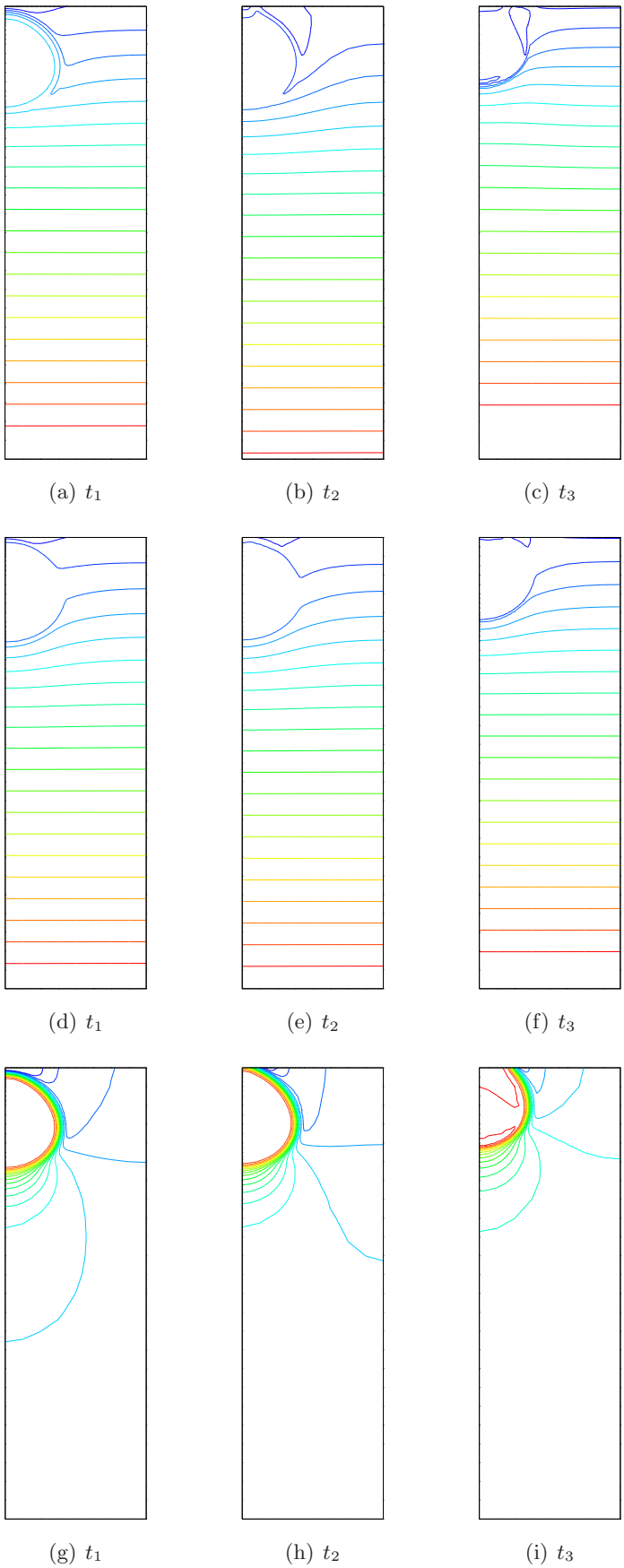
La deuxième application concerne l'ascension d'une bulle de gaz dans un milieu liquide semi-infini sous l'effet des forces de flottaison (*cf.* section (III.6.2)). Il s'agit d'une configuration diphasique documentée dans [20]. L'objectif est, d'une part, de montrer que le modèle développé permet de reproduire correctement la physique d'un écoulement diphasique connu et, d'autre part, d'illustrer l'influence du choix de la mobilité sur les résultats. Concernant ce dernier point, on vient comparer les résultats obtenus avec une mobilité dépendant du nombre de Péclet d'interface avec



(a) t_1 (b) t_2 (c) t_3

(d) t_1 (e) t_2 (f) t_3

Fig. III.14: Comportement d'une bulle de gaz en sortie du domaine. Conditions aux limites de sortie proposées (gauche) et usuelles (droite). Isovaleurs (20) du paramètre d'ordre φ_1 dans l'intervalle $[0.25; 0.75]$ avec le champ de vitesse.



(a) t_1 (b) t_2 (c) t_3

(d) t_1 (e) t_2 (f) t_3

(g) t_1 (h) t_2 (i) t_3

Fig. III.15: Isovaleurs de la pression $\tilde{\tilde{p}}$ (haut), de la pression dynamique p_{dyn} (centre) et de la pression capillaire p_{cap} (bas).

ceux obtenus avec une mobilité diphasique "standard".

Nous étudions ensuite une configuration diphasique documentée dans [68] consistant en un problème d'injection de gaz à travers un orifice dans un milieu liquide semi-infini (*cf.* section (III.6.3)). L'objectif ici est de montrer que le modèle est capable de reproduire correctement la physique d'un écoulement diphasique complexe.

On s'intéresse enfin à une configuration diphasique compositionnelle avec un problème d'injection de gaz (sans orifice) dans un système bi-constituant où l'une des deux espèces miscibles est également injectée (*cf.* section (III.6.4)). On commence par présenter un calcul dit de référence à partir duquel on fait varier le contraste de densité, le contraste de viscosité, la diffusion massique et la configuration géométrique (*i.e.* $2D$ cartésien périodique et $3D$ axisymétrique). En vue de nos applications dans le contexte de l'interaction corium-béton, l'objectif de ces calculs illustratifs, dont il n'existe pas à notre connaissance de cas similaires dans la littérature, est de montrer les potentialités d'applications du modèle sur des problèmes diphasiques compositionnels avec de forts contrastes de propriétés physiques.

Pour effectuer l'ensemble de ces calculs, nous avons implémenté le modèle dans une application éléments finis avec raffinement de maillage adaptatif [26] de la plate-forme de composants logiciels PELICANS développée à l'IRSN [1]. Enfin, dans l'ensemble des applications numériques, on utilise, d'une part, une mobilité diphasique qui dépend du nombre de Péclet (*cf.* (A.4)) et, d'autre part, la discrétisation semi-implicite de l'énergie de Cahn-Hilliard à l'exception de ceux présentés dans (III.6.3) car la condition à la limite de mouillabilité que nous avons implémentée ne prend pas en compte le θ-schéma.

III.6.1 Test de Laplace compositionnel

Dans cette section on se propose de vérifier numériquement les propriétés de consistances présentées précédemment dans la section (III.2.4). Pour cela, on s'intéresse à un problème diphasique compositionnel considérant un bulle de gaz à l'équilibre autour de laquelle un système bi-constituant va se mélanger. L'évolution de ce système est simulé avec le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel. L'objectif ici est de retrouver, d'une part, le saut de pression à travers l'interface liquide-gaz défini par la loi de Laplace avec la décroissance de l'énergie cinétique et, d'autre part, l'évolution d'un système compositionnel telle qu'elle est décrite par le modèle de Fick suivant

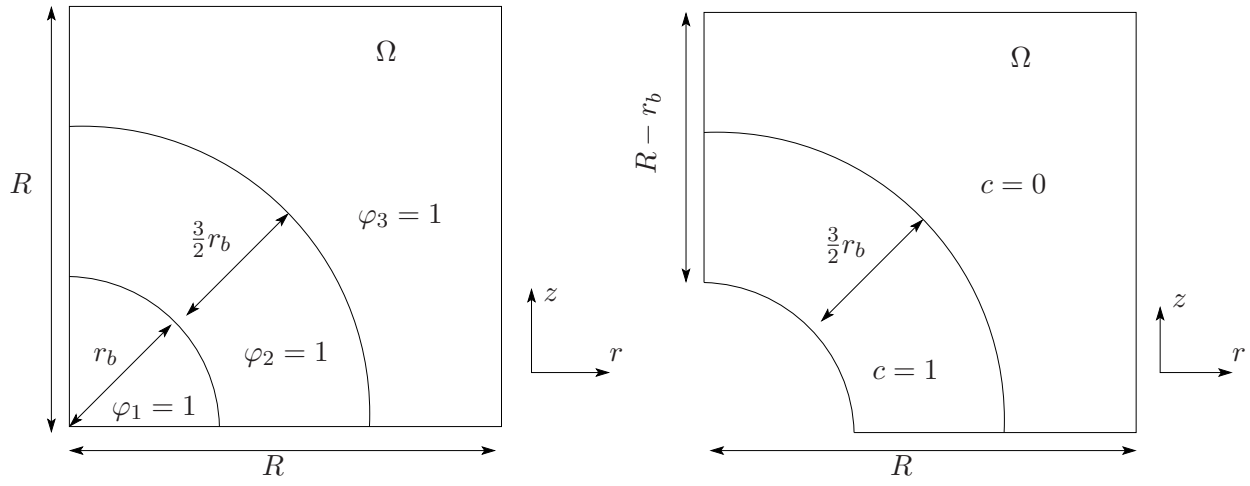
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c \tag{III.192}$$

où c et D désigne respectivement la concentration du mélange et un coefficient de diffusion massique. L'ensemble des propriétés physiques est répertorié dans le tableau (III.6). La géométrie du

	ρ (kg.m^{-3})	η (Pa.s)	σ (N.m)	D (m^2.s^{-1})	g (m.s^{-2})
φ_1	1	10^{-4}	7×10^{-2}	10^{-5}	9.81
φ_2	8×10^2	10^{-2}			
φ_3	10^3	10^{-2}			

Tab. III.6: Propriétés physiques : test de Laplace compositionnel

problème est $3D$ axisymétrique. Concernant le modèle CH/NS compositionnel, le domaine de calcul est défini par $\Omega = [0, R]^2$ avec $R = 2 \times 10^{-2}$m (*cf.* Fig.III.16). Les conditions initiales associées



(a) Modèle de CH/NS compositionnel (b) Modèle de Fick

Fig. III.16: Domaines de calcul utilisés pour le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel (gauche) et le modèle de Fick (droite).

à ce problème sont définies par

$$\varphi_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(-2\frac{\sqrt{r^2+z^2}-r_b}{\epsilon}\right) \tag{III.193}$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(2\frac{\sqrt{r^2+z^2}-2.5r_b}{\epsilon}\right) \tag{III.194}$$

$$\varphi_3 = 1 - \varphi_1 - \varphi_2 \tag{III.195}$$

où ϵ et $r_b = 4.25 \times 10^{-2}$m désignent respectivement l'épaisseur d'interface et le rayon de la bulle de gaz. Concernant les conditions aux limites, on impose sur l'ensemble des bords de Ω les conditions de symétrie suivantes

$$\forall\ i = 1,2,3 \quad \mathbf{n}\cdot\nabla\varphi_i = 0 \tag{III.196}$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{u} = 0 \quad \text{et} \quad \mathbf{t}\cdot(\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\tau}) = 0 \tag{III.197}$$

Le domaine de calcul utilisé pour le modèle de Fick correspond au domaine de calcul Ω où la bulle a été remplacée par la condition de Neumann homogène suivante pour la concentration (*cf.* Fig.III.16)

$$\mathbf{n}\cdot\nabla c = 0 \tag{III.198}$$

Les paramètres numériques utilisés dans cette section sont résumés dans le tableau (III.7). Les

CH/NS			discrétisation			
$M^\star$	M_c	ϵ (m)	Δ_t	t_{final} (s)	Δ_x	Δ_y
10^3	0	2×10^{-4}	5×10^{-4}	1	20	20

Tab. III.7: Paramètres numériques : test de Laplace compositionnel

isovaleurs du paramètre d'ordre φ_2 et de la concentration c présentées sur la figure (III.17) montrent

l'évolution du mélange compositionnel. Les courbes présentées sur la figure (III.18) montrent que l'évolution du paramètre d'ordre φ_2 calculé par le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel est en parfait accord avec l'évolution de la concentration calculée par le modèle de Fick.

D'un point de vue théorique, la vitesse est nulle à l'équilibre et la pression est uniforme dans chaque phase. Le saut de pression à travers l'interface est alors donné par la loi de Laplace

$$\Delta\tilde{\tilde{p}} = 2\frac{\sigma}{\mathcal{R}} \tag{III.199}$$

où $\mathcal{R}$ est le rayon de courbure. Sur la figure (III.19), on constate que le saut de pression calculé par le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel est en parfait accord avec le saut de pression théorique défini par (III.199). On remarque également sur la figure (III.20) que l'énergie cinétique définie par

$$k_e = \int_\Omega \frac{1}{2}\rho\mathbf{u}^2 \tag{III.200}$$

diminue au cours du temps lorsque le système tend vers sa position d'équilibre.

Les résultats présentés dans cette section montrent que les propriétés de consistance dans le cas purement compositionnel et dans le cas purement diphasique sont bien vérifiées par le schéma numérique proposé.

III.6.2 Montée d'une bulle dans un milieu semi-infini

L'objectif ici est, d'une part, de vérifier à nouveau les propriétés de consistance dans le cas diphasique et, d'autre part, de montrer l'impact du choix de la mobilité sur les résultats. Pour cela, on s'intéresse ici à un des problèmes diphasiques documenté dans [20] consistant en un problème de montée d'une bulle de gaz dans un milieu liquide semi-infini sous l'effet des forces de flottaison avec $\mathrm{Bo} = 10$ et $\mathrm{Mo} = 10^{-2}$. Les propriétés physiques des fluides considérés sont répertoriés dans le tableau (III.8). La géométrie du problème est axisymétrique et le domaine de calcul Ω (*cf.*

	ρ (kg.m^{-3})	η (Pa.s)	σ (N.m)	g (m.s^{-2})
φ_1	1	$\eta_2/100$	7×10^{-2}	9.81
φ_2	10^3	$\left(\mathrm{Mo}\varrho_2\sigma^3/g(\varrho_2-\varrho_1)\right)^{1/4}$		

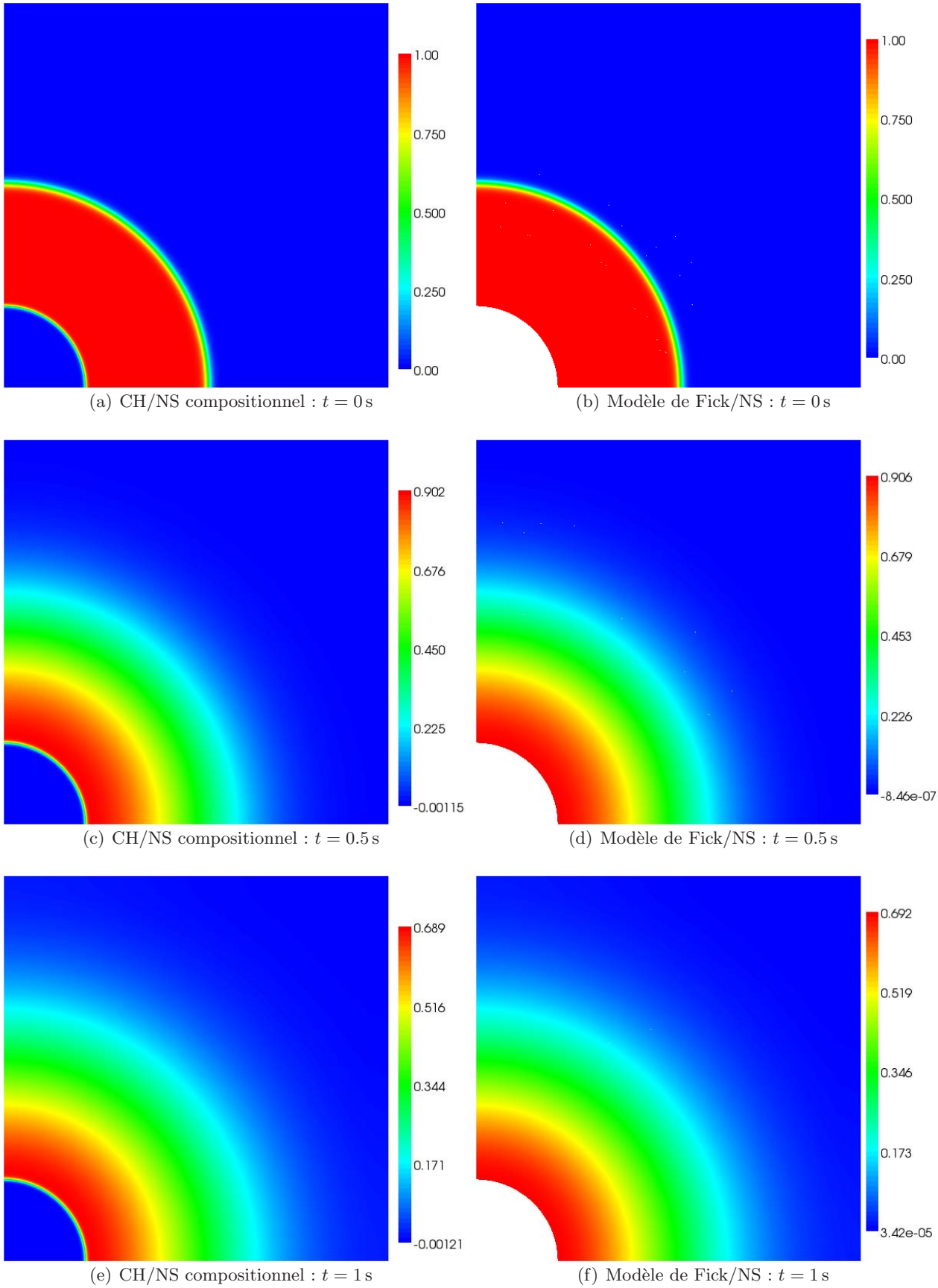
Tab. III.8: Propriétés physiques : montée de bulle dans un milieu semi-infini

Fig.III.21) consiste en un cylindre de rayon $R = R_1 + R_2$ où $R_1 = 6r_b$ et $R_2 = 3.4r_b$ et de hauteur $H = 24r_b$. Ici, $r_b = 0.5\sqrt{\sigma\mathrm{Bo}/g(\varrho_2-\varrho_1)}$ désigne le rayon initiale de bulle (*cf.* Fig.III.21). Des conditions aux limites de symétrie sont imposées sur l'ensemble des bords du domaine Ω et les conditions initiales sont données par

$$\varphi_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(-\frac{2}{\epsilon}\left(\sqrt{r^2+(z-3r_b)^2}-r_b\right)\right) \tag{III.201}$$

$$\varphi_2 = 1-\varphi_1 \tag{III.202}$$

où $\epsilon = r_b/12$ désigne l'épaisseur d'interface. Les paramètres numériques sont présentés dans le tableau (III.9) où les coefficients $M^\star$ et M sont respectivement associées à la mobilité dépendant du nombre de Péclet d'interface et à la mobilité diphasique "standard". La figure (III.22) montre l'évolution de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ (gauche) et l'évolution du nombre de Reynolds Re en fonction



(a) CH/NS compositionnel : $t = 0\,\mathrm{s}$

(b) Modèle de Fick/NS : $t = 0\,\mathrm{s}$

(c) CH/NS compositionnel : $t = 0.5\,\mathrm{s}$

(d) Modèle de Fick/NS : $t = 0.5\,\mathrm{s}$

(e) CH/NS compositionnel : $t = 1\,\mathrm{s}$

(f) Modèle de Fick/NS : $t = 1\,\mathrm{s}$

Fig. III.17: Comparaison entre le modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel avec un modèle de Fick/Navier-Stokes. Visualisation du paramètre d'ordre φ_2 (à gauche) et de la concentration c (à droite) aux instants $t = \{0\mathrm{s}, 0.5\mathrm{s}, 1\mathrm{s}\}$.

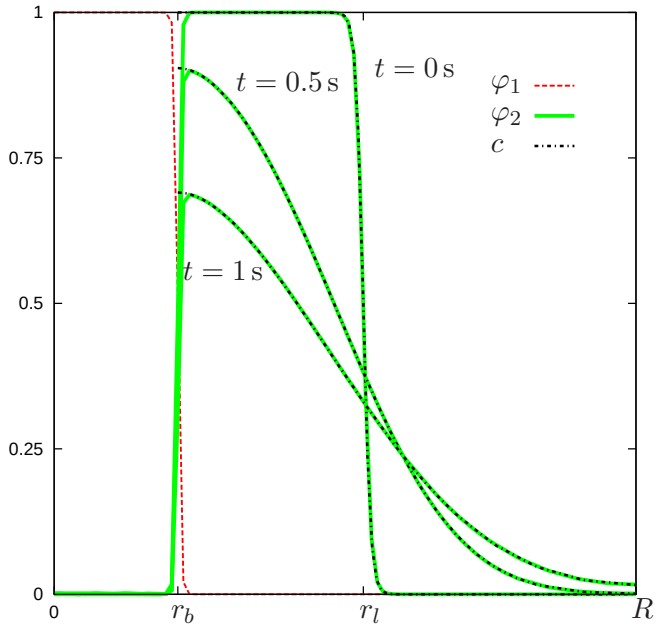


Fig. III.18: Comparaison des profils du paramètre d'ordre φ_2 et de la concentration c en $y = 0$ à $t = \{0\,\mathrm{s}, 0.5\,\mathrm{s}, 1\,\mathrm{s}\}$.

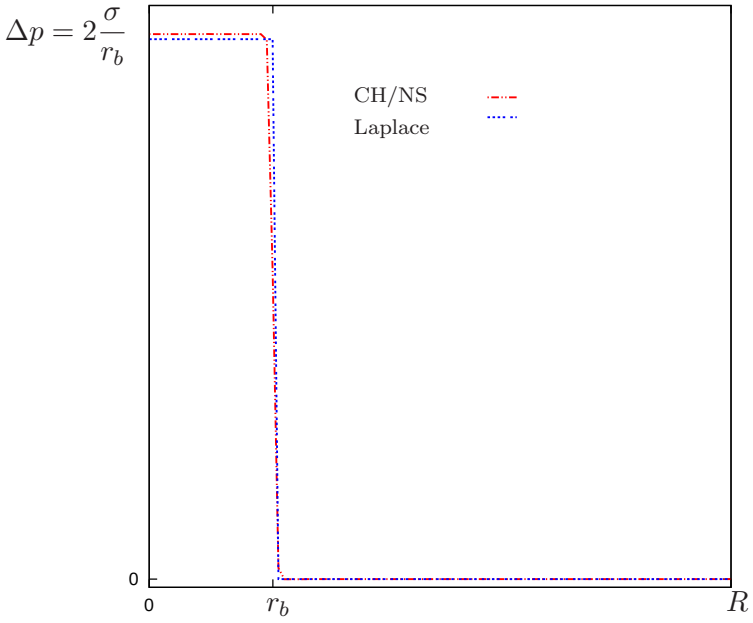


Fig. III.19: Comparaison entre le saut de pression théorique donné par la loi de Laplace $\Delta p = 2\sigma/r_b$ (Laplace) et celui calculé avec le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel (CH/NS).

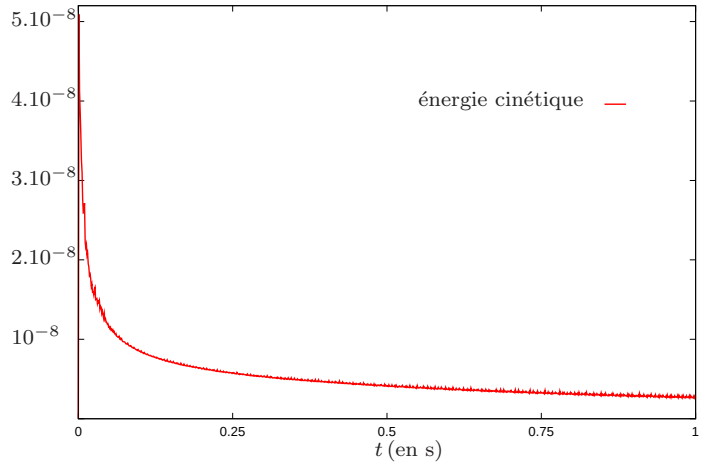


Fig. III.20: Décroissance de l'énergie cinétique au cours du temps.

CH/NS			discrétisation				
$M^\star$	M	M_c	Δ_t	t_{final} (s)	$\Delta_{x_{R_1}}$	$\Delta_{x_{R_2}}$	Δ_y
10^2	10^{-7}	0	4×10^{-6}	0.8	10	5	60

Tab. III.9: Paramètres numériques : montée de bulle dans un milieu semi-infini

du temps adimensionné $\tau = t\sqrt{g/2r_b}$ (droite). Comme dans [20], le nombre de Reynolds Re est défini par

$$\mathrm{Re} \quad = \quad \frac{2\varrho_2 V(t) r_b}{\eta_2} \tag{III.203}$$

où $V(t)$ désigne la vitesse barycentrique de la bulle dans la direction normale. Elle est donnée par

$$V(t) \quad = \quad \frac{\displaystyle\int_\Omega \varphi_1 \mathbf{n}\cdot\mathbf{u}\; d\Omega}{\displaystyle\int_\Omega \varphi_1 \; d\Omega} \tag{III.204}$$

On constate sur la figure (III.22) que les résultats obtenus avec le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel sont en très bon accord avec ceux proposés dans [20].

On s'intéresse désormais au coefficient M de la mobilité dont le choix constitue une des difficultés des modèles de Cahn-Hilliard. L'intérêt de la définition de M en fonction du nombre de Péclet d'interface (au sens $\mathrm{Pe}_\epsilon = U^\star\epsilon^2/M\sigma$) vis-à-vis d'une définition "classique" d'un coefficient M uniforme est qu'elle permet de distinguer les régions interfaciales où la convection est dominante (*cf.* Fig.III.24). Par exemple, pour le problème diphasique considéré, on peut voir que l'utilisation d'un coefficient M constant (*cf.* Tab.III.9) entraîne une ascension légèrement plus lente de la bulle (*cf.* Fig.III.23).

III.6.3 Injection de bulles dans un milieu semi-infini

L'application numérique présentée ici a pour objectif de montrer les potentialités d'application du modèle de Cahn-Hilliard-Navier-Stokes sur un problème diphasique complexe. On s'intéresse ici à un problème diphasique d'injection de gaz dans un milieu liquide semi-infini à travers un orifice

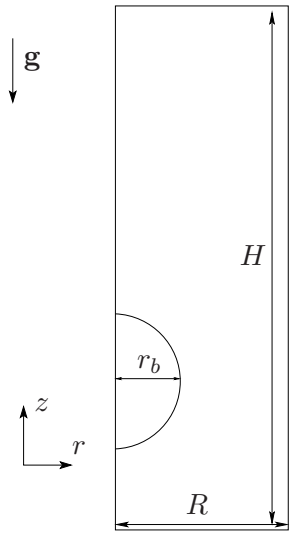


Fig. III.21: Domaine de calcul pour le problème de montée d'une bulle de gaz dans un milieu liquide semi-infini sous l'effet des forces de flottaison.

documenté dans [68]. Les propriétés physiques des fluides sont supposées constantes et égales aux valeurs de références d'un système diphasique air-eau à 20°C (*cf.* Tab.III.10). La géométrie du

ρ_{air} (kg.m^{-3})	ρ_{eau} (kg.m^{-3})	μ_{air} (Pa.s)	μ_{eau} (Pa.s)	$\sigma_{air/eau}$ (N.m^{-1})
1.188	998.12	1.824×10^{-5}	1.002×10^{-3}	72.8×10^{-3}

Tab. III.10: Propriétés physique du système air-eau à 20°C.

problème est $3D$ axisymétrique (*cf.* Fig.III.25) avec un axe de symétrie placé au centre de l'orifice de rayon $r_i = 10^{-3}$m. Le domaine de calcul est défini par $\Omega = [0, r_i] \times [0, -2r_i] \cup [0, 2.5D_e] \times [0, 10D_e]$ où le diamètre équivalent de bulle D_e est donné par

$$D_e = \left[\frac{12 r_i \sigma}{g(\rho_2 - \rho_1)} \right]^{\frac{1}{3}} \tag{III.205}$$

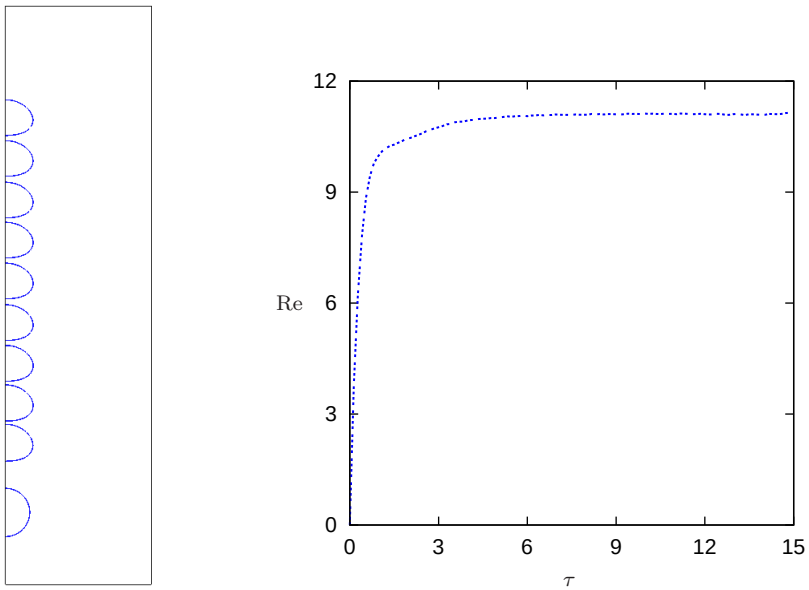
Concernant les conditions aux limites, des conditions de symétries sont imposées sur Γ_2 et Γ_4. Sur Γ_3, on applique des conditions de Neumann homogène pour les paramètres d'ordres et le potentiel chimique généralisé. En entrée, sur Γ_1, un profil parabolique de vitesse est imposé sous la forme

$$\mathbf{u} = \left(0, 2 \frac{\dot{Q}}{\pi {r_i}^2} \left[1 - \left(\frac{r}{r_i} \right)^2 \right] \right) \tag{III.206}$$

où $\dot{Q} = 100\,\text{ml.min}^{-1}$ correspond au débit de gaz injecté à travers l'orifice. Des conditions de mouillabilité (*cf.* (III.118)) pour le paramètre d'ordre φ_1 sont imposées sur Γ_5. On s'intéresse ici aux angles de contact $\alpha = 70^\circ$ et $\alpha = 110^\circ$. Enfin, pour la vitesse, une condition d'adhérence est appliquée sur Γ_5 et Γ_6.

$$\varphi_1 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh \left(-2 \left(\frac{z + r_i}{\epsilon} \right) \right) \tag{III.207}$$

$$\varphi_2 = 1 - \varphi_1 \tag{III.208}$$



(a) (b)

Fig. III.22: Quelques instantanés de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ (droite) et évolution du nombre de Reynolds en fonction du temps adimensionné $\tau = t\sqrt{g/2r_b}$.

CH/NS			discrétisation				stabilisation	
$M^\star$	M_c	ϵ (m)	Δ_t	t_{final} (s)	Δ_x	Δ_y	c_1^η	c_2^η
10^3	10^{-8}	$0.05D_e$	10^{-5}	1	20	80	1	10

Tab. III.11: Paramètres numériques : injection de bulles dans un milieu semi-infini

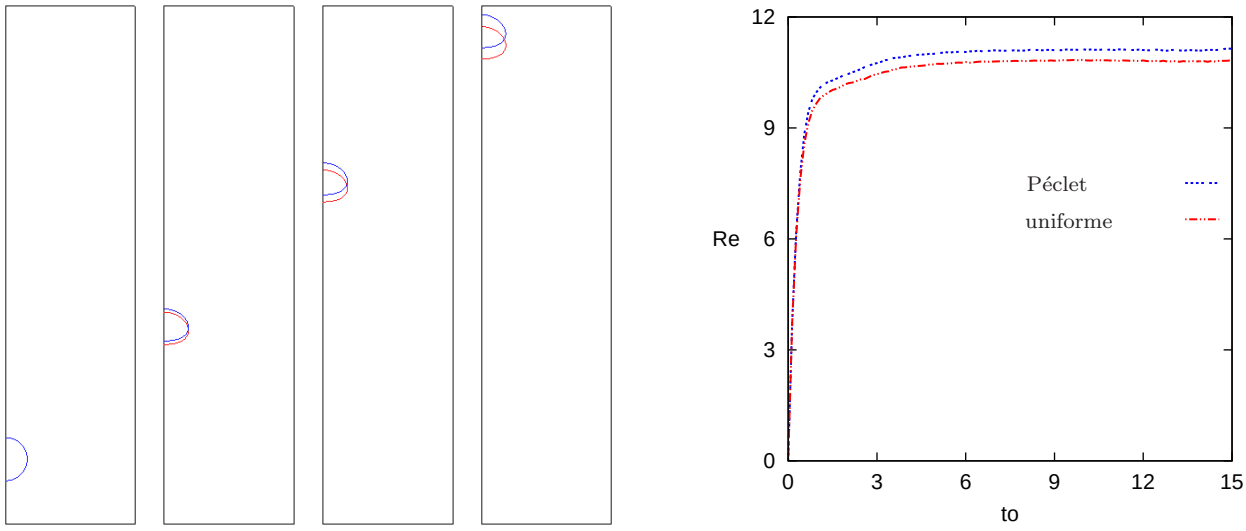
Modèle	V_{gaz} (mm^3) : $\alpha = 70^\circ$	V_{gaz} (mm^3) : $\alpha = 110^\circ$
CH/NS	104	189
Gerlach *& al.* [68]	90	210

Tab. III.12: Volume de gaz après le détachement de la bulle.

Les propriétés numériques utilisées dans cette section sont données dans le tableau (III.11). La figure (III.26) montre l'évolution des interfaces pour $\alpha = 70^\circ$ (haut) et $\alpha = 110^\circ$ (bas). Les résultats présentés sur la figure (III.26) sont en bon accord avec ceux proposés dans [68]. Comme dans [68], on calcule le volume de gaz après le détachement de la bulle. On constate dans le tableau (III.12) que les valeurs obtenues avec le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel diffèrent légèrement que celles présentés dans [68]. La valeur de l'épaisseur d'interface ou encore la valeur de la mobilité sont des paramètres pouvant expliquer cette légère différence. Les résultats obtenus restent néanmoins très satisfaisants et montrent les potentialités d'application du modèle sur des problèmes plus complexes.

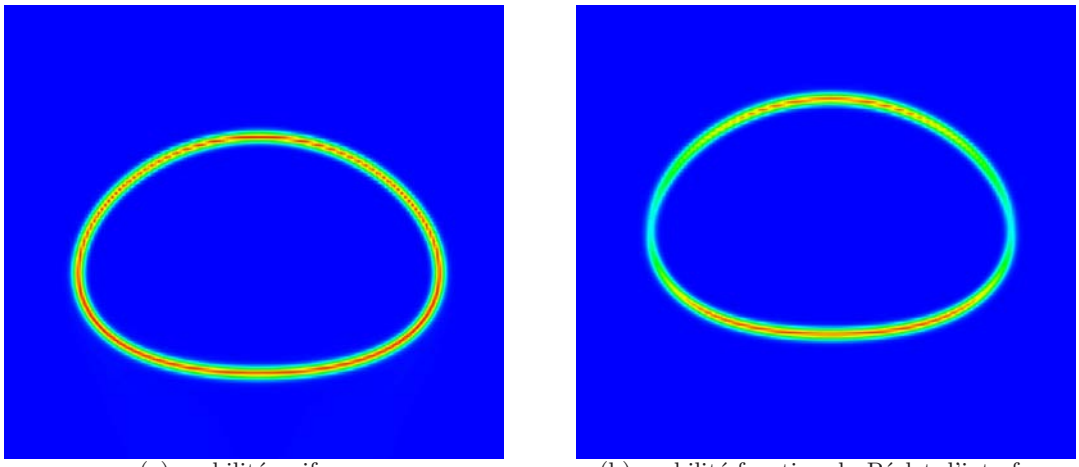
III.6.4 Injection de bulles dans un système bi-constituant

On s'intéresse à un problème diphasique compositionnel d'injection de gaz dans un système bi-constituant où l'une des deux espèces miscibles est également injectée. On présente tout d'abord un



(a) t_1 (b) t_2 (c) t_3 (d) t_4 (e)

Fig. III.23: Comparaison des calculs réalisés avec une mobilité uniforme (rouge) et une mobilité dépendant du Péclet d'interface (bleu) : isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ à différents instants successifs et évolution du nombre de Reynolds en fonction du temps adimensionné $\tau = t\sqrt{g/2r_b}$.



(a) mobilité uniforme (b) mobilité fonction du Péclet d'interface

Fig. III.24: Visualisation de la mobilité : uniforme (gauche) et fonction du nombre de Péclet d'interface (droite).

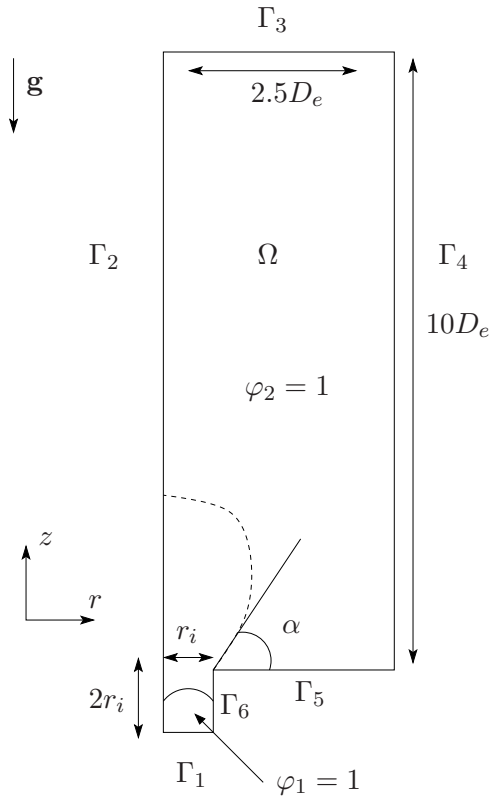
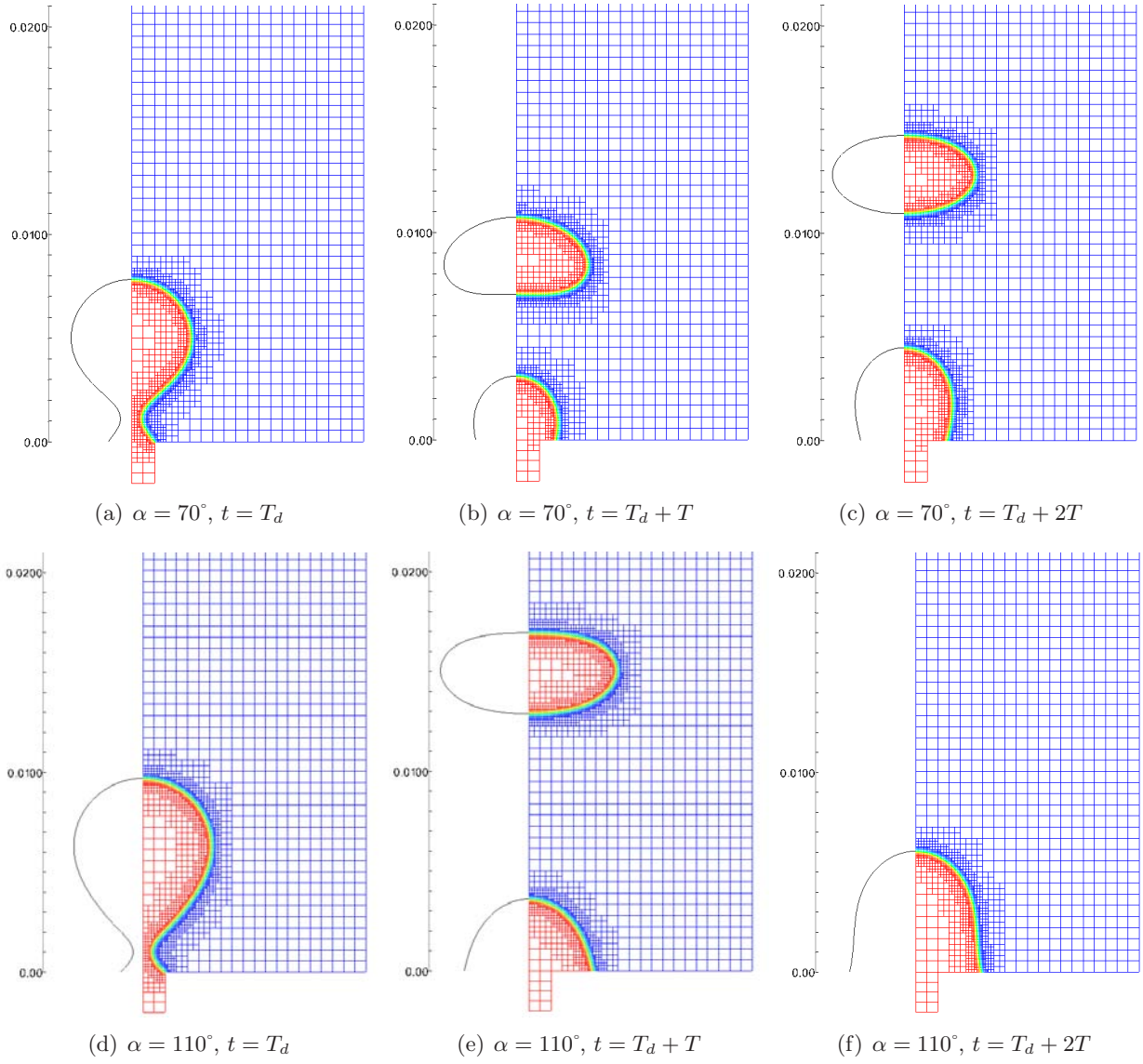


Fig. III.25: Domaine de calcul utilisé pour le problème diphasique d'injection de gaz à travers un orifice.

calcul dit de référence à partir duquel nous allons faire varier certains paramètres tels que le rapport de densité et de viscosité entre les deux espèces miscibles, la diffusion massique et le nombre de site d'injection de gaz. L'objectif dans cette partie est de montrer quantitativement les potentialités d'application du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel en vue des expériences numériques qui seront effectuées par la suite dans le contexte de l'interaction corium-béton.

III.6.4.a Applications numériques réalisées avec un site d'injection de gaz

La géométrie du problème de référence consiste en un domaine rectangulaire $2D$-cartésien $\Omega = [0, R/2]\times[0, 2R]$ avec $R = 24$mm dont les parois latérales sont supposées périodiques (*cf.* Fig.III.27). Concernant les conditions aux limites sur Γ_1, on impose, d'une part, une condition de Dirichlet pour la vitesse et les paramètres d'ordre et, d'autre part, une condition de Neumann homogène pour le potentiel chimique généralisé. La paroi Γ_4 modélise un bord libre sur lequel on applique des conditions aux limites de Neumann homogènes pour φ_i avec $i = 2, 3$ et les conditions aux limites de sorties définies dans la section (III.5).



(a) $\alpha = 70^{\circ}$, $t = T_d$ (b) $\alpha = 70^{\circ}$, $t = T_d + T$ (c) $\alpha = 70^{\circ}$, $t = T_d + 2T$

(d) $\alpha = 110^{\circ}$, $t = T_d$ (e) $\alpha = 110^{\circ}$, $t = T_d + T$ (f) $\alpha = 110^{\circ}$, $t = T_d + 2T$

Fig. III.26: Injection de gaz dans un liquide à travers un orifice de rayon. Evolution de l'isovaleur $\varphi_1 = 0.5$ en $t = \{T_d, T_d + T, T_d + 2T\}$ avec T_d le temps de détachement de bulle, $T = 0.018\,\mathrm{s}$ pour un angle de contact $\alpha = 70^{\circ}$ (en haut) et $T = 0.042\,\mathrm{s}$ pour un angle de contact $\alpha = 110^{\circ}$ (en bas).

Les conditions initiales pour les paramètres d'ordres s'écrivent

$$\varphi_1 = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(-\frac{2}{\epsilon}\sqrt{\left(r - \frac{R}{4}\right)^2 + z^2} - \frac{13}{14}r_b\right) & \forall\, r \in]\frac{R}{8}, \frac{3R}{8}[\\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(-\frac{2}{\epsilon}\sqrt{\left(r - \frac{3R}{4}\right)^2 + z^2} - \frac{13}{14}r_b\right) & \forall\, r \in]\frac{5R}{8}, \frac{7R}{8}[\\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{III.209}$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\tanh\left(-\frac{2}{\epsilon}(z - 2r_b)\right) \tag{III.210}$$

$$\varphi_3 = 1 - \varphi_1 - \varphi_2 \tag{III.211}$$

où $\epsilon = r_b/7$ et $r_b = 2 \times 10^{-3}$m désignent respectivement l'épaisseur d'interface et le rayon de la

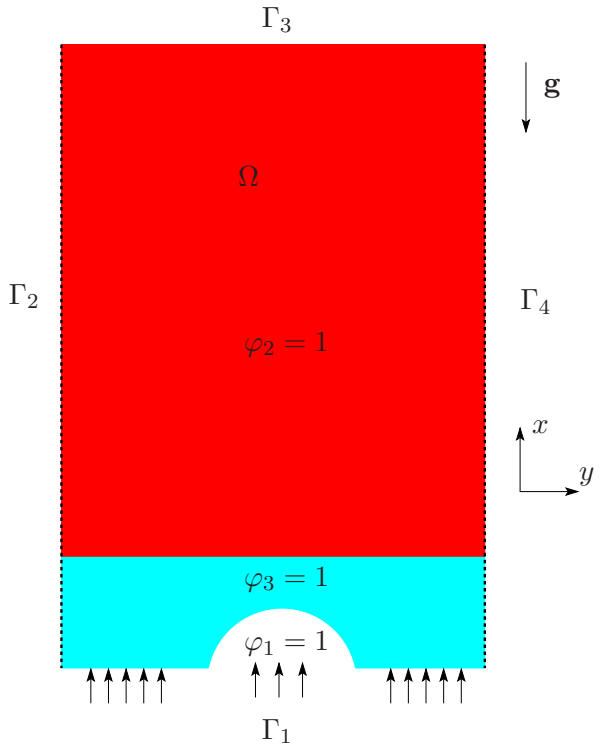


Fig. III.27: Domaine de calcul utilisé pour le problème diphasique compositionnel d'injection de gaz dans un système bi-constituant.

bulle de gaz à l'instant initial. La condition initiale pour la vitesse est donnée par

$$\mathbf{u} = u_z \mathbf{e}_z \text{ avec } u_z = \begin{cases} 2 \times 10^{-4} & \forall r \in]0, \frac{R}{8}] \cup [\frac{3R}{8}, \frac{5R}{8}[\cup[\frac{7R}{8}, R[\\ 0.12\left(-\frac{r^2}{{r_b}^2} + 6\frac{r}{r_b} - 8\right) & \forall r \in [\frac{R}{4} - r_b, \frac{R}{4} + r_b[\\ 0.12\left(-\frac{r^2}{{r_b}^2} + 18\frac{r}{r_b} - 80\right) & \forall r \in [\frac{3R}{4} - r_b, \frac{3R}{4} + r_b[\\ 0 & \forall r \in [\frac{R}{8}, \frac{R}{4} - r_b[\cup[\frac{R}{4} + r_b, \frac{3R}{8}[\cup[\frac{5}{8}, \frac{3R}{4} - r_b[\cup]\frac{3R}{4} + r_b, \frac{7R}{8}] \end{cases} \quad \text{(III.212)}$$

Les propriétés physiques utilisées pour le calcul de référence et les paramètres numériques sont respectivement répertoriés dans les tableaux (III.13) et (III.14).

	ρ (kg.m^{-3})	η (Pa.s)	σ (N.m)	D (m^2.s^{-1})	g (m.s^{-2})
φ_1	1	10^{-4}	7×10^{-2}	3×10^{-5}	9.81
φ_2	3×10^2	10^{-3}			
φ_3	10^3	35×10^{-3}			

Tab. III.13: Propriétés physiques du calcul de référence diphasique compositionnel

La figure (III.28) présente l'évolution de la densité du mélange pour $t \in [0, 1.04]$. Les résultats montrent que la première bulle (*cf.* (e)) entraîne dans son sillage une quantité de fluide léger (*i.e.* espèce 3) qui se mélange avec le fluide lourd (*i.e.* espèce 2). Le couplage des courants de convection dans le sillage de la bulle avec l'injection de gaz conduit à la formation rapide d'une seconde bulle de taille plus petite (*cf.* (f)-(g)) qui va venir coalescer avec la première bulle (*cf.* (h)-(i)). On remarque également que la dynamique de l'écoulement devient rapidement non symétrique. Signalons que

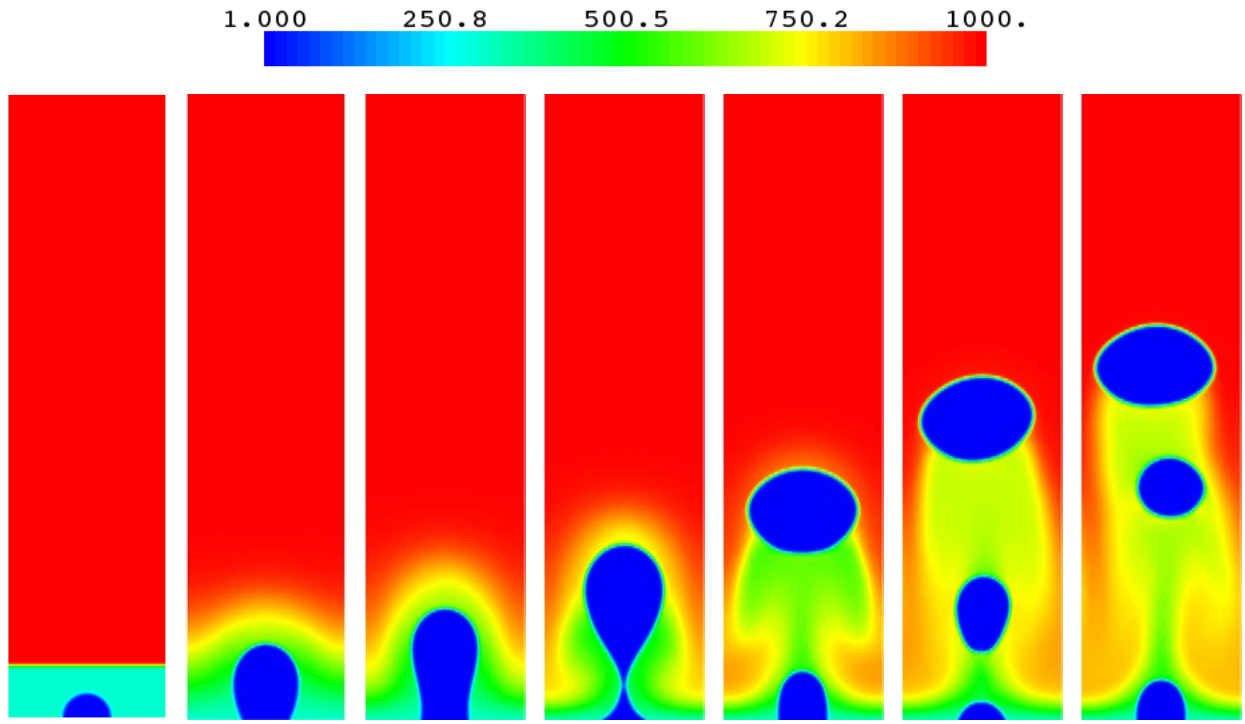
CH/NS			discrétisation				stabilisation			
$M^\star$	M_c	ϵ (m)	Δ_t	t_{final} (s)	Δ_x	Δ_y	c_1^η	c_2^η	c_1^D	c_2^D
5×10^2	5×10^{-8}	$r_b/7$	2×10^{-4}	2	16	64	1	20	1	20

Tab. III.14: Paramètres numériques utilisés pour les calculs diphasiques compositionnels

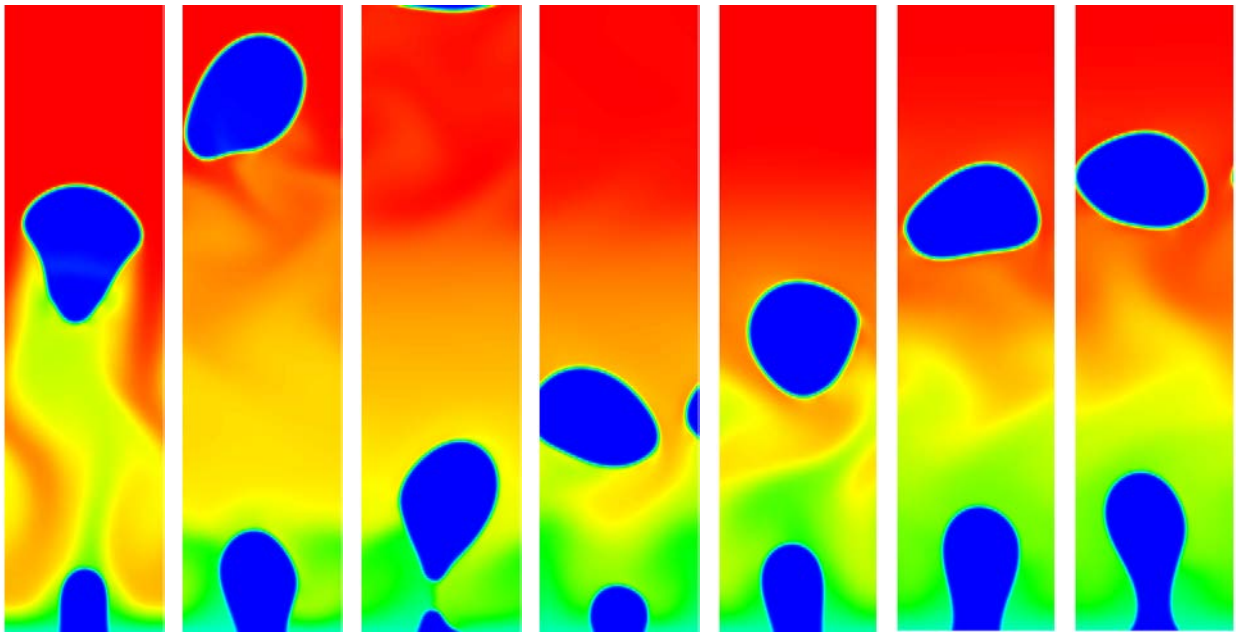
cette perte de symétrie peut être engendrée par une erreur numérique engendrée, par exemple, lors du détachement d'une bulle. Les interfaces commencent à osciller ce qui augmente significativement le mélange entre les deux espèces miscibles (*cf.* (i)-(n)). Lorsque le contraste de viscosité est nul avec une viscosité liquide de 10^{-3}Pa.s, la dynamique de l'écoulement (*cf.* Fig.III.29) est similaire à celle obtenue pour le calcul de référence avec néanmoins un mélange plus vigoureux entre les deux liquides (*cf.* (i)-(n)). Ceci peut s'expliquer par la faible valeur de la viscosité liquide et donc par des mouvements convectifs plus intenses. On s'intéresse désormais au calcul présenté sur la figure (III.30) où, cette fois, le contraste de densité entre les deux liquides est nul. Dans ce cas, on choisit le paramètre d'ordre φ_3 pour visualiser les trois phases en même temps. On s'aperçoit ici (*cf.* Fig.III.30) que la quantité de fluide entraîné (*cf.* (f)) est plus faible que dans les deux précédents calculs où le contraste de densité contribuait au transport et au mélange du liquide 3 dans le liquide 2 au travers d'un mécanisme de type instabilité Rayleigh-Taylor. On remarque également que la forme des deux premières bulles est similaire (*cf.* (h)) et que les oscillations apparaissent plus tard (*cf.* (f)-(i)) avec un phénomène de convection compositionnelle moins vigoureux que précédemment (*cf.* (j)-(n)). Par ailleurs, pour ce calcul, il semblerait que la vitesse d'advection utilisée pour la condition à la limite de sortie ne soit pas adaptée ou alors que la hauteur du domaine de calcul ne soit pas assez grande. On remarque en effet un étalement des interfaces en sortie du domaine (*cf.* (i)) causé par un ralentissement de la première bulle. Comme la seconde bulle vient coalescer, il se forme temporairement un film de gaz (*cf.* (j)-(l)). On s'intéresse maintenant au calcul où le coefficient de diffusion massique $D = 2 \times 10^{-5}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$. Par rapport au calcul de référence ou à contraste de viscosité nulle, l'injection de gaz entraîne la formation d'une instabilité de Rayleigh-Taylor contribuant au détachement rapide de la première bulle de gaz autour de laquelle est entraînée une certaine quantité de fluide léger (*cf.* (c)). Le couplage des courants de convections dans le sillage de la bulle avec l'injection de gaz conduit à la formation rapide d'une seconde (*cf.* (f)) puis d'une troisième bulle (*cf.* (g)) de petite taille. Enfin, l'écoulement est rapidement perturbé et les interfaces sont ballotées latéralement suivant les courants de convection (*cf.* (f)-(n)).

III.6.4.b Un exemple d'extension au cas de deux sites d'injection de gaz

On présente ici l'extension du calcul de référence au cas deux de sites d'injection de gaz. Les propriétés physiques des fluides et les paramètres numériques restent identiques et le domaine de calcul correspond au double du domaine précédent. Comme nous pouvons le constater sur la figure (III.32), la dynamique de l'écoulement obtenue avec deux sites d'injection de gaz montre un effet de groupe entre les bulles avec de fortes similarité à celle obtenue avec un site d'injection pour $t \lesssim 60$s. On remarque ensuite que les bulles ont une trajectoire totalement différente ce qui conduit à leur coalescence et donc à la formation d'une bulle de taille importante (*cf.* (k)). Ces différences peuvent, par exemple, s'expliquer par une perturbation numérique ayant été causée par un raffinement de maillage adaptatif non uniforme lui même entraîné par un critère de raffinement non adapté. Il serait intéressant d'effectuer dans un autre contexte une étude plus approfondie pour identifier les facteurs numériques potentiellement responsables de la perte de ces effets de groupe. Cette étude pourrait être menée dans un premier temps dans le cas purement diphasique puis dans le cas diphasique compositionnel.

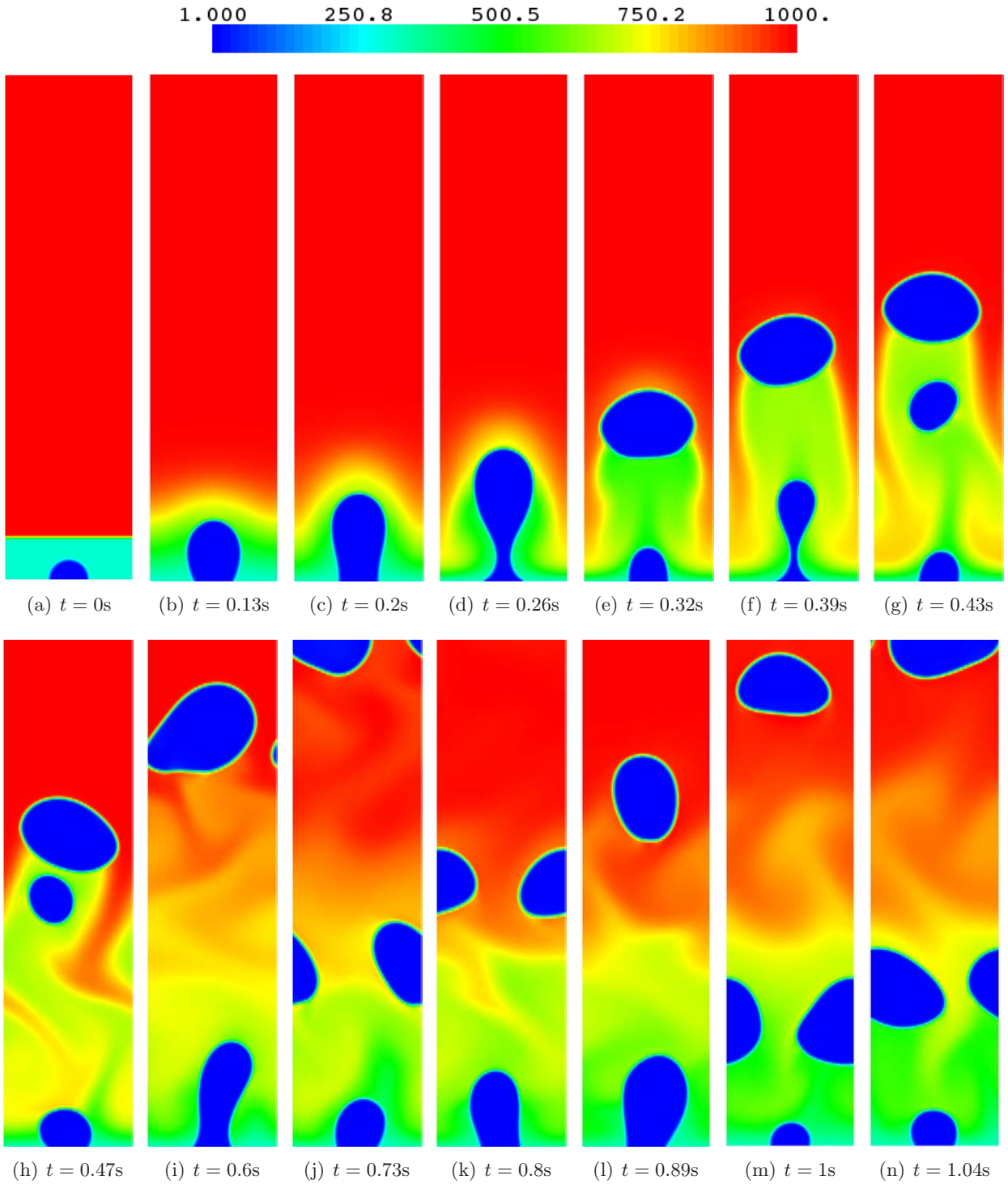


(a) $t = 0$s (b) $t = 0.13$s (c) $t = 0.2$s (d) $t = 0.26$s (e) $t = 0.32$s (f) $t = 0.39$s (g) $t = 0.43$s



(h) $t = 0.47$s (i) $t = 0.6$s (j) $t = 0.73$s (k) $t = 0.8$s (l) $t = 0.89$s (m) $t = 1$s (n) $t = 1.04$s

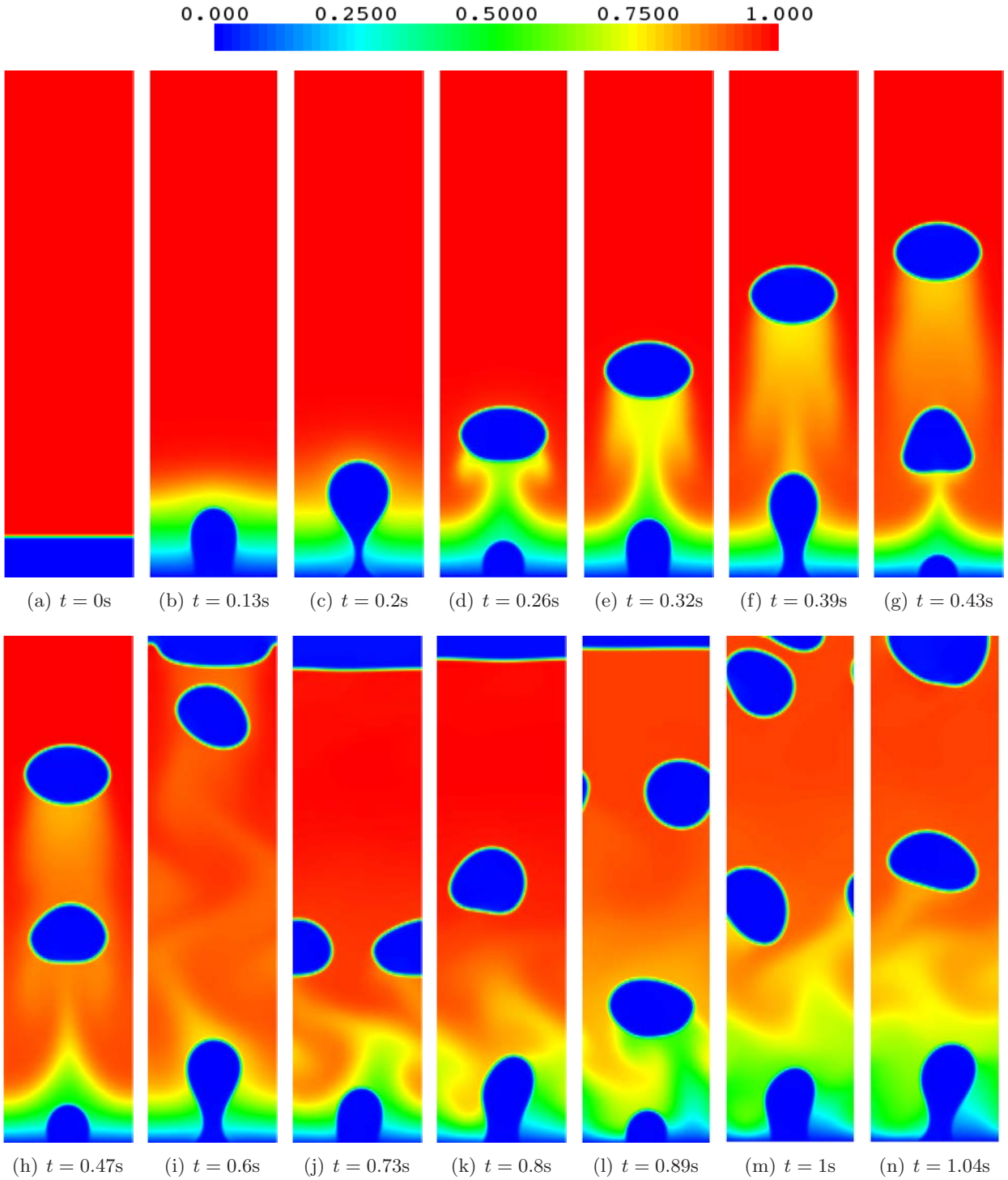
Fig. III.28: Calcul de référence : évolution de la densité pour certains instants $t \in [0\text{s}, 1.04\text{s}]$.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.13$s (c) $t = 0.2$s (d) $t = 0.26$s (e) $t = 0.32$s (f) $t = 0.39$s (g) $t = 0.43$s

(h) $t = 0.47$s (i) $t = 0.6$s (j) $t = 0.73$s (k) $t = 0.8$s (l) $t = 0.89$s (m) $t = 1$s (n) $t = 1.04$s

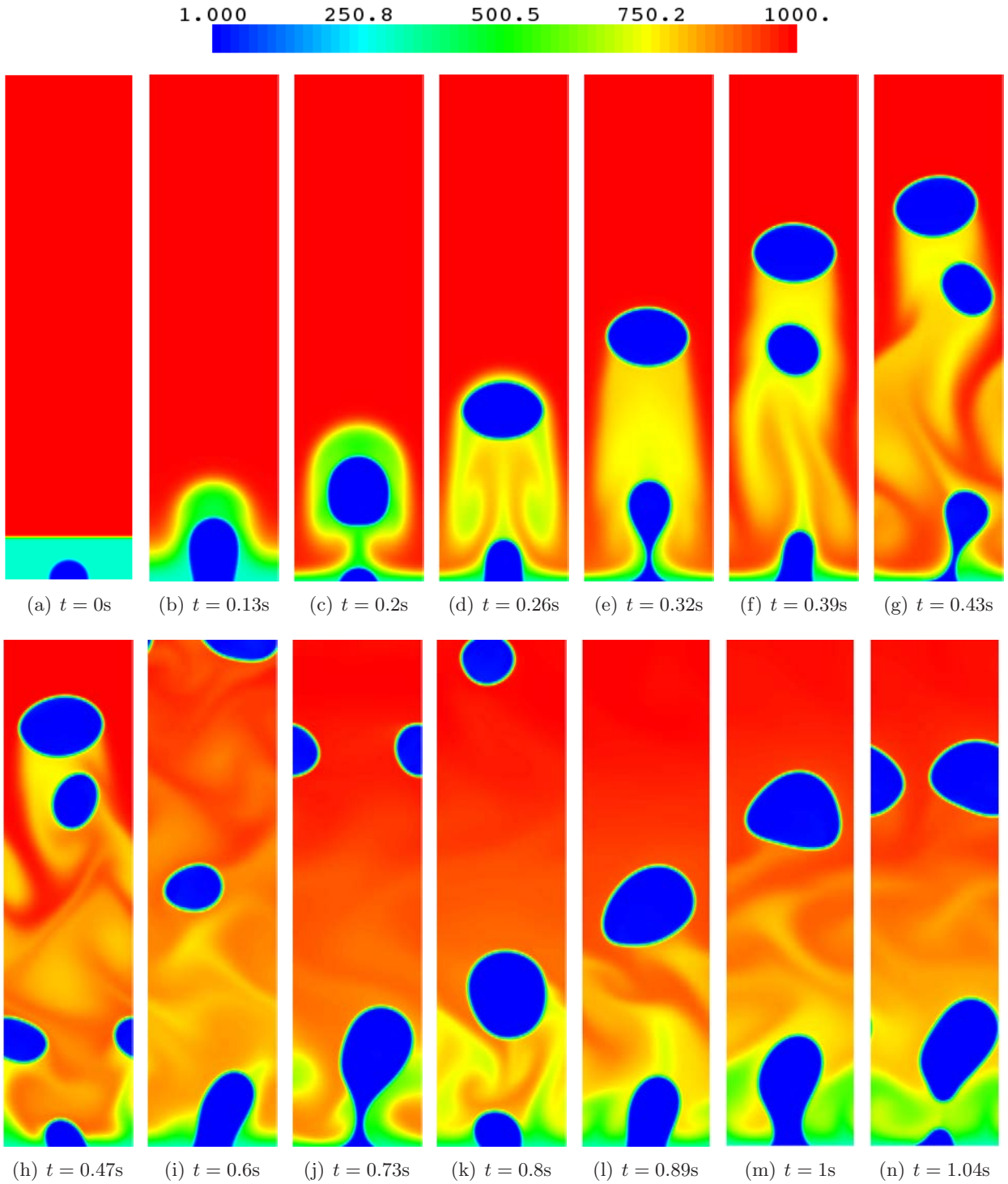
Fig. III.29: Calcul sans contraste de viscosité dans le liquide : évolution de la densité pour certains instants $t \in [0\text{s}, 1.04\text{s}]$.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.13$s (c) $t = 0.2$s (d) $t = 0.26$s (e) $t = 0.32$s (f) $t = 0.39$s (g) $t = 0.43$s

(h) $t = 0.47$s (i) $t = 0.6$s (j) $t = 0.73$s (k) $t = 0.8$s (l) $t = 0.89$s (m) $t = 1$s (n) $t = 1.04$s

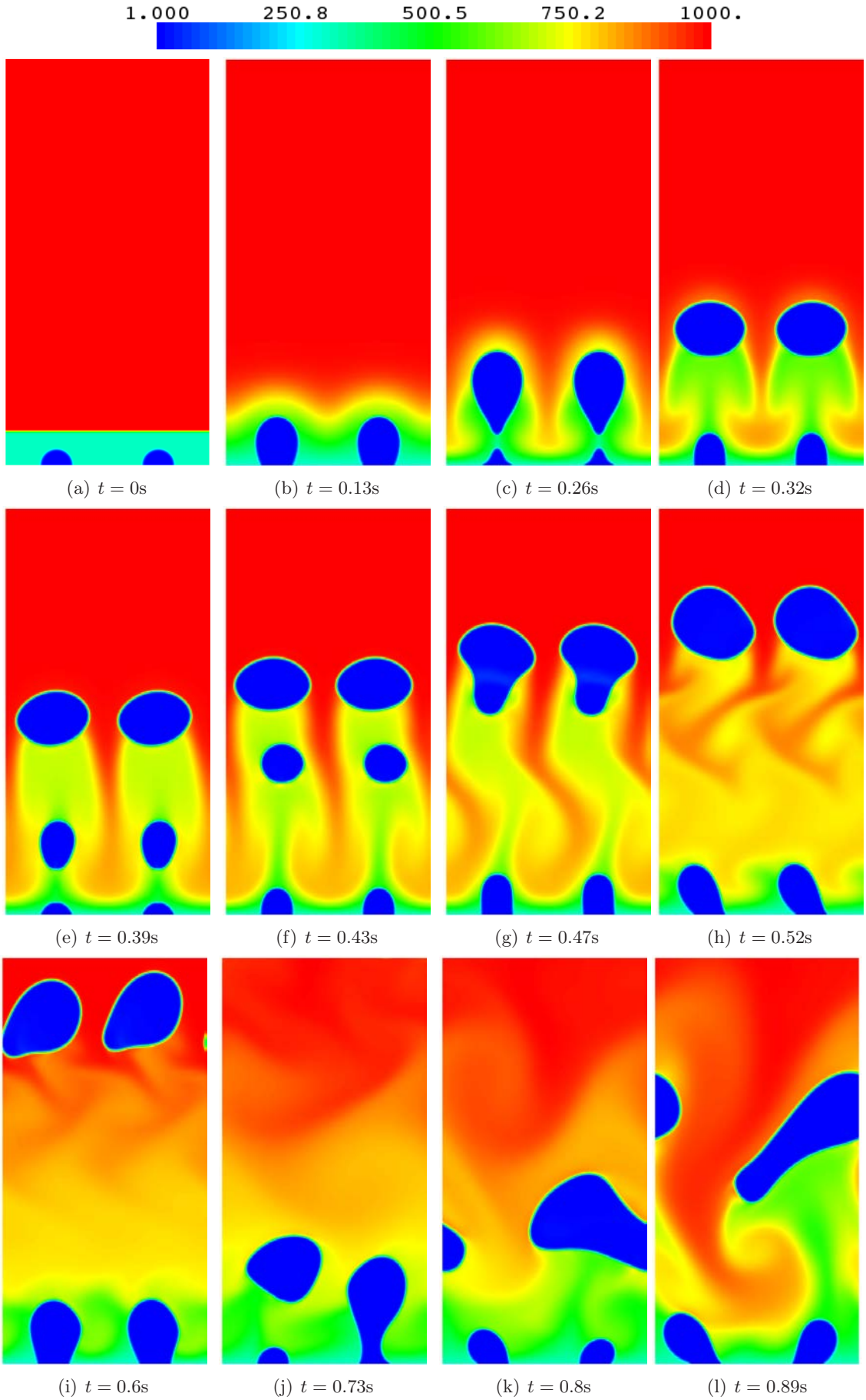
Fig. III.30: Calcul sans contraste de densité dans le liquide : évolution du paramètre d'ordre φ_3 pour certains instants $t \in [0\text{s}, 1.04\text{s}]$.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.13$s (c) $t = 0.2$s (d) $t = 0.26$s (e) $t = 0.32$s (f) $t = 0.39$s (g) $t = 0.43$s

(h) $t = 0.47$s (i) $t = 0.6$s (j) $t = 0.73$s (k) $t = 0.8$s (l) $t = 0.89$s (m) $t = 1$s (n) $t = 1.04$s

Fig. III.31: Calcul effectué avec un diffusion massique $D = 2 \times 10^{-5}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$: évolution de la densité pour certains instants $t \in [0\text{s}, 1.04\text{s}]$.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.13$s (c) $t = 0.26$s (d) $t = 0.32$s

(e) $t = 0.39$s (f) $t = 0.43$s (g) $t = 0.47$s (h) $t = 0.52$s

(i) $t = 0.6$s (j) $t = 0.73$s (k) $t = 0.8$s (l) $t = 0.89$s

Fig. III.32: Calcul effectué avec les propriétés de référence et deux sites d'injection de gaz : évolution de la densité pour certains instants $t \in [0\text{s}, 0.89\text{s}]$.

III.7 Conclusions

Nous avons présenté dans ce chapitre un outil de simulation numérique directe qui s'inscrit dans le cadre des modèles de type Cahn-Hilliard et, plus généralement, dans le cadre des méthodes à interfaces diffuses.

Dans un premier temps, nous avons effectué une brève description d'un modèle de Cahn-Hilliard pour un mélange de deux fluides non miscibles afin d'introduire notre démarche. Nous avons ensuite proposé un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel pour un mélange de deux fluides non miscibles où l'un des deux est constitué de deux espèces totalement miscibles. Ce modèle a été dérivé rigoureusement dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles et vérifie des propriétés de consistance importantes : il dégénère sous la forme d'un modèle compositionnel couplé aux équations de Navier-Stokes lorsque la phase non miscible est absente et se réduit à un modèle de Cahn-Hilliard diphasique si l'une des espèces miscible disparaît. En vue de nos applications dans le contexte de l'interaction corium-béton, nous avons supposé lors du développement de ce modèle que les tensions de surface entre les deux constituants miscibles et la phase non miscible étaient identiques. Le formalisme employé dans ce chapitre permet néanmoins de prendre en compte deux tensions de surface et nous avons dans ce sens présenté une énergie de Cahn-Hilliard pour un mélange diphasique compositionnel à deux tensions de surface.

Nous avons ensuite proposé une forme alternative de ce modèle où les équations de Cahn-Hilliard sont reformulées avec une vitesse à divergence nulle. Cela permet notamment d'assurer que la somme des paramètres d'ordre vaille un lors de la résolution du problème discret. Les équations de Navier-Stokes ont également été réécrites sous une forme dite potentielle faisant intervenir le gradient du potentiel chimique généralisé.

Dans le cadre de la méthode des développements asymptotiques raccordés, nous avons montré formellement au travers d'une analyse asymptotique réalisée dans le cadre de la méthode des développements asymptotiques raccordés que le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel converge bien vers un modèle compositionnel couplé aux équations de Navier-Stokes et à une équation pour la température lorsque les interfaces sont décrites comme des surfaces de discontinuité douées de propriétés en excès.

Pour le modèle proposé, nous avons présenté un schéma de discrétisation en temps et en espace s'inscrivant dans un contexte éléments finis dans le cadre de l'approximation de Galerkin. Le schéma en temps est un schéma semi-implicite basé sur une méthode à pas fractionnaire en trois étapes qui consiste à résoudre séquentiellement les équations de Cahn-Hilliard par une méthode de type Newton-Raphson puis l'équation pour la température et, enfin, le bilan de quantité de mouvement par une méthode de projection incrémentale où la contrainte de conservation de la masse a été remplacée par une contrainte de divergence pour des raisons numériques. En ce qui concerne les équations de Cahn-Hilliard, nous avons montré que la résolution d'un système à seulement deux équations pouvait conduire dans certains cas diphasiques à l'apparition de la phase absente lorsque celle-ci correspondait à l'équation non résolue. Nous avons alors montré numériquement que la résolution de l'ensemble des équations de Cahn-Hilliard permettait de réduire sensiblement ces instabilités.

Nous avons également présenté une méthode de stabilisation par viscosité entropique que nous avons appliqué à la contribution compositionnelle des équations de Cahn-Hilliard, aux équations de Navier-Stokes et à l'équation pour la température.

Dans l'optique d'améliorer le comportement des interfaces en sortie du domaine de calcul, nous avons proposé un traitement particulier des conditions aux limites de sortie. Pour les équations de Cahn-Hilliard, il s'agit de remplacer la condition à la limite de sortie *ad-hoc* de type Neumann homogène par une condition à la limite qui permette de translater les interfaces à travers la paroi artificielle. Pour les équations de Navier-Stokes, nous avons proposé un algorithme de séparation de pression basé sur un schéma à pas fractionnaire en deux étapes : la première étape permet de

prendre en compte le saut de pression induit par les forces capillaires dans une pression capillaire obtenue en résolvant un problème de type Darcy. La seconde étape consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes avec une pression dynamique définie comme la différence de la pression et de la pression capillaire.

Enfin, nous avons réalisé des simulations numériques qui nous ont permis, d'une part, de vérifier les propriétés de consistance du modèle dans les cas purement diphasique et purement compositionnel et, d'autre part, de montrer les potentialités d'applications de cet outil sur des problèmes diphasiques compositionnels.

Chapitre IV

Simulations directes à l'échelle du front d'ablation

Nous abordons dans ce chapitre une étude de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation par simulation numérique directe. Nous avons indiqué que l'intérêt d'une telle approche était en grande partie motivée par les difficultés expérimentales associées aux matériaux mis en jeu (*e.g.* forts contrastes de densité, de viscosité) et à l'instrumentation (*e.g.* hautes températures, matériaux opaques, échelles de couche limite). Devant la complexité du problème multiphasique multiconstituant, une approche par simulation numérique directe pose également de nombreuses difficultés et nous nous sommes intéressés dans ce travail à des écoulements diphasiques sans changement de phase dont l'une des deux phases est constituée de deux espèces miscibles associées respectivement au mélange de corium et des produits de décomposition du béton. Si les phénomènes de fusion/solidification au sein du mélange ne sont pas explicitement pris en compte, on se propose ici de prendre en compte la présence de zones *pâteuses* selon une technique de viscosité effective dans le cadre rhéologique simple des fluides newtoniens. Nous rappelons également que les hétérogénéités naturelles (*e.g.* agrégats, mortier) ou induites (*e.g.* phénomène de spallation, décarbonatation) du béton ne sont pas prises en compte dans ce travail. Dans ce contexte, le béton est assimilé ici à un milieu homogène et nous adopterons une condition de Stefan et une méthode de type ALE pour suivre l'évolution du front d'ablation.

La première partie (*cf.* (IV.1)) de ce chapitre est consacrée aux aspects purement compositionnels (*i.e.* sans gaz de décomposition du béton) au voisinage du front d'ablation. L'intérêt de cette première étude menée pour des configurations 2D et pour des parois ablatables horizontales est double. Il s'agit, d'une part, d'étudier l'influence des modèles de viscosité effective sur les structures d'écoulement et, d'autre part, d'apporter une première analyse critique des modèles d'échange (modèles *slag layer*) en investiguant la présence d'une couche de béton fondu. Signalons également que les configurations étudiées peuvent être représentatives des situations où le dégagement gazeux est faible (selon la composition du béton ou la température du bain) ou des zones sans dégagement de gaz (éloignement important des sites de dégagement dû par exemple à une fracturation du béton). Dans la continuité de cette étude purement compositionnelle, nous abordons ensuite dans la seconde partie de ce chapitre (*cf.* (IV.2)) les aspects diphasiques compositionnels au voisinage du front d'ablation. Il s'agit dans cette partie de prendre en compte les effets supplémentaires liés au dégagement des gaz de décomposition du béton et d'étudier leur impact sur la structure de la couche limite. Enfin, une discussion préliminaire sur la structure de la couche limite des configurations étudiées dans les sections (IV.1) et (IV.2) fait l'objet de la dernière partie de ce chapitre (*cf.* (IV.3)).

IV.1 Cas purement compositionnels

De nombreuses expériences ont été réalisées pour étudier la phénoménologie de l'ablation d'un substrat solide par un liquide chaud totalement miscible avec le substrat fondu. On cite en particulier les travaux effectués par Brinsfield [28], Farhadieh et Baker [59], Catton *& al.* [35], Fang *& al.* [58], Epstein *& al.* [56, 57] ou encore ceux réalisés par Kerr [97]. Les matériaux mis en jeu dans ces expériences sont principalement des solutions aqueuses ou salines pour le liquide chaud et de la cire ou de la glace pour le substrat solide. Ces matériaux permettent notamment de couvrir une large gamme de contraste de densité et d'étudier son impact sur l'ablation. Les résultats expérimentaux montrent l'existence d'une fine couche de substrat fondu au dessus de laquelle s'échappent en des sites distincts des panaches qui s'injectent dans le bain de liquide chaud (*cf.* Fig.IV.1). Ce mécanisme d'instabilité de type Rayleigh-Taylor (ici dans le cas miscible) est la conséquence du contraste de densité plus ou moins important qui existe entre le liquide chaud et le substrat fondu et joue un rôle majeur dans le phénomène d'ablation.

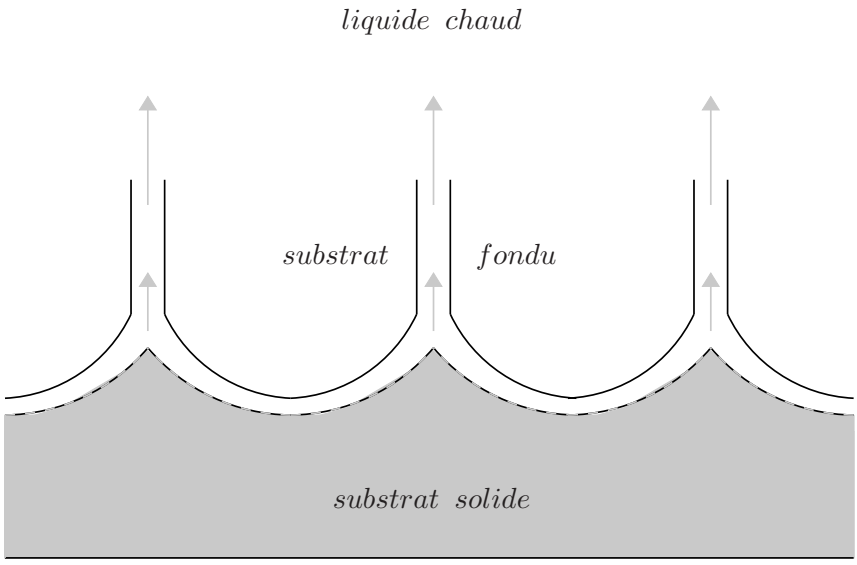


Fig. IV.1: Représentation schématique de la structure de la couche limite : fine couche de matériaux fondus avec dégagement de panaches et structure rugueuse du front d'ablation.

Trois régimes d'écoulement ont été identifiés selon les structures d'écoulement et les rugosités induites du front d'ablation (*e.g.* [58, 59]). Le premier régime dit laminaire correspond à un contraste de densité inférieur à 1.05. Dans ce cas, les panaches de matériaux fondus d'une hauteur de l'ordre du centimètre montent verticalement dans le liquide chaud. Le front d'ablation a une structure ondulée avec des rugosités dont l'amplitude est de l'ordre du millimètre et la période de l'ordre de quelques millimètres. Il a ensuite été observé, pour des contrastes de densité compris entre 1.05 et 1.08, un régime dit transitoire où la morphologie de l'écoulement change considérablement. A partir de ce régime, la structure du front d'ablation devient irrégulière et il est difficile d'en évaluer le faciès. Enfin, pour des contrastes de densité supérieurs à 1.08, comme c'est le cas par exemple dans le contexte de l'interaction corium-béton, le régime est dit turbulent. Dans ce cas, des courants de convection compositionnelle vigoureux entraînent un ballotement latéral des panaches qui perdent rapidement leur identité une fois détachés de la couche de matériaux fondus. Ces panaches sont donc nettement plus petits que dans le cas laminaire et leur taille reste difficile à estimer. En revanche, ils sont plus nombreux avec un espacement moyen de l'ordre du millimètre.

Si de nombreux travaux ont été menés sur l'impact du contraste de densité sur la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation et sur la vitesse de récession du front, il semble

en revanche que peu d'études concernent l'impact du contraste de viscosité et/ou l'influence de la présence de zones pâteuses. A notre connaissance, seuls les travaux de Kerr [97] proposent une estimation de la vitesse d'ablation en fonction du contraste de viscosité. En outre, bien que la couche de matériaux fondus soit observée expérimentalement, les mesures de quelques dixièmes de millimètres réalisées par Brinfield [28] constituent, à notre connaissance, l'unique référence sur le sujet.

On se propose ici d'étudier les effets purement compositionnels au voisinage du front d'ablation entre le corium et le béton par simulation numérique directe. On s'intéresse ici en particulier à l'impact des modèles de viscosité effective sur la structure locale de la couche limite telle que la hauteur d'une éventuelle couche de béton fondu, la vitesse moyenne d'ablation, la structure des rugosités ou encore la dynamique des panaches de béton fondu qui sont injectés dans le bain de corium. Comme nous l'avons indiqué en introduction de ce chapitre, il s'agit ici en particulier d'apporter une première analyse critique des modèles d'échange de type *slag layer* qui supposent l'existence d'une région essentiellement conductive de béton fondu. Nous rappelons également que les configurations étudiées peuvent être représentatives des situations où le dégagement gazeux est faible ou des zones sans dégagement de gaz.

Si la loi d'Urbain est généralement recommandée pour les bains silicatés [10], on étudie dans un premier temps, pour des contraste de viscosité élevés, les lois arithmétique et harmonique qui sont généralement utilisées dans le contexte multiphasique et/ou multiconstituant. Cette première étude sur l'impact du modèle de viscosité effective sur la structure de la couche limite et sur l'ablation présente de nombreux intérêts. Ces deux lois permettent en particulier de pouvoir fixer librement le contraste de viscosité et, contrairement au modèle de viscosité effective s'appuyant sur la loi d'Urbain et sur une correction fonction de la fraction solide dans le mélange, ces lois ne dépendent pas de la température. Ainsi, d'un point de vue purement hydrodynamique, la température joue ici le rôle d'un scalaire passif et on peut ignorer le problème de l'estimation de la température d'ablation du béton assimilé dans ce travail à un milieu homogène. Signalons également que ces lois présentent un intérêt particulier dans le cadre des travaux de modélisation réalisés en support aux programmes expérimentaux en matériaux simulants comme les programmes ARTEMIS (*e.g.* [113, 133]) et CLARA (*e.g.* [132, 150]). On s'intéresse dans un deuxième temps au modèle de viscosité effective s'appuyant sur la loi d'Urbain et sur une correction fonction de la fraction solide dans le mélange. Dans ce cas, la viscosité dépend non seulement de la composition du mélange mais aussi de la température au travers de la loi d'Urbain et de la loi tabulée pour la fraction solide. Les lois pour la fraction solide sont généralement issues de pré-calculs thermodynamiques et sont tabulées en fonction de la composition du pseudo-binaire corium-béton et de la température. Le diagramme de phase du pseudo-binaire corium-béton est ensuite déduit de ces résultats pour représenter les courbes de solidus et de liquidus en fonction de la composition. Si les températures de liquidus et de solidus obtenues sur l'axe correspondant au corium peuvent être confondues et identifiées à une température d'ablation d'un corps pur, elles sont en revanche très éloignées sur l'axe correspondant au béton. Dans ce dernier cas, l'utilisation de la règle des leviers ou d'une température d'ablation, comme c'est généralement le cas dans les codes d'évaluation réacteur, soulève de nombreuses questions. Devant ces difficultés, on se propose ici d'utiliser les lois de fraction solide pour deux bétons types, siliceux et silico-calcaire, et de décrire le front d'ablation toujours à partir d'une condition de Stefan mais pour plusieurs températures d'ablation données a priori.

Ces études qualitatives sont menées ici à partir de l'outil de simulation développé dans le chapitre (III) que l'on utilise ici avec seulement deux équations de Cahn-Hilliard (*cf.* (III.125)) pour des configurations 2D et pour des parois ablatables horizontales. La récession du front d'ablation est décrite à partir d'une méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) qui fait l'objet de la prochaine section. Enfin, devant les difficultés associées à l'utilisation d'une méthode ALE et de la méthode de raffinement CHARMS, les calculs sont menés sans raffinement de maillage adaptatif.

IV.1.1 Description de l'ablation par une méthode ALE

Comme nous l'avons évoqué précédemment, la démarche employée dans cette étude purement compositionnelle pour décrire l'ablation et suivre l'évolution en temps et en espace du front consiste à utiliser une condition de Stefan avec une méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian).

La description de cette méthode ALE ainsi que les différents développements conduisant à la condition de Stefan font l'objet de cette partie. On présente également les autres conditions aux limites ainsi que les différents paramètres numériques qui sont utilisés dans cette section.

La géométrie du problème est 2D cartésienne et le domaine de calcul consiste en un domaine $\Omega = [0, R] \times [0, 2R]$ avec $R = 0.024$m, dont les parois latérales sont supposées périodiques (*cf.* Fig.IV.2).

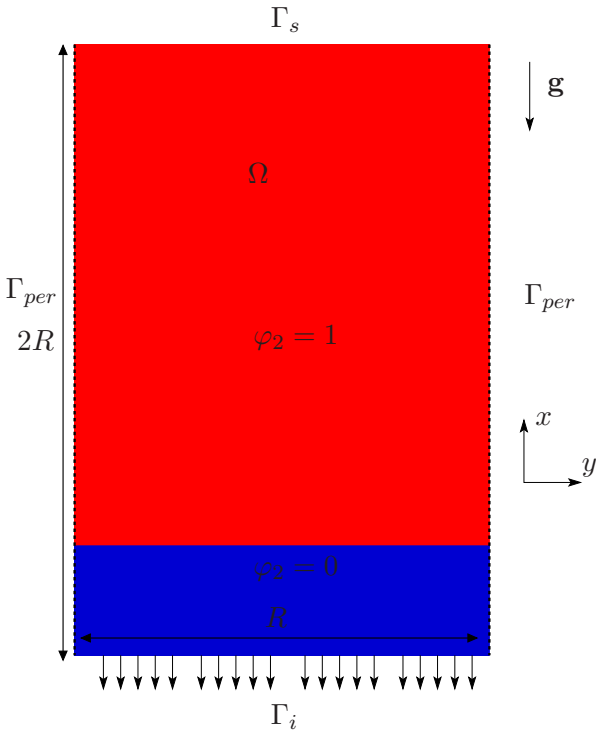


Fig. IV.2: Domaine de calcul utilisé pour l'étude des effets purement compositionnels.

La paroi inférieure Γ_i représente le front d'ablation dont la vitesse de déplacement est notée $\mathbf{u}_i$. Pour estimer cette vitesse, on commence par écrire la condition de saut sur Γ_i associée au bilan de masse

$$\mathbf{n} \cdot \varrho_l \left(\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_i\right) \quad = \quad \mathbf{n} \cdot \varrho_s \left(\mathbf{u}_s - \mathbf{u}_i\right) \quad \text{sur } \Gamma_i \tag{IV.1}$$

où les indices l et s désignent respectivement le béton liquide et le béton solide. En supposant que le solide reste immobile (*i.e.* $\mathbf{u}_s = 0$), la condition (IV.1) s'écrit

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_l \quad = \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_i \delta \quad \text{sur } \Gamma_i \tag{IV.2}$$

où $\delta = 1 - \varrho_s/\varrho_l$ est appelé paramètre de contraction. En vue de nos applications avec un mélange corium-béton où l'écart de densité entre le béton fondu et le béton solide reste négligeable devant l'écart de densité entre le béton fondu et le corium (*e.g.* [31]), on adopte ici pour simplifier $\delta = 0$, c'est-à-dire

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_l \quad = \quad 0 \quad \text{sur } \Gamma_i \tag{IV.3}$$

On utilise ensuite la condition de saut pour le bilan d'énergie définie par

$$\mathbf{n}\cdot\left[\varrho_l H_l\left(\mathbf{u}_l-\mathbf{u}_i\right)-k_l\nabla T_l\right] \;=\; \mathbf{n}\cdot\left[\varrho_s H_s\left(\mathbf{u}_s-\mathbf{u}_i\right)-k_s\nabla T_s\right] \quad \text{sur } \Gamma_i \tag{IV.4}$$

où H_l et H_s désignent respectivement l'enthalpie du liquide et du solide. Comme la vitesse du solide est supposée nulle, en négligeant pour simplifier le flux conductif dans le solide, on peut écrire à partir de la condition (IV.3) la relation suivante

$$\mathbf{n}\cdot\left(\varrho_l H_l\mathbf{u}_i+k_l\nabla T_l\right) \;=\; \mathbf{n}\cdot\varrho_s H_s\mathbf{u}_i \quad \text{sur } \Gamma_i \tag{IV.5}$$

Soit, en utilisant le fait que $\delta=0$ (*i.e.* $\varrho_l=\varrho_s$)

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{u}_i \;=\; -\mathbf{n}\cdot\frac{k_l}{\varrho_l L}\nabla T_l \quad \text{sur } \Gamma_i \tag{IV.6}$$

où $L=H_l-H_s$ désigne la chaleur latente de fusion (*cf.* Tab.II.3). La condition de Stefan correspondant à la condition à la limite (IV.6) permet ainsi de relier directement la vitesse de récession au flux de chaleur.

On souhaite désormais prendre en compte la vitesse de déplacement du front d'ablation dans la résolution du problème discret pour suivre son évolution. Pour cela, la démarche employée ici consiste à coupler le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel à une méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) (*e.g.* [48]). Cela consiste à résoudre le problème discret proposé dans la section (III.3) sur un maillage mobile et en retranchant aux vitesses d'advection des différentes équations de transport la vitesse de grille $\mathbf{u}_g$. Connaissant cette vitesse au front d'ablation à partir de la condition de Stefan (IV.6), la vitesse de grille est déterminée à partir du problème de Poisson suivant

$$\nabla^2\mathbf{u}_g \;=\; 0 \quad \text{dans } \Omega(t) \tag{IV.7a}$$

$$\mathbf{u}_g=0 \quad ou \quad \mathbf{n}\cdot\mathbf{u}_g=0 \quad \text{sur } \Gamma(t)\setminus\Gamma_i(t) \tag{IV.7b}$$

$$\mathbf{n}\cdot\mathbf{u}_g \;=\; \mathbf{n}\cdot\mathbf{u}_i \quad \text{sur } \Gamma_i(t) \tag{IV.7c}$$

où $\Omega(t)$, $\Gamma(t)$ et $\Gamma_i(t)$ désignent respectivement le domaine de calcul, le bord de Ω et le front d'ablation avant la déformation à l'instant t. Pour le paramètre d'ordre φ_2 et la température T, les conditions aux limites imposées sur $\Gamma_i(t)$ s'écrivent

$$\varphi_2 \;=\; 0 \quad \text{sur } \Gamma_i(t) \tag{IV.8a}$$

$$T \;=\; T_f \quad \text{sur } \Gamma_i(t) \tag{IV.8b}$$

où T_f désigne la température d'ablation.

Concernant les autres conditions aux limites, la paroi supérieure du domaine Γ_s modélise un bord libre sur lequel on impose les conditions aux limites de sortie (III.178b) pour la vitesse et une condition à la limite de type Neumann homogène pour le paramètre d'ordre φ_2 et la température T lorsque l'écoulement est sortant (*i.e.* $\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}>0$). Par contre, si l'écoulement est rentrant (*i.e.* $\mathbf{u}\cdot\mathbf{n}<0$), on impose les conditions aux limites de Dirichlet suivantes

$$\varphi_2 \;=\; 1-\varphi_2(t=0) \quad \text{sur } \Gamma_s \tag{IV.9a}$$

$$T \;=\; T_2(t=0) \quad \text{sur } \Gamma_s \tag{IV.9b}$$

où $T_2(t=0)$ et $\varphi_2(t=0)$ désignent respectivement la valeur de la température T et du paramètre d'ordre φ_2 à l'instant initial. Ces conditions aux limites sont imposées par pénalisation. D'un point de vue du problème discret, cela consiste donc à rajouter respectivement dans la formulation

variationnelle de l'équation pour le paramètre d'ordre φ_2 (*cf.* (A.2c)) et celle pour la température (*cf.* (A.11a)), les intégrales de bord suivantes

$$\int_{\Gamma_s} h_1 \left(\varphi_2^{n+1} - (1 - \varphi_2(t=0))\right) \qquad \text{si } \mathbf{u}\cdot\mathbf{n} > 0 \tag{IV.10a}$$

$$\int_{\Gamma_s} h_2 \left(T^{n+1} - T_2(t=0)\right) \qquad \text{si } \mathbf{u}\cdot\mathbf{n} > 0 \tag{IV.10b}$$

où h_1 et h_2 sont des coefficients de pénalisation. En pratique, nous prenons $h_1 = 10^2$ et $h_2 = 10^{12}$.

Enfin, les différents paramètres numériques utilisés dans cette section sont résumés dans le tableau (IV.1).

discrétisation			stabilisation					
Δt	Δx	Δy	c_1^η	c_2^η	c_1^D	c_2^D	c_1^k	c_2^k
5×10^{-3}	70	140	1	10	1	10	1	10

Tab. IV.1: Paramètres numériques utilisés pour l'ensemble des calculs de la section (IV.1)

IV.1.2 Lois de viscosité arithmétique et harmonique

On se propose ici d'étudier numériquement les lois arithmétique et harmonique qui sont fréquemment utilisées dans le contexte multiphasique et/ou multiconstituant. On rappelle ci-dessous l'expression de ces lois en fonction des paramètres d'ordre pour un mélange purement compositionnel (*i.e.* $\varphi_1 = 0$)

$$\eta := \eta_2\varphi_2 + \eta_3\varphi_3 \quad \text{(loi arithmétique)} \tag{IV.11}$$

$$\frac{1}{\eta} := \frac{\varphi_2}{\eta_2} + \frac{\varphi_3}{\eta_3} \quad \text{(loi harmonique)} \tag{IV.12}$$

On rappelle que l'intérêt de cette première étude sur l'impact du modèle de viscosité effective sur la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation est de pouvoir fixer librement le contraste de viscosité. En effet, comme elles ne dépendent pas de la température, aucune contrainte de modélisation associée par exemple à la fraction volumique de solide dans le mélange n'est à prendre en compte lorsque l'on cherche à décrire une zone pâteuse. Enfin, on rappelle que l'utilisation de telles lois de viscosité présente également un intérêt dans le cadre des travaux de modélisation réalisés en support aux études expérimentales menées en matériaux simulants.

Devant les nombreuses incertitudes associées au modèle de viscosité effective pour un mélange corium-béton, il est également intéressant de comparer ces lois classiques avec le modèle d'Urbain (*cf.* section (IV.1.3)). La figure (IV.3) présente l'évolution de ces trois lois pour un contraste de viscosité donné par la loi d'Urbain aux fractions volumiques $\varphi_2 = 0$ et $\varphi_3 = 0$. Ces courbes montrent clairement que la description proposée par la loi arithmétique a pour effet de favoriser les valeurs importantes de viscosité tandis que la loi harmonique favorise les faibles valeurs de viscosité. Nous reviendrons plus tard sur ce point important lors de l'analyse des résultats. Par ailleurs, la comparaison des trois lois de viscosité montrent que la courbe de la loi d'Urbain se situe entre les courbes des deux lois classiques et présente un pente similaire à celle de la loi harmonique. Dans ces conditions, les descriptions proposées par les lois classiques peuvent être vues comme deux descriptions "limites" qui contribueront par la suite à l'analyse et l'interprétation des résultats obtenus avec la loi d'Urbain.

On rappelle ici que les simulations numériques présentées dans cette partie sont réalisées avec l'outil de simulation numérique développé dans le chapitre (III) couplé à une méthode ALE (*cf.*

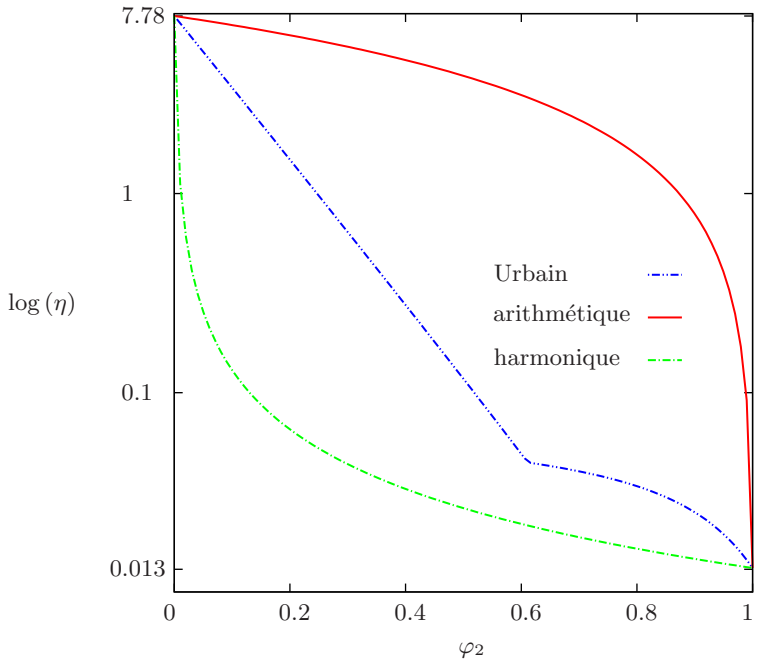


Fig. IV.3: Evolution de la viscosité η (en Pa.s) en fonction du paramètre d'ordre φ_2. Comparaison entre les lois arithmétique, harmonique et d'Urbain pour un contraste de viscosité donné : $\mathcal{R} \sim 6 \times 10^2$.

section (IV.1.1)) pour suivre l'évolution du front. Ces simulations sont effectuées dans un domaine de calcul Ω (*cf.* Fig.IV.2) dont la géométrie 2D et les conditions aux limites ont déjà été présentées dans la section (IV.1.1). Le système physique que l'on cherche à modéliser dans ce domaine est un mélange de deux fluides miscibles de densité distinctes. Ce mélange est initialement dans une configuration stratifiée, hydrodynamiquement instable, où le fluide lourd (*cf.* indices 2) surplombe le fluide léger (*cf.* indices 3). Les propriétés thermo-physiques du mélange sont répertoriées dans le tableau (IV.2). Les propriétés du fluide léger sont représentatives du béton fondu alors que celles du fluide lourd correspondent à un mélange corium-béton fondu. Le cas limite d'un fluide lourd correspondant à un *corium pur* présente de notre point de vue peu d'intérêt puisque cette situation correspond au déversement initial et met en jeu de nombreux autres phénomènes. La viscosité du

matériaux	fluide léger	fluide lourd
densité (kg.m^{-3})	2016	4400
viscosité (Pa.s)	2×10^{-2}	$\eta_3 \mathcal{R}$
conductivité (W.K^{-1}.m^{-1})	$0.7352 + 6.9 \times 10^{-4} T_f$	2.47
chaleur spécifique (J.kg^{-1}.K^{-1})	1430	600
chaleur latente (J.kg^{-1})	64×10^4	

Tab. IV.2: Propriétés thermo-physiques du mélange

fluide léger est supposée constante et égale à $\eta_3 = 0.02$Pa.s tandis que la viscosité du fluide lourd est donnée par $\eta_2 = \mathcal{R}\eta_3$ où $\mathcal{R}$ désigne le rapport de viscosité. Pour cette étude, trois contrastes de viscosité sont étudiés : $\mathcal{R} = 2 \times 10^2; 10^3; 2 \times 10^4$. Enfin, la diffusion massique entre les deux fluides est supposée constante et égale à $D = 10^{-9}$m^2.s^{-1}. Les conditions initiales pour le paramètre

d'ordre φ_2 et pour la température T sont données par

$$\varphi_2 = \begin{cases} 0 & \forall\, z < \frac{R}{5} \\ \dfrac{50}{3R}\left(z - \dfrac{R}{5}\right) & \forall\, z \in [\frac{R}{5}, \frac{13R}{50}[\\ 1 & \forall\, z \geq \frac{13R}{50} \end{cases} \tag{IV.13a}$$

$$T = \begin{cases} (T_2 - 100 - T_f)\,\dfrac{5z}{R} + T_f & \forall\, z < \frac{R}{5} \\ T_2 & \forall\, z \geq \frac{R}{5} \end{cases} \tag{IV.13b}$$

où $T_2 = 2400\text{K}$ et $T_f = 1700\text{K}$ désignent respectivement la température du fluide lourd et la température d'ablation.

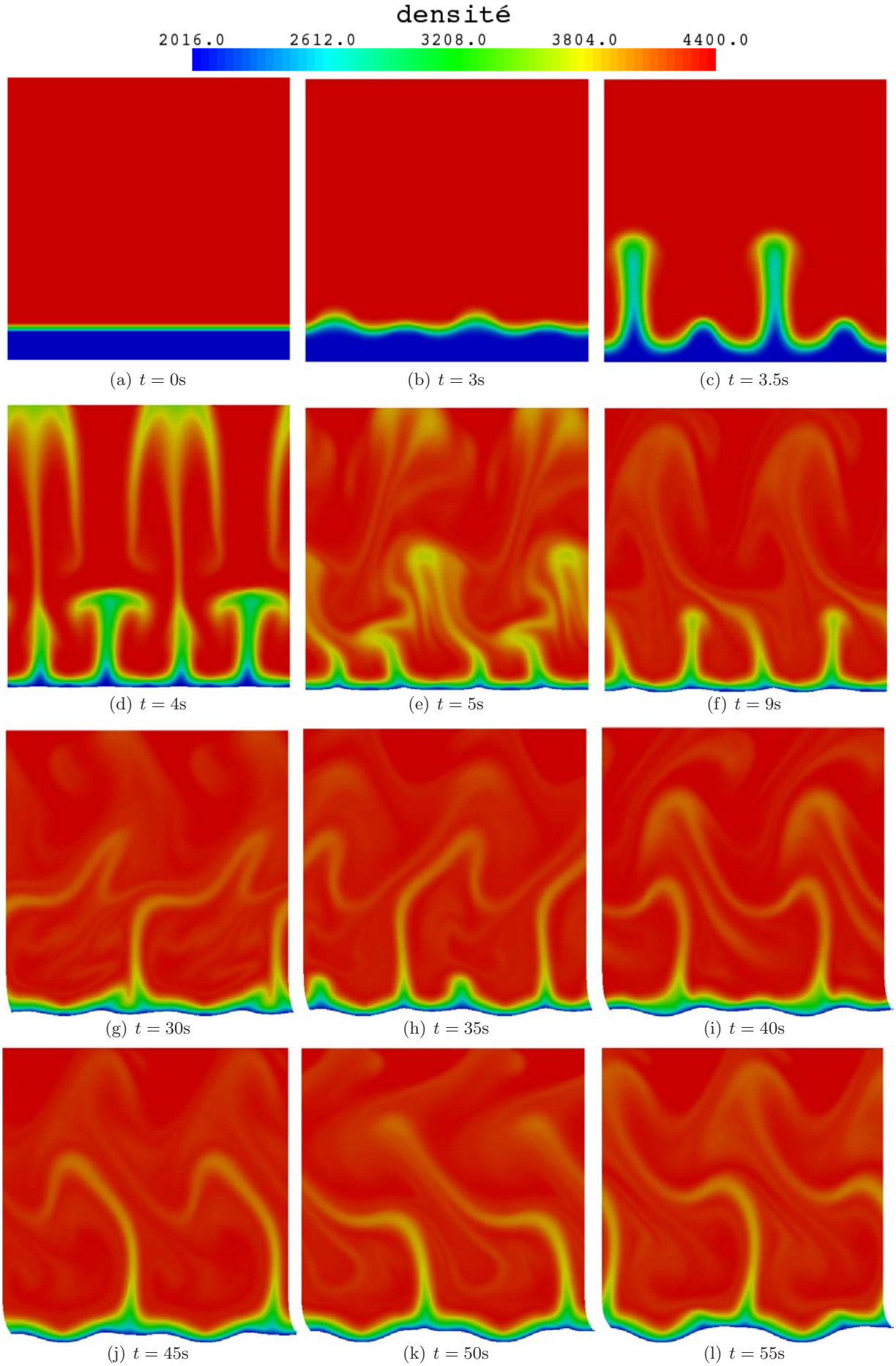
Les résultats proposés par la suite concernent uniquement la structure du mélange et la dynamique des panaches de matériaux fondus. On rappelle ici que l'objectif de cette première étude est d'étudier l'impact du choix d'un modèle de viscosité. Nous rappelons également qu'en raison des géométries 2D considérées, des effets probables de confinement et d'un maillage sous résolu pour capturer toutes les structures de l'écoulement, cette étude est essentiellement qualitative. Dans un souci de clarté, les résultats sont présentés en trois parties, chacune d'elles étant associée à un contraste de viscosité. Enfin, les illustrations proposées consistent en une juxtaposition de deux domaines de calcul périodiques pour améliorer la visibilité et la compréhension des phénomènes observés.

IV.1.2.a Cas I : $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$

On présente ici les simulations numériques réalisées sur 55s avec un contraste de viscosité $\mathcal{R} = 200$.

La figure (IV.4) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'une loi arithmétique à différents instants $t \in [0, 55\text{s}]$. Les résultats montrent que la couche de fluide léger initialement présente se déstabilise rapidement (*cf.* (b)). L'important contraste de densité entre les deux fluides miscibles (*i.e.* $\varrho_3/\varrho_2 \simeq 2.18$) entraîne la formation d'instabilités de type Rayleigh-Taylor (*cf.* (c)-(d)) puis le développement d'un mouvement de convection compositionnelle (*cf.* (e)). On distingue ensuite le dégagement de panaches de matériaux fondus en des sites distincts au voisinage du front dont la période augmente au cours du temps avec la formation de rugosités. Ces panaches sont de petites tailles et s'injectent dans le fluide lourd avant d'être balayés par les courant de convection compositionnelle présents dans le bain de fluide lourd (*cf.* (g)-(l)).

La figure (IV.5) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'une loi harmonique à différents instants $t \in [0, 55\text{s}]$. Les résultats montrent que la couche de fluide léger initialement présente se déstabilise encore plus tôt (*cf.* (b)). On constate également que la longueur d'onde de la perturbation initiale est nettement plus petite que celle observée avec une loi arithmétique. L'analyse linéaire proposée dans [141] pour deux fluides miscibles montre que l'augmentation de la viscosité du fluide léger tend à augmenter la longueur d'onde de la perturbation la plus dangereuse (*i.e.* celle qui se développe le plus rapidement). Or, comme nous l'avons vu dans l'introduction de cette partie (*cf.* Fig.IV.3), la loi harmonique favorise les faibles valeurs de viscosité contrairement à une loi arithmétique. Ceci peut donc expliquer pourquoi la longueur d'onde et le temps de déstabilisation sont plus courts avec une loi harmonique. La couche de fluide est donc moins stable et la structure du mélange observée ici est totalement différente de celle obtenue dans le cas arithmétique. Une fois la couche de fluide léger perturbée, on observe en effet que le contraste de densité entraîne la formation d'instabilités de type Rayleigh-Taylor qui sont rapidement balayées par un mouvement de convection compositionnelle vigoureux (*cf.* (c)-(f)). On peut ensuite distinguer au voisinage du front (*cf.* (g)-(l) en bleu) une population de panaches de matériaux fondus de petites tailles et plus nombreux que dans le cas arithmétique. Ces panaches alimentent le bain de fluide lourd en fluide léger et sont rapidement balayés par les courants de convection compositionnelle vigoureux.



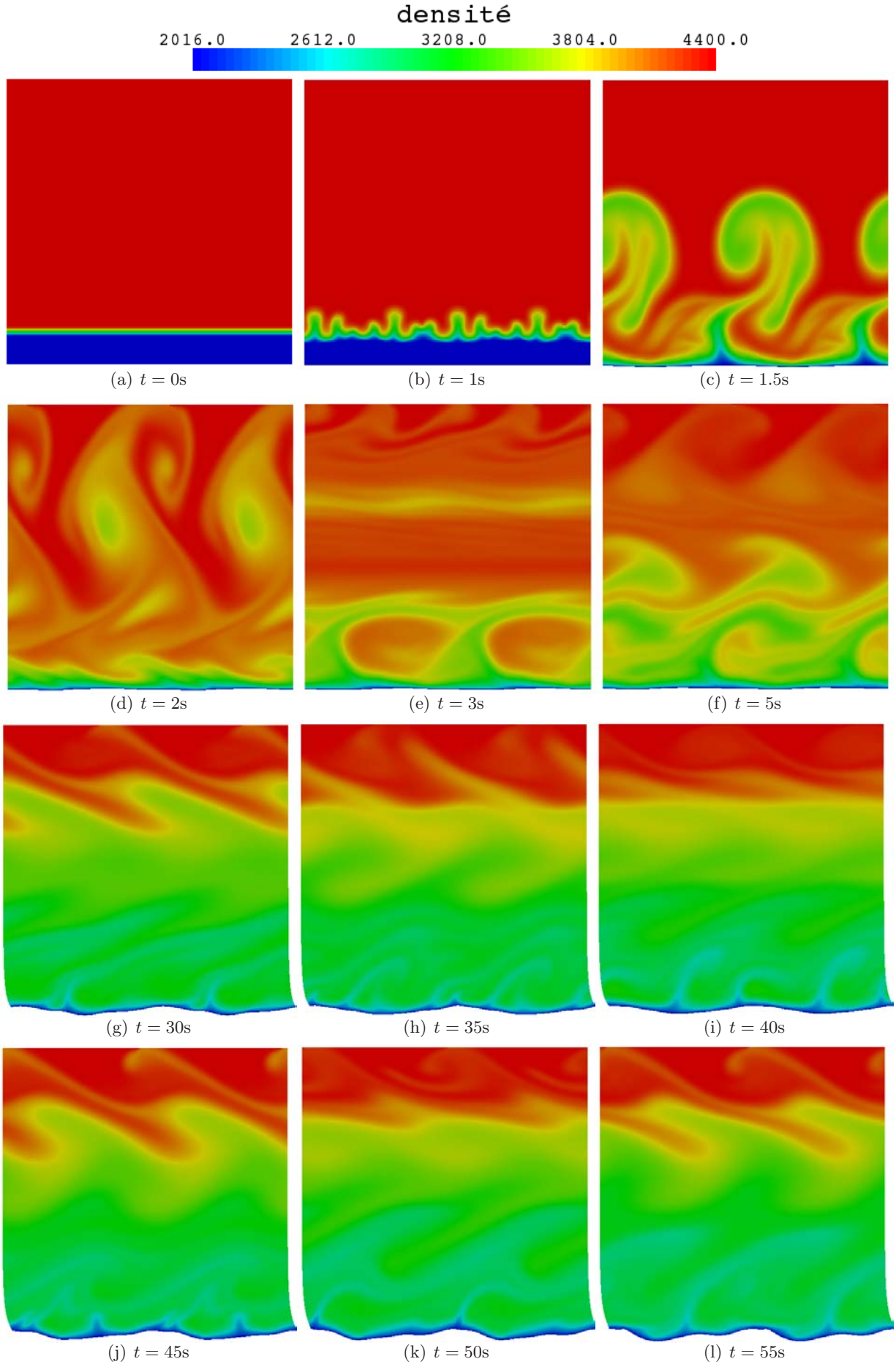
(a) $t = 0$s (b) $t = 3$s (c) $t = 3.5$s

(d) $t = 4$s (e) $t = 5$s (f) $t = 9$s

(g) $t = 30$s (h) $t = 35$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 45$s (k) $t = 50$s (l) $t = 55$s

Fig. IV.4: Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$; loi arithmétique.



(a) $t = 0$s (b) $t = 1$s (c) $t = 1.5$s

(d) $t = 2$s (e) $t = 3$s (f) $t = 5$s

(g) $t = 30$s (h) $t = 35$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 45$s (k) $t = 50$s (l) $t = 55$s

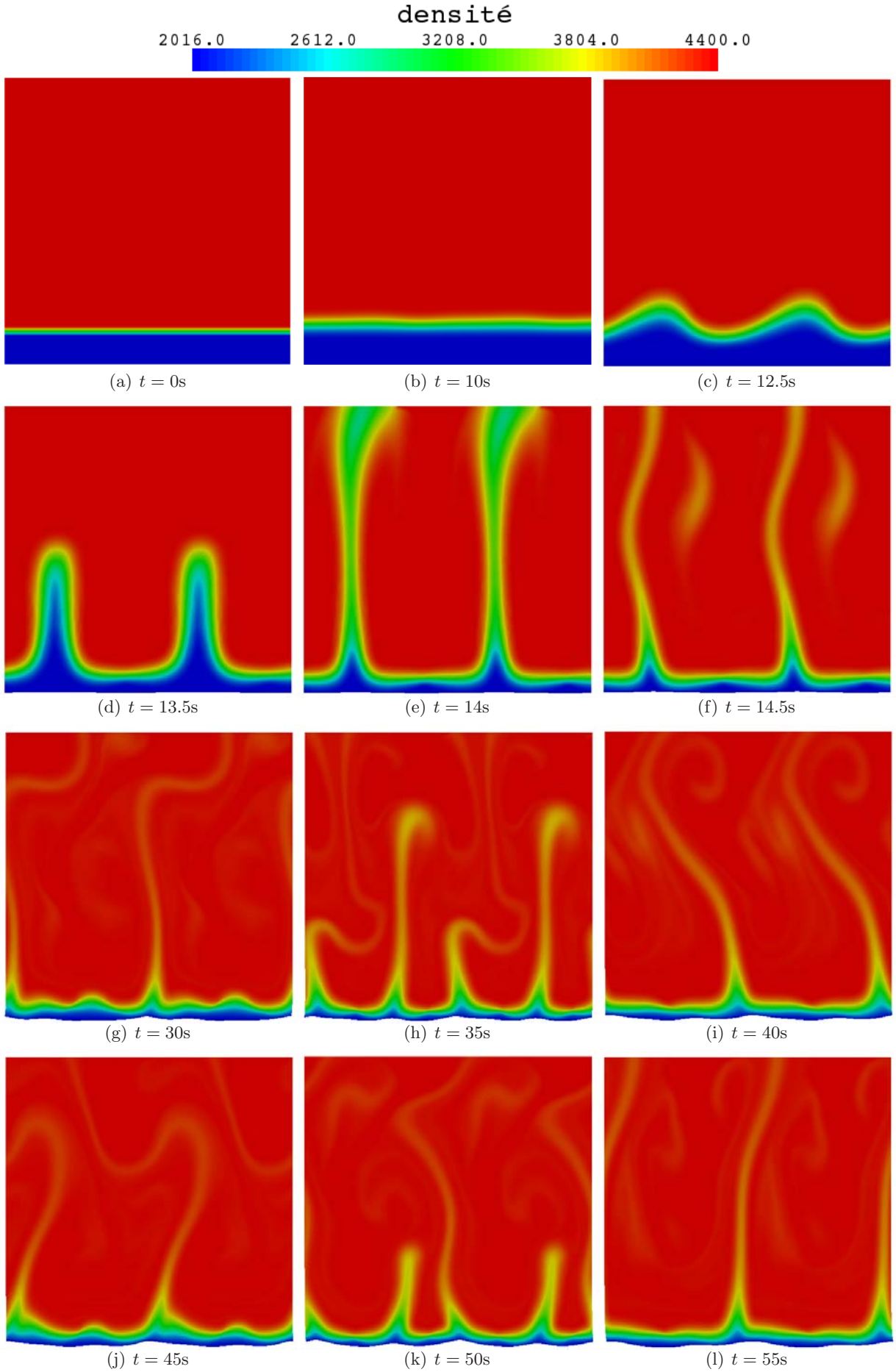
Fig. IV.5: Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$; loi harmonique.

IV.1.2.b Cas II : $\mathcal{R} = 10^3$

On présente ici les simulations numériques réalisées sur 55s avec un contraste de viscosité $\mathcal{R} = 10^3$.

La figure (IV.6) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'une loi arithmétique à différents instants $t \in [0, 55\text{s}]$. Les résultats montrent, d'une part, que la couche de fluide léger initialement présente se déstabilise plus tard et, d'autre part, que la longueur d'onde de la perturbation observée est plus longue (*cf.* (c)). Pour cette loi, on constate donc que l'augmentation du contraste de viscosité augmente non seulement le temps de déstabilisation mais aussi la longueur d'onde. Ces résultats s'expliquent à nouveau par le fait que la loi arithmétique favorise les fortes valeurs de viscosité qui ont pour effet d'augmenter la longueur d'onde la plus dangereuse [141]. Les instabilités se développent ensuite progressivement jusqu'à atteindre le haut du domaine de calcul (*cf.* (d)-(e)) puis un mouvement de convection prend place dans le bain de fluide lourd (*cf.* (f)). Pour le temps de calcul considéré, on constate que l'intensité des mouvements de convection compositionnelle est plus faible que dans le cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^2$. Il serait néanmoins intéressant d'effectuer des simulations sur des temps longs pour confirmer ce comportement.

La figure (IV.7) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'une loi harmonique à différents instants $t \in [0, 55\text{s}]$. Contrairement à loi arithmétique, les résultats de la figure (IV.7) ne mettent pas en évidence l'impact du contraste de viscosité sur la structure de l'écoulement. Comme la loi harmonique favorise les faibles valeurs de viscosité, la couche de fluide léger se déstabilise très rapidement en dépit de l'augmentation du contraste de viscosité (*cf.* (b)-(c)). Le contraste de densité conduit à nouveau à la formation d'instabilité de type Rayleigh-Taylor (*cf.* (c)) et à la mise en place d'un mouvement de convection compositionnelle vigoureux. Enfin, on distingue ici encore la présence de nombreux panaches de matériaux fondus de petites tailles qui s'échappent du voisinage du front d'ablation pour être balayés par les courants de convection présents dans le bain (*cf.* (g)-(l) en bleu).



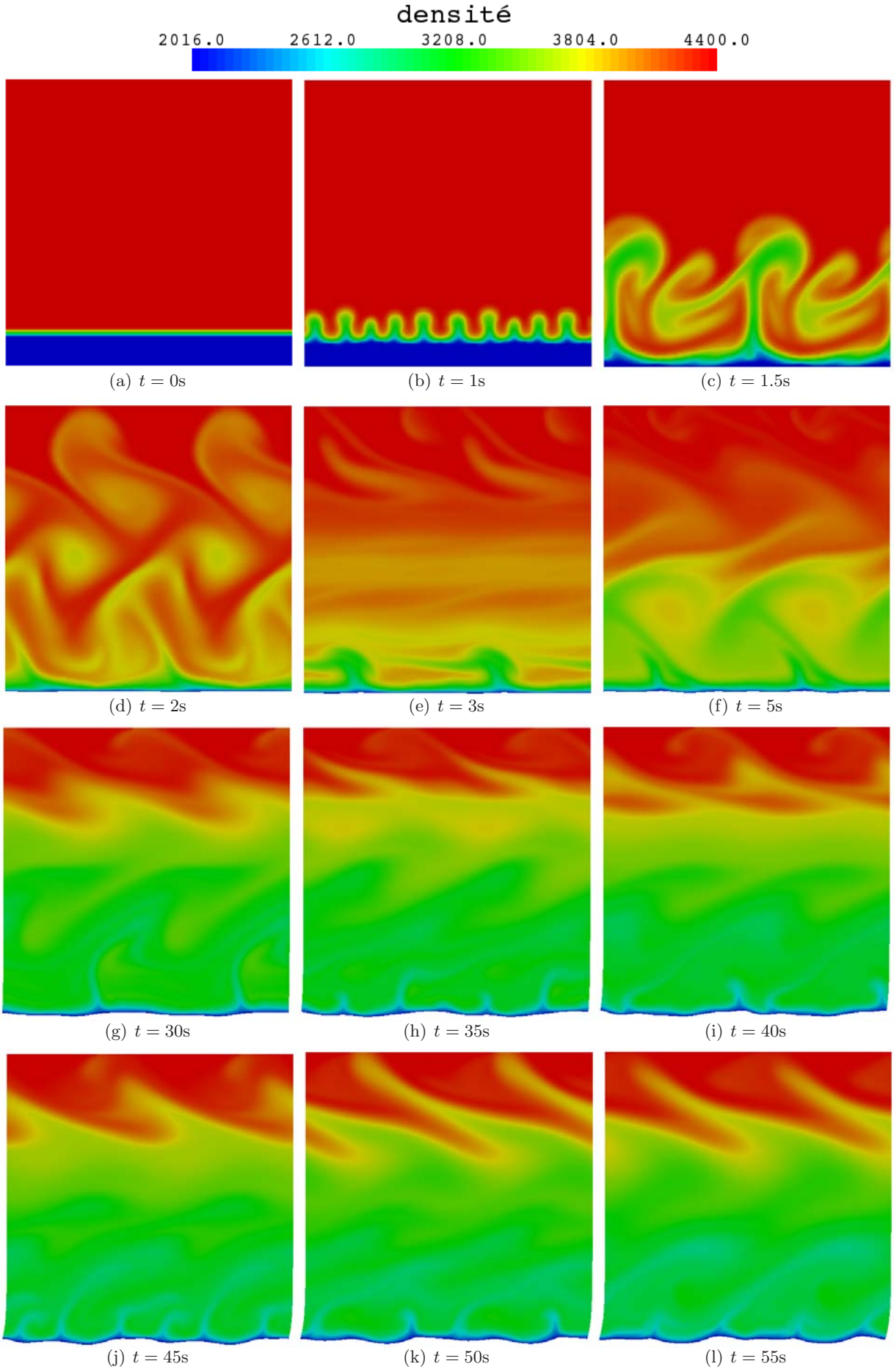
(a) $t = 0$s (b) $t = 10$s (c) $t = 12.5$s

(d) $t = 13.5$s (e) $t = 14$s (f) $t = 14.5$s

(g) $t = 30$s (h) $t = 35$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 45$s (k) $t = 50$s (l) $t = 55$s

Fig. IV.6: Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$: cas $\mathcal{R} = 10^3$; loi arithmétique.



(a) $t = 0$s (b) $t = 1$s (c) $t = 1.5$s

(d) $t = 2$s (e) $t = 3$s (f) $t = 5$s

(g) $t = 30$s (h) $t = 35$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 45$s (k) $t = 50$s (l) $t = 55$s

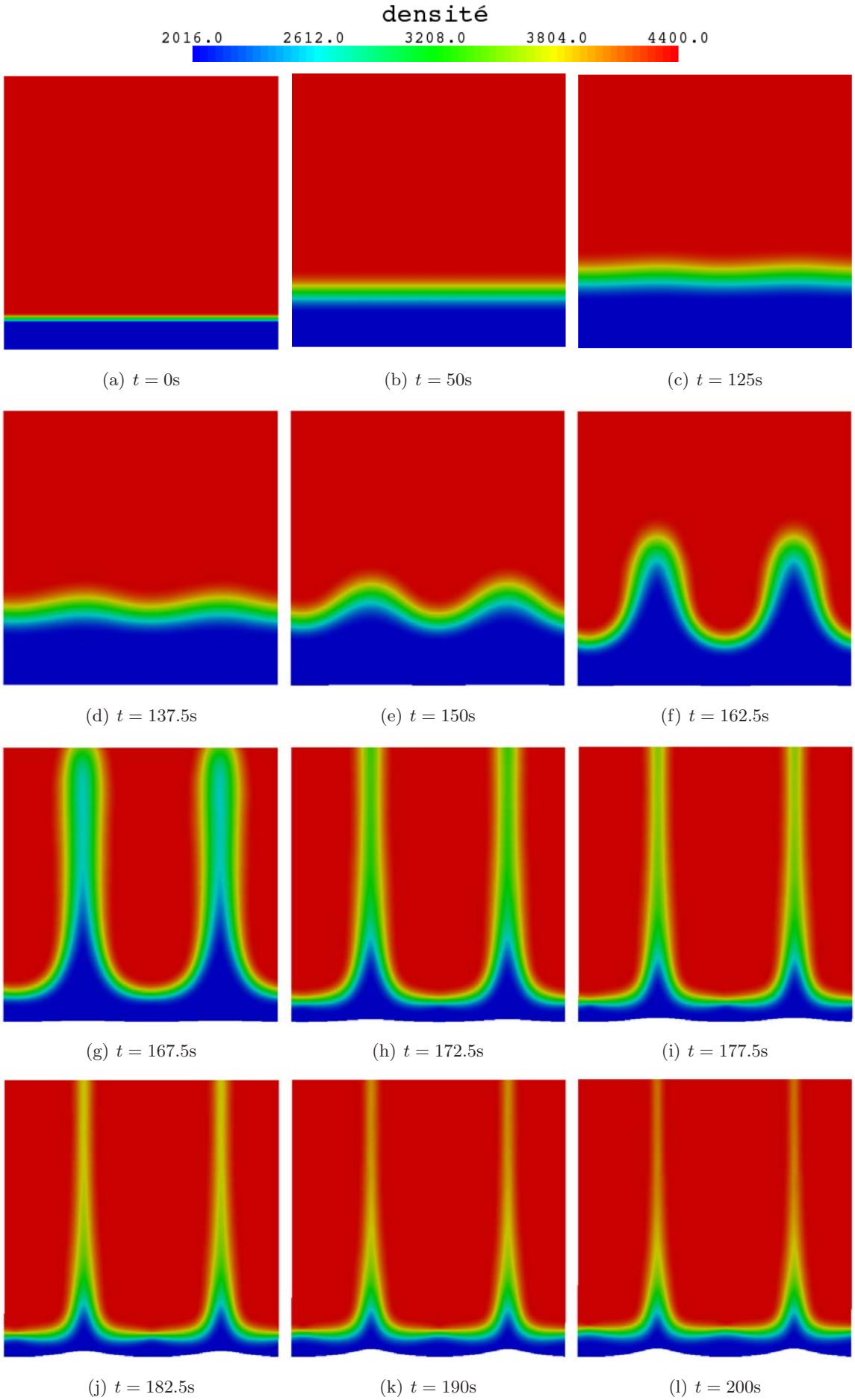
Fig. IV.7: Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$: cas $\mathcal{R} = 10^3$; loi harmonique.

IV.1.2.c Cas III : $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$

On présente ici les simulations numériques réalisées avec un contraste de viscosité $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$ sur 200s pour la loi arithmétique et sur 55s pour la loi harmonique.

La figure (IV.8) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'une loi arithmétique à différents instants $t \in [0, 200\text{s}]$. Les résultats montrent à nouveau que, pour une loi arithmétique, l'augmentation du contraste de viscosité augmente le temps de déstabilisation de la couche de fluide léger (*cf.* (c)-(d)). On observe néanmoins que le contraste de viscosité n'a pas eu d'effet significatif sur la longueur d'onde de la perturbation. Les résultats proposés sur la figure (IV.8) montrent ensuite le développement progressif des instabilités de type Rayleigh-Taylor. Bien que ces simulations numériques aient été réalisées sur un temps plus long, elles ne permettent pas d'observer la mise en place d'un mouvement de convection compositionnelle similaire à celui observé pour les deux précédents contrastes. En effet, si le régime d'écoulement observé dans les précédentes études peut être associé au régime dit turbulent observé expérimentalement et décrit dans l'introduction de cette section, les résultats proposés ici se rapprochent plus du régime dit laminaire avec notamment une montée verticale des panaches. Il serait néanmoins intéressant de vérifier la persistance de ce régime sur des temps de simulation encore plus longs.

La figure (IV.9) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'une loi harmonique à différents instants $t \in [0, 55\text{s}]$. Comme pour le contraste de viscosité $\mathcal{R} = 10^3$, les résultats obtenus ne permettent pas de mettre en évidence l'impact du contraste de viscosité. L'analyse des résultats proposés pour les deux précédents contrastes de viscosité reste inchangée. On observe à nouveau une déstabilisation très rapide de la couche de fluide léger puis la mise en place d'un mouvement convectif intense qui balaye rapidement les premières instabilités de type Rayleigh-Taylor (*cf.* (b)-(c)). Ici encore, on peut distinguer le dégagement de nombreux petits panaches de matériaux fondus au voisinage du front d'ablation qui perdent rapidement leur identité à cause des courants de convection compositionnelle présents dans le bain de fluide lourd (*cf.* (g)-(l)).



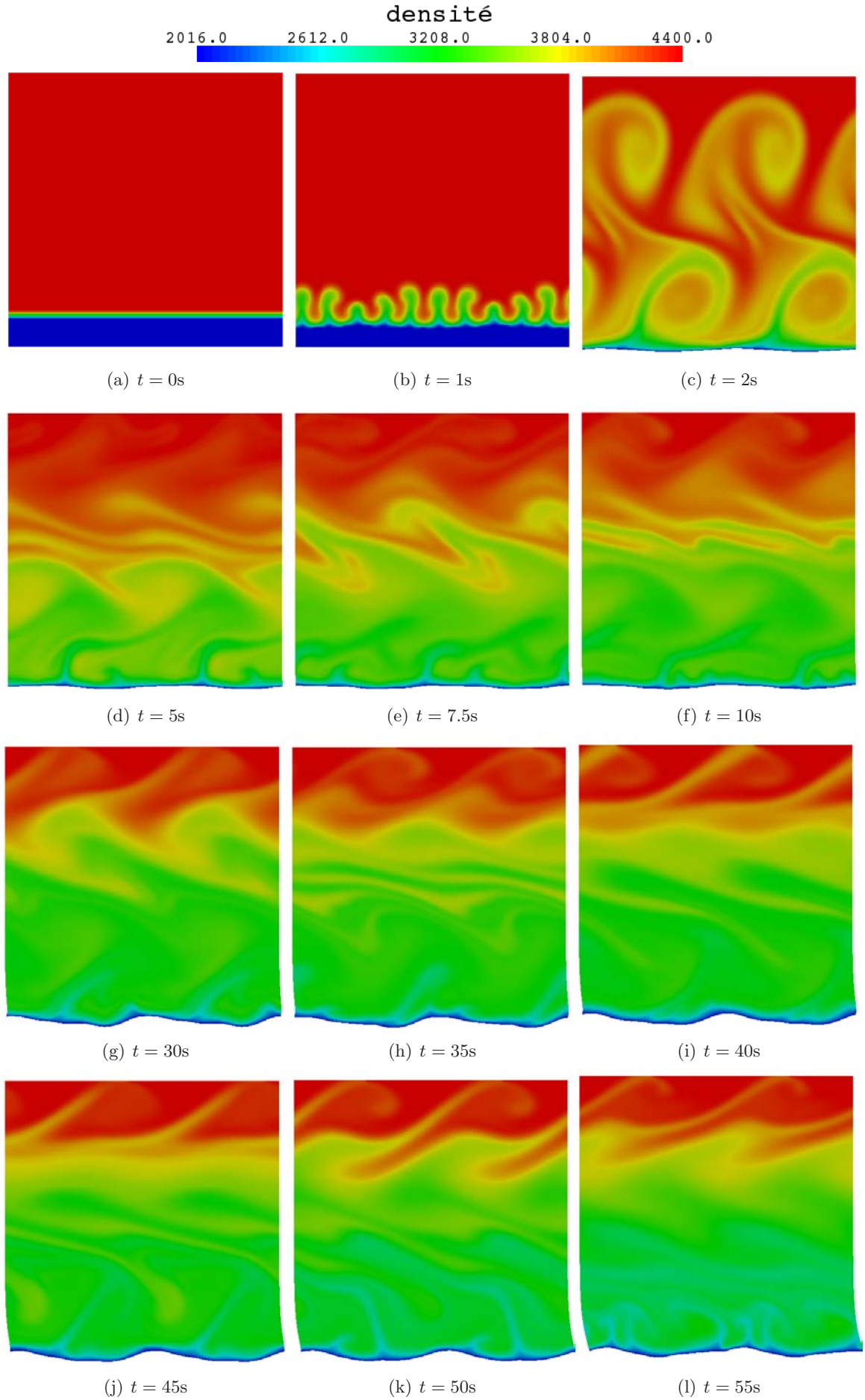
(a) $t = 0$s (b) $t = 50$s (c) $t = 125$s

(d) $t = 137.5$s (e) $t = 150$s (f) $t = 162.5$s

(g) $t = 167.5$s (h) $t = 172.5$s (i) $t = 177.5$s

(j) $t = 182.5$s (k) $t = 190$s (l) $t = 200$s

Fig. IV.8: Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$; loi arithmétique.



(a) $t = 0$s (b) $t = 1$s (c) $t = 2$s

(d) $t = 5$s (e) $t = 7.5$s (f) $t = 10$s

(g) $t = 30$s (h) $t = 35$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 45$s (k) $t = 50$s (l) $t = 55$s

Fig. IV.9: Evolution de la densité pour $t \in [0\text{s}, 55\text{s}]$: cas $\mathcal{R} = 2 \times 10^4$; loi harmonique.

IV.1.3 Modèle de viscosité d'Urbain

On s'intéresse désormais dans cette partie au modèle de viscosité effective s'appuyant sur la loi d'Urbain et sur une correction fonction de la fraction volumique solide dans le mélange. La loi d'Urbain, généralement recommandée pour les bains silicatés [10], dépend non seulement de la composition du mélange mais aussi de la température et s'écrit

$$\eta(T) \quad = \quad 0.1aTe^{\left(10^3 b/T\right)} \quad \text{(en Pa.s)} \tag{IV.14}$$

où les paramètres a et b s'expriment respectivement en Pa.s.K^{-1} et en K et sont reliés par la relation

$$\ln a \quad = \quad -0.29b - 11.57 \tag{IV.15}$$

Le paramètre b est fonction de la composition des différentes espèces constituant le mélange corium-béton et nous renvoyons le lecteur à la référence [10] pour son expression détaillée. Pour fixer les idées, on considère ici deux bétons mis en oeuvre dans les expériences VULCANO de type siliceux et silico-calcaire (*e.g.* [31]). La composition et les propriétés thermo-physiques des matériaux sont respectivement présentées dans les tableaux (IV.3) et (IV.4). Comme pour l'étude précédente menée avec les lois arithmétique et harmonique, on ne considère pas ici le cas limite du déversement initial et le fluide lourd correspond à un mélange corium-béton caractérisé par une masse volumique de 4400kg.m^{-3}. A partir de la composition des matériaux (*cf.* Tab.IV.3), ce mélange correspond à un corium enrichi de 55.7% en volume (ou 72.3% en masse) et 57% en volume (ou 74.5% en masse) de béton fondu respectivement pour les bétons siliceux et silico-calcaire. Pour ce mélange corium-béton fondu, la diffusion massique est supposée constante et égale à $D = 10^{-9}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$.

composition (en % en masse)	UO_2	ZrO_2	CaO	SiO_2	Fe_2O_3	Al_2O_3
béton siliceux	0	0	19	74	1.6	6
béton silico-calcaire	0	0	60	36	0	3.4
corium	60	40	0	0	0	0

Tab. IV.3: Composition des matériaux.

matériaux	béton silico-calcaire	béton siliceux	corium
densité (kg.m^{-3})	2016	2140	7400
conductivité (W.K^{-1}.m^{-1})	$0.7352 + 6.9 \times 10^{-4} T_f$		2.47
chaleur spécifique (J.kg^{-1}.K^{-1})	1430	1410	600
chaleur latente (J.kg^{-1})	64×10^4	34×10^4	

Tab. IV.4: Propriétés thermo-physiques des matériaux.

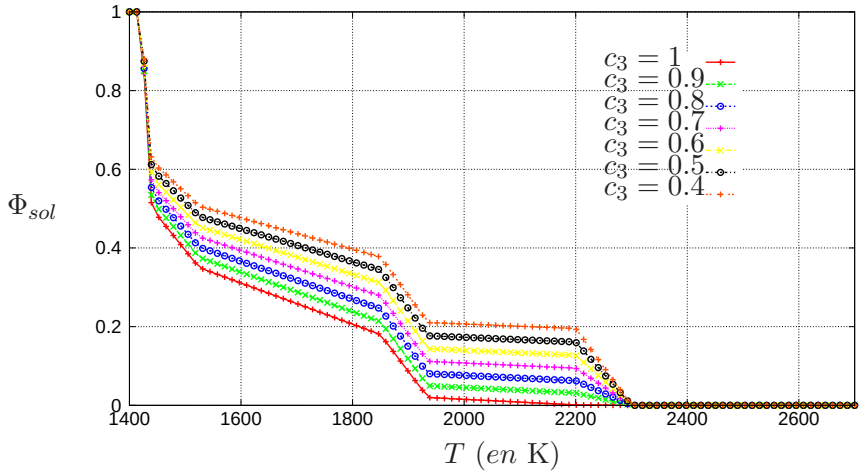
Si la loi d'Urbain est généralement recommandée pour les bains silicatés, son domaine de validité reste néanmoins limité à des températures supérieures ou pas très éloignées de la température liquidus. Dans l'intervalle de température liquidus-solidus, la viscosité peut être fortement sous-estimée et on adopte généralement une correction fonction de la fraction solide pour prendre en compte la présence de *zones pâteuses*. Les corrections proposées consistent à définir la viscosité effective η_{eff} du mélange sous la forme

$$\eta_{eff} \quad = \quad \eta(T) f(\Phi_{sol}) \quad \text{(en Pa.s)} \tag{IV.16}$$

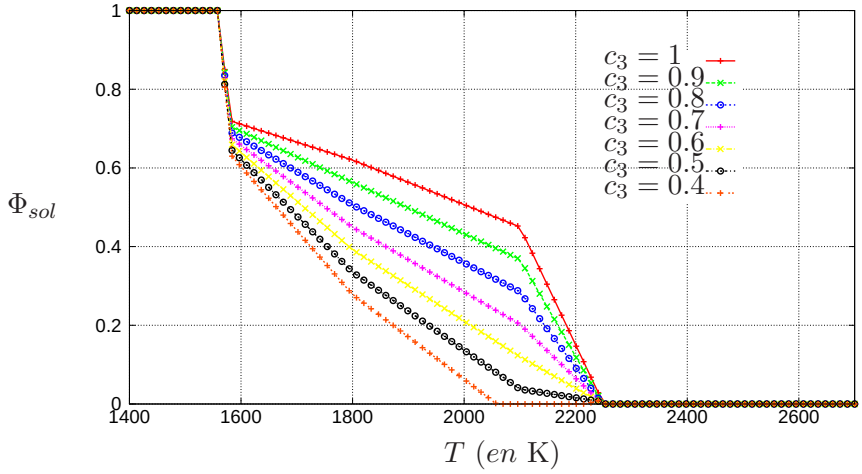
où $\eta(T)$ correspond ici à la viscosité définie par la loi d'Urbain et $f(\Phi_{sol})$ désigne une correction fonction de la fraction de solide Φ_{sol} ayant généralement la forme d'une loi de type Arrhenius. On considère ici la fonction f proposée par Ramacciotti *& al.* [128]

$$f(\Phi_{sol}) = e^{(2.5C\Phi_{sol})} \tag{IV.17}$$

où $C \in [4, 8]$ est un paramètre ajustable et on adoptera ici la valeur généralement recommandée $C = 4$. La fraction solide est généralement déterminée sur la base de pré-calculs thermodynamiques et tabulée en fonction de la température du mélange et de la composition du pseudo-binaire corium-béton. On utilise ici, pour simplifier, des interpolations linéaires des pré-calculs proposés dans [67] pour les deux types de béton considérés (*cf.* Fig.IV.10). La viscosité du mélange corium-béton calculée à partir de ces valeurs tabulées de la fraction de solide Φ_{sol} est représentée sur la figure (IV.11) pour les bétons siliceux et les bétons silico-calcaires.



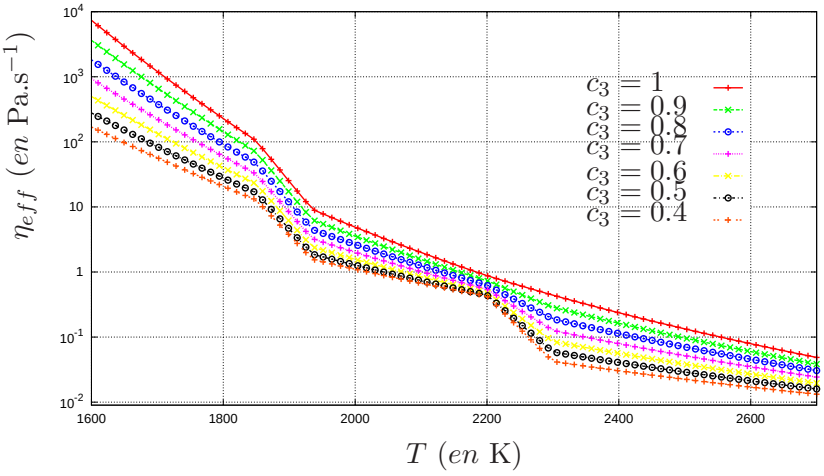
(a) Béton siliceux



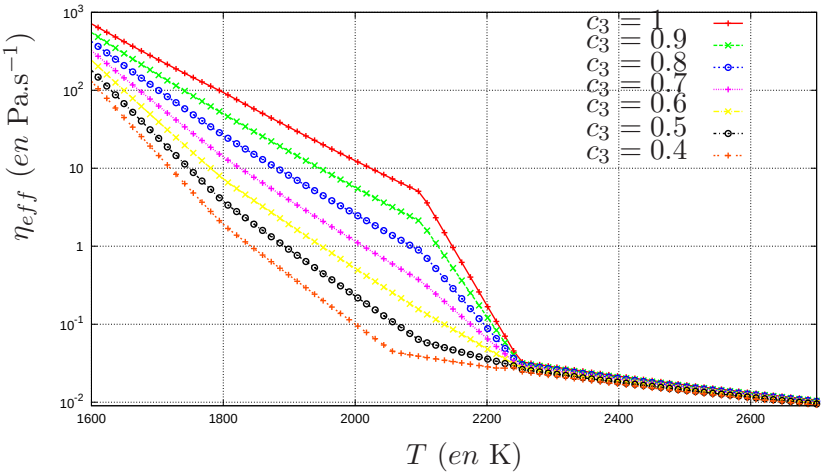
(b) Béton silico-calcaire

Fig. IV.10: Fraction de solide Φ_{sol} en fonction de la température et de l'enrichissement en béton fondu (*i.e.* $c_3 = \varrho_3\varphi_3/\rho$) dans le mélange.

On continue ici de décrire l'ablation du radier en béton au travers d'une condition de Stefan avec une méthode ALE (*cf.* (IV.1.1)). Comme nous l'avons indiqué en introduction de ce chapitre, ce choix est discutable compte tenu du fait qu'il n'existe pas, pour les mélanges corium-béton, de



(a) Béton siliceux



(b) Béton silico-calcaire

Fig. IV.11: Viscosité du mélange en fonction de la température et de l'enrichissement en béton fondu (*i.e.* $c_3 = \varrho_3\varphi_3/\rho$) dans le mélange.

front d'ablation au sens d'une surface de discontinuité entre un béton solide et un béton liquide mais plutôt une zone de transition pâteuse où la température varie entre le liquidus et le solidus (*cf.* Fig.IV.12). En effet, contrairement à un binaire constitué de deux corps purs, il n'est pas possible ici d'identifier sur le diagramme de phase du pseudo-binaire corium-béton (diagramme déduit des calculs de fraction solide) les températures liquidus et solidus sur l'axe correspondant au béton. L'utilisation d'une condition de Stefan et la définition d'une température d'ablation sont néanmoins adoptées dans les codes d'évaluation réacteur et nous adopterons dans ce travail le même type de description. Dans ces conditions, nous avons trouvé intéressant d'étudier numériquement l'impact d'une température d'ablation choisie dans cette zone pâteuse (*cf.* Fig.IV.12) sur la structure de la couche limite. Pour cela, trois températures d'ablation $T_f \in \{1600\text{K}, 1700\text{K}, 2000\text{K}\}$ ont été étudiées.

Les simulations numériques présentées ici ont été réalisées dans le domaine de calcul Ω (*cf.*

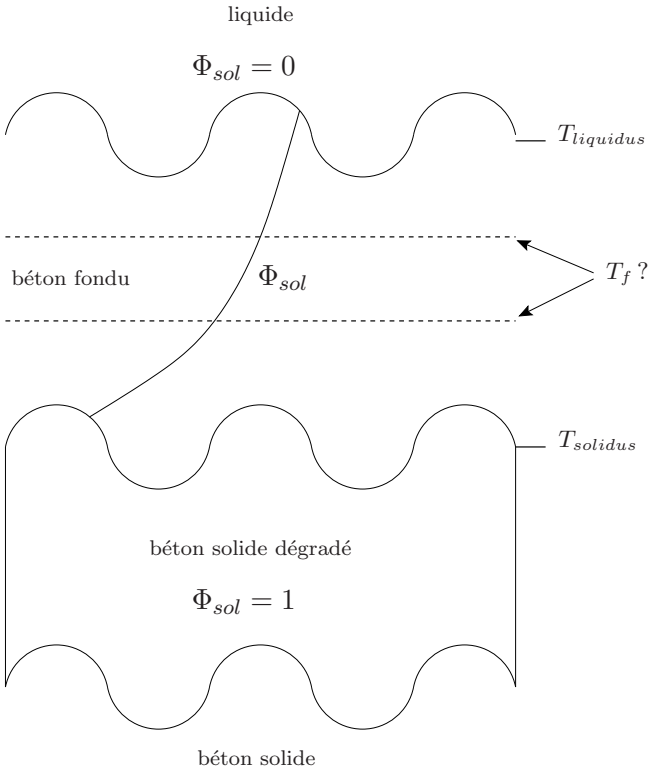


Fig. IV.12: Schématisation du front d'ablation avec la prise en compte d'une zone pâteuse.

Fig.IV.2). Les conditions initiales pour le paramètre d'ordre φ_2 et pour la température T s'écrivent

$$\varphi_2 = \begin{cases} 0 & \forall\, z < \frac{R}{5} \\ \dfrac{50}{3R}\left(z - \dfrac{R}{5}\right) & \forall\, z \in [\frac{R}{5}, \frac{13R}{50}[\\ 1 - \varphi_D & \forall\, z \geq \frac{13R}{50} \end{cases} \tag{IV.18a}$$

$$T = \begin{cases} (T_2 - 100 - T_f)\,\dfrac{5z}{R} + T_f & \forall\, z < \frac{R}{5} \\ T_2 & \forall\, z \geq \frac{R}{5} \end{cases} \tag{IV.18b}$$

où $T_2 = 2400$K et φ_D désignent respectivement la température du corium et l'enrichissement en volume en béton fondu dans le corium.

Les résultats proposés par la suite concernent la couche de béton fondu, la structure et la dynamique des panaches de béton fondus, la topologie du front d'ablation et la vitesse moyenne d'ablation. On rappelle ici, qu'en plus des différentes hypothèses de modélisation adoptées, cette étude est essentiellement qualitative en raison des géométries 2D considérées, des effets probables de confinement et d'un maillage sous résolu pour capturer toutes les structures de l'écoulement. Comme dans la section (IV.1.2), les illustrations proposées consistent en une juxtaposition de deux domaines de calcul périodiques pour améliorer la visibilité et la compréhension des phénomènes observés. Enfin, dans un souci de clarté, ces résultats sont présentés en trois parties, chacune d'elles étant associée à une température d'ablation du radier.

IV.1.3.a Cas I : température d'ablation $T_f = 1600$K

Les résultats présentés ici concernent les simulations numériques réalisées sur 150s avec une température d'ablation T_f égale à 1600K. A cette température, la fraction de solide présente dans le

béton fondu Φ_{sol} est de 71% pour un béton silico-calcaire et de 31% pour un béton siliceux. D'après la relation (IV.16) la viscosité du béton fondu η_3 est de 712.44Pa.s dans le cas silico-calcaire et de 7370.29Pa.s dans le cas siliceux. Ainsi, comme la viscosité du bain de corium η_2 à 2400K est de 15.2×10^{-3}Pa.s lorsqu'il est enrichi en béton silico-calcaire et de 22.6×10^{-3}Pa.s lorsqu'il est enrichi en béton siliceux, les contrastes de viscosité $\mathcal{R} = \eta_3/\eta_2$ dans le cas d'un béton silico-calcaire et dans le cas d'un béton siliceux sont respectivement de l'ordre de 46871 et de l'ordre de 326119.

La figure (IV.13) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'un béton silico-calcaire à différents instants $t \in [0, 150\text{s}]$. Les résultats montrent que la couche de béton fondu initialement présente se déstabilise très rapidement. Pour expliquer ce comportement, nous rappelons ici que la pente de la loi d'Urbain est proche de celle d'une loi harmonique (*cf.* Fig.IV.3) qui favorise les faibles viscosités et donc la croissance rapide de petites longueurs d'ondes. L'important contraste de densité entre le corium et le béton fondu (*i.e.* $\varrho_3/\varrho_2 \simeq 2.18$) entraîne la formation d'instabilités de type Rayleigh-Taylor puis le développement rapide d'un mouvement de convection compositionnelle (*cf.* (c)-(d)). On peut alors distinguer quatre régions. La première région correspond à une fine couche de béton fondu et se situe au voisinage du front d'ablation (*cf.* la couche bleue sur la figure (IV.13)). On admet ici, pour simplifier, que la teneur en corium est inférieure à 5% dans cette couche dont la hauteur observée au bout de 150s est de 1.5mm. Au dessus de cette couche, on distingue une zone de mélange (couche verte sur la figure (IV.13)) à partir de laquelle s'échappent des panaches de matériaux fondu qui sont rapidement balayés dès qu'ils montent dans le bain de corium. Ce comportement des panaches est similaire à celui qui a été observé avec la loi harmonique dans la section (IV.1.2). On distingue alors une troisième région (majoritairement jaune sur la figure (IV.13)) dans laquelle les mouvements de convection compositionnelle sont importants. Ces mouvements convectifs se distinguent selon deux types répartis en deux zones bien distinctes (*cf.* Fig.IV.16). D'une part, une zone dans laquelle des rouleaux de convection de plus ou moins grande taille prennent place et provoquent donc le ballotement latéral et aléatoire des panaches (*cf.* Fig.IV.16 □ (haut)). D'autre part, une zone dans laquelle l'écoulement est principalement transverse et plus intense (*cf.* Fig.IV.16 □ (haut)). Les mouvements convectifs observés dans ces zones contribuent non seulement au mélange des deux espèces mais aussi à l'homogénéisation de la température (*cf.* figure Fig.IV.18). Ce double processus de mélange est également observé expérimentalement dans le régime turbulent décrit au début de cette section. Il est notamment appelé "mélange convectif" dans [59]. Enfin, en haut du domaine de calcul (majoritairement rouge sur la figure (IV.13)), on distingue une région principalement constituée de corium. Concernant la température, la figure (IV.19) montre le profil de température effectué suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150$s. Les résultats présentés sur cette figure montrent la présence d'une couche limite thermique d'une hauteur de l'ordre de 5mm dans laquelle la température varie de 550K. Cette couche limite thermique est donc plus épaisse que la couche de béton fondu. La température augmente ensuite progressivement de 250K dans la zone de mélange avant d'atteindre un plateau à 2400K dans la zone riche en corium. Ces simulations numériques montrent également la formation progressive de rugosités sur le front d'ablation (*cf.* (l)) dont la structure est ondulée et l'amplitude observée au bout de 150s est de 1.75mm (*cf.* Fig.IV.15). Le couplage entre le contraste de densité et les mouvements de convection conduit à la formation de petits panaches dans le creux des rugosités (*cf.* (i)) qui viennent ensuite alimenter les panaches de taille plus grande qui s'échappent principalement de la crête des rugosités (*cf.* (j)).

Dans le cas d'un béton siliceux, l'évolution de la densité du mélange est présentée aux mêmes instants $t \in [0, 150\text{s}]$ sur la figure (IV.14). Dans ce cas où la valeur du contraste de viscosité est plus importante, la couche de béton fondu se déstabilise plus tard (*cf.* (c)). Comme pour un béton silico-calcaire, des instabilités de type Rayleigh-Taylor se développent et un mouvement de convection compositionnelle se met en place (*cf.* (c)-(d)). Les mouvements convectifs peuvent à nouveau être répartis suivant deux zones avec, d'une part, une zone dans laquelle on a des rouleaux de convection (*cf.* Fig.IV.16 □ (bas)) et, d'autre part, une zone dans laquelle l'écoulement est principalement

transverse et plus vigoureux (*cf.* Fig.IV.16 □ (bas)). Pour ce type de béton, on distingue également les quatre régions précédemment décrites. Par contre, la couche de béton fondu est plus épaisse avec une hauteur observée de 2.75mm. Ceci s'explique encore une fois par le caractère très visqueux du béton fondu à cette température d'ablation. Sur la figure (IV.15), on remarque que l'échelle de description proposée dans cette étude ne permet pas de distinguer la structure des rugosités. On en déduit que la viscosité a également pour effet de réduire considérablement l'amplitude des rugosités sur le front d'ablation. Enfin, on peut voir sur la figure (IV.18) que le brassage thermique est moins intense pour un béton siliceux. Le profil de température effectué suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150$s est représenté sur la figure (IV.19). Les résultats montrent la présence d'une couche limite thermique d'une hauteur de l'ordre de 5mm dans laquelle la température varie de 650K. Comme pour un béton silico-calcaire, la couche limite thermique est plus épaisse que la couche de béton fondu. La température augmente ensuite progressivement de 150K dans la zone de mélange avant d'atteindre un plateau à 2400K dans la zone riche en corium.

On s'intéresse désormais à la distribution de la fraction de solide Φ_{sol} dans le mélange. L'objectif ici est d'observer la présence de zone "pâteuse" au sein du mélange. Les résultats présentés sur la figure (IV.17) montrent que la fraction de solide est maximale sur le front d'ablation. Pour un béton silico-calcaire, Φ_{sol} diminue lorsque la teneur en corium et la température augmente. En revanche, pour un béton siliceux, il existe une région de transition où la valeur de la fraction de solide décroît lorsque la température du mélange augmente puis croît lorsque la teneur en corium dans le mélange augmente. La présence de cette zone "pâteuse" est en parfait accord avec l'évolution de Φ_{sol} tabulée (*cf.* Fig.IV.10).

Les derniers résultats proposés dans cette partie concernent la vitesse moyenne d'ablation définie ici par

$$\overline{\mathbf{u}}(t) \quad = \quad \frac{1}{|\Gamma_i(t)|}\int_{\Gamma_i(t)} \mathbf{u} d\Gamma \tag{IV.19}$$

La figure (IV.20) présente l'évolution de la vitesse moyenne d'ablation (en $\mathrm{mm.s^{-1}}$) au cours du temps. La tendance observée pour un béton silico-calcaire est similaire à celle d'un béton siliceux. Les résultats montrent la présence d'un pic de vitesse dans les premiers instants de l'ablation que l'on peut associer à la déstabilisation de la couche de béton fondu. La vitesse moyenne d'ablation décroît ensuite progressivement jusqu'à atteindre un régime quasi-permanent avec des valeurs de l'ordre de quelques dixièmes de millimètres par seconde. Les valeurs obtenues dans ce régime quasi-permanent sont légèrement plus importantes pour un béton siliceux. On se propose désormais de comparer ces résultats à l'un des modèles prédictifs de vitesse moyenne d'ablation proposé par Kerr [97] dans le cadre d'une étude sur le comportement des magmas basaltiques dans la croûte terrestre (*cf.* section (I.3.2) pour la dérivation). L'expression de cette vitesse moyenne d'ablation, notée $\mathcal{V}$, s'écrit

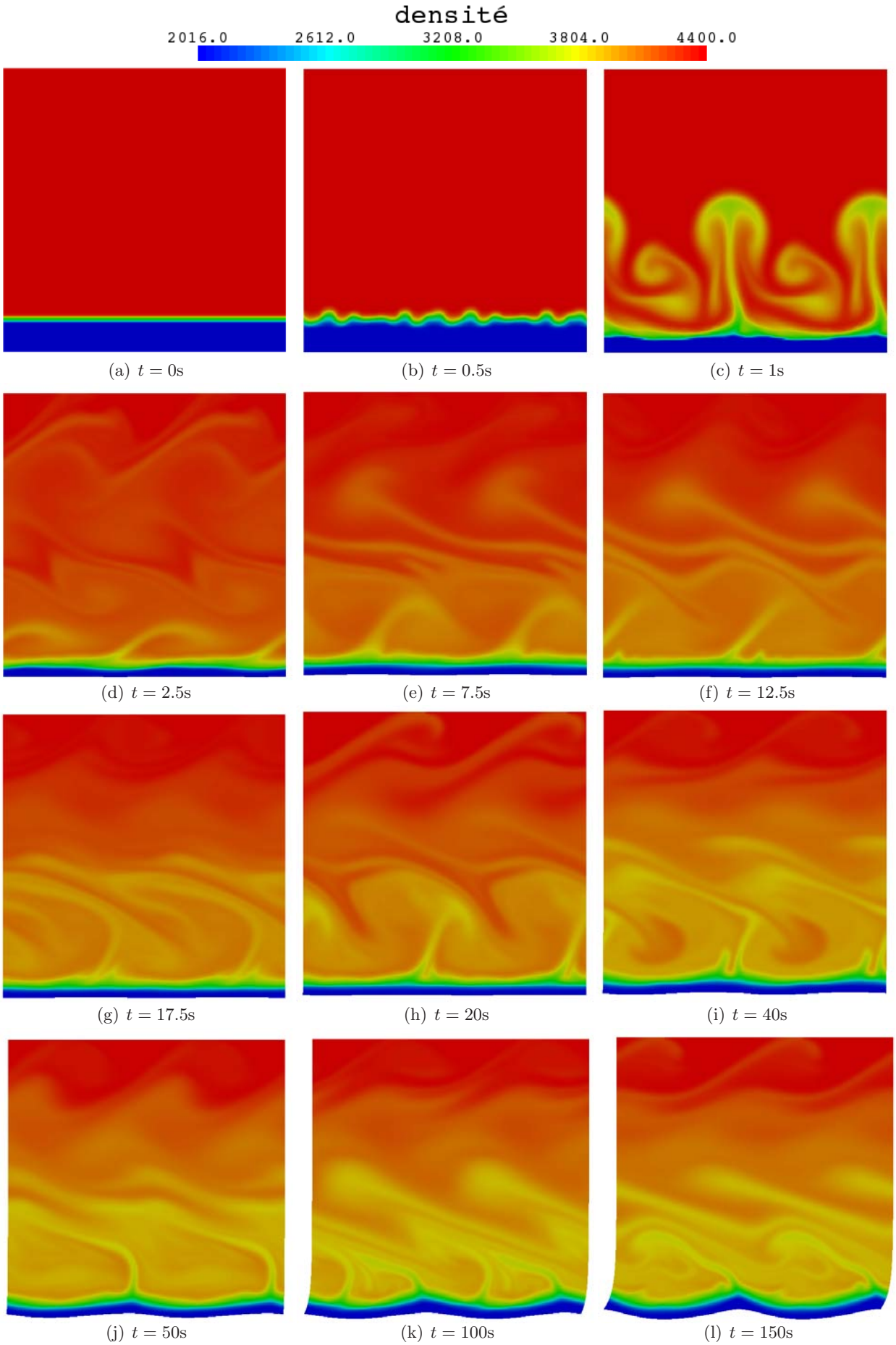
$$\mathcal{V} = A\left(\frac{g(\varrho_2-\varrho_3)\kappa_2^2}{P(\eta_2/\eta_3)\eta_3 \mathrm{St}^4}\right)\left(1+\frac{k_f}{1+k_m \mathrm{St}}\right)^{-1} \tag{IV.20}$$

où A, κ_2, $\mathrm{St} = \varrho_3 L/\varrho_2 C_{p_2}(T_2 - T_f)$ et $P(\eta_2/\eta_3)$ désignent respectivement une constante de proportionnalité, la diffusivité thermique du corium, le nombre de Stefan et une fonction dépendant du contraste de viscosité. La fonction P converge asymptotiquement vers la valeur 6.222 lorsque $\eta_2 \ll \eta_3$. La vitesse moyenne d'ablation définie par la relation (IV.20) est représentée sur la figure (IV.20). Dans le cas d'un béton silico-calcaire, on a $\mathcal{V} \simeq 1.46 \times 10^{-4}\mathrm{m.s^{-1}}$ avec une constante de proportionnalité $A = 0.825$. Par contre, pour un béton siliceux, on a $\mathcal{V} \simeq 1.65 \times 10^{-4}\mathrm{m.s^{-1}}$ avec une constante de proportionnalité $A = 0.775$. Ces résultats montrent que la relation (IV.20) constitue une très bonne approximation de la vitesse moyenne d'ablation dans le régime quasi-permanent précédemment décrit. A partir de cette vitesse moyenne d'ablation, Kerr [97] propose un estimateur pour l'épaisseur de couche de matériaux fondus h (*cf.* section (I.3.2) pour la dérivation). Cet

estimateur s'écrit

$$h \sim \sqrt{\frac{P\left(\eta_2/\eta_3\right)\mathcal{V}\eta_3}{g\left(\varrho_2-\varrho_3\right)}} \tag{IV.21}$$

A partir des valeurs de $\mathcal{V}$ précédemment obtenues, on obtient $h \sim 5.26$mm pour un béton silico-calcaire et $h \sim 18.5$mm pour un béton siliceux. Ces valeurs sont supérieures aux épaisseurs de couche de béton fondu obtenues par le calcul, à savoir 1.5mm pour un béton silico-calcaire et 2.75mm pour un béton siliceux.



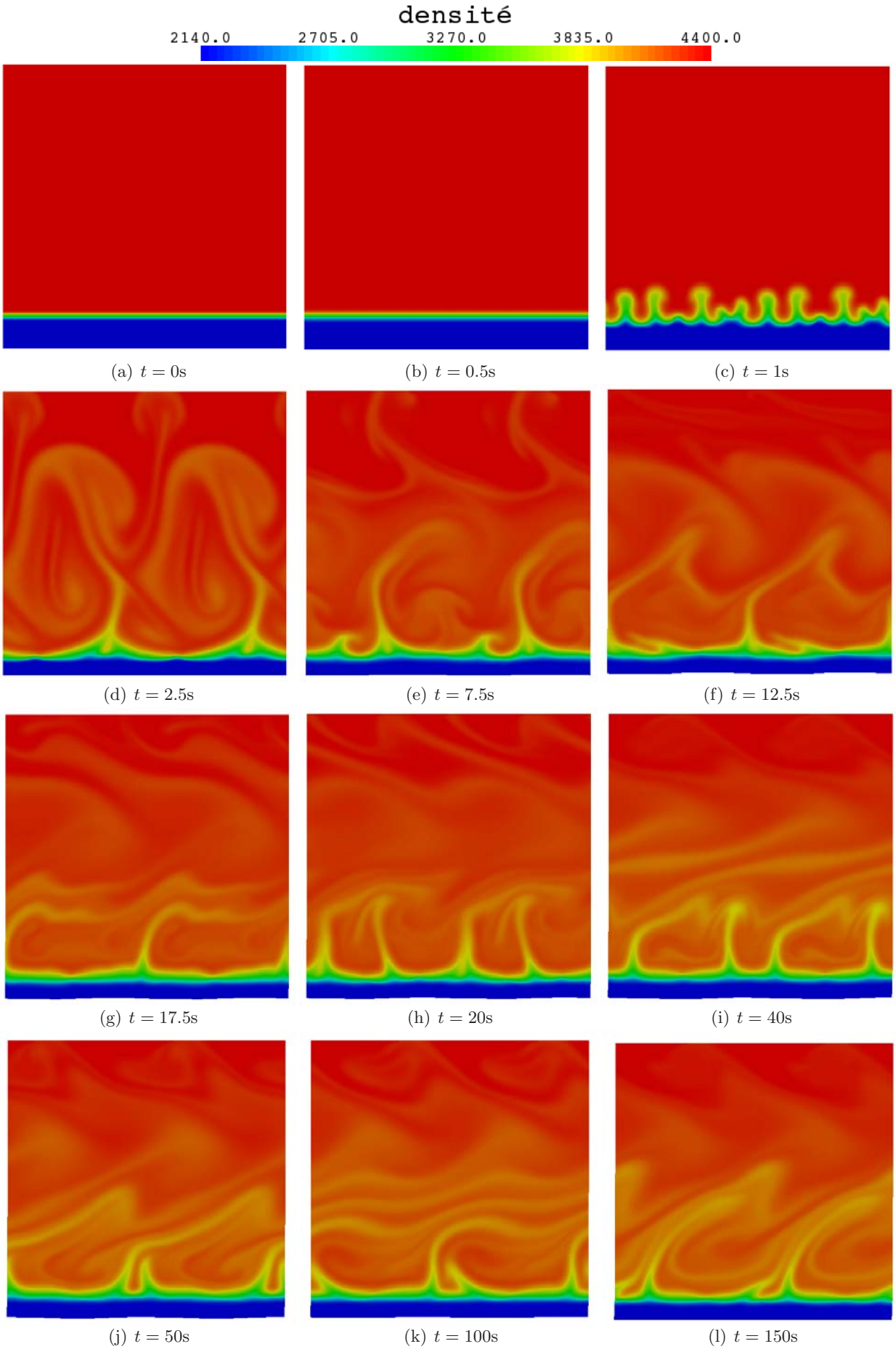
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.5$s (c) $t = 1$s

(d) $t = 2.5$s (e) $t = 7.5$s (f) $t = 12.5$s

(g) $t = 17.5$s (h) $t = 20$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 50$s (k) $t = 100$s (l) $t = 150$s

Fig. IV.13: Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$: cas $T_f = 1600$K, béton silico-calcaire.



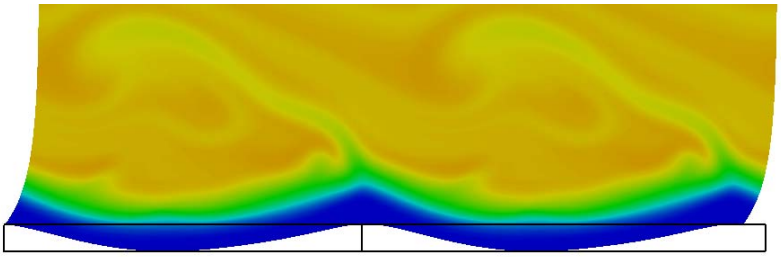
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.5$s (c) $t = 1$s

(d) $t = 2.5$s (e) $t = 7.5$s (f) $t = 12.5$s

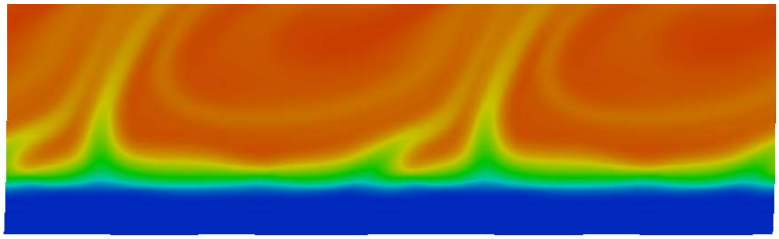
(g) $t = 17.5$s (h) $t = 20$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 50$s (k) $t = 100$s (l) $t = 150$s

Fig. IV.14: Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$: cas $T_f = 1600$K, béton siliceux.

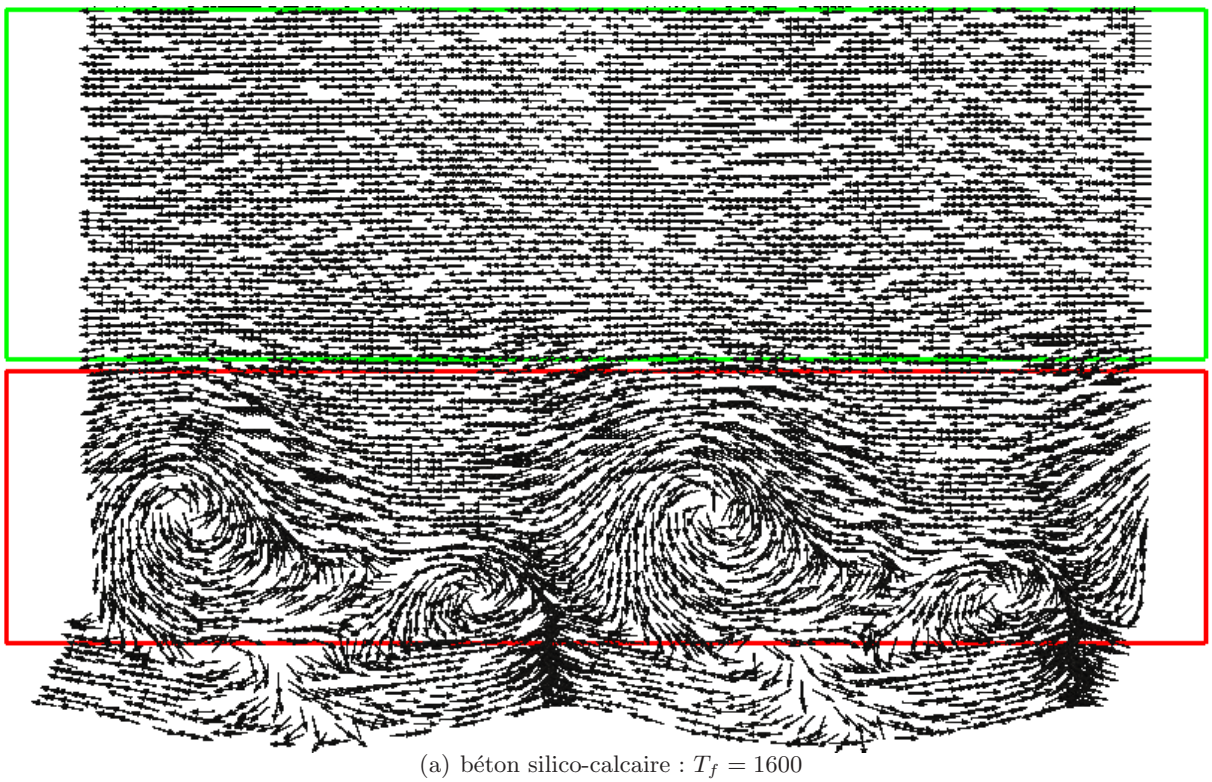


(a) béton silico-calcaire : $T_f = 1600$

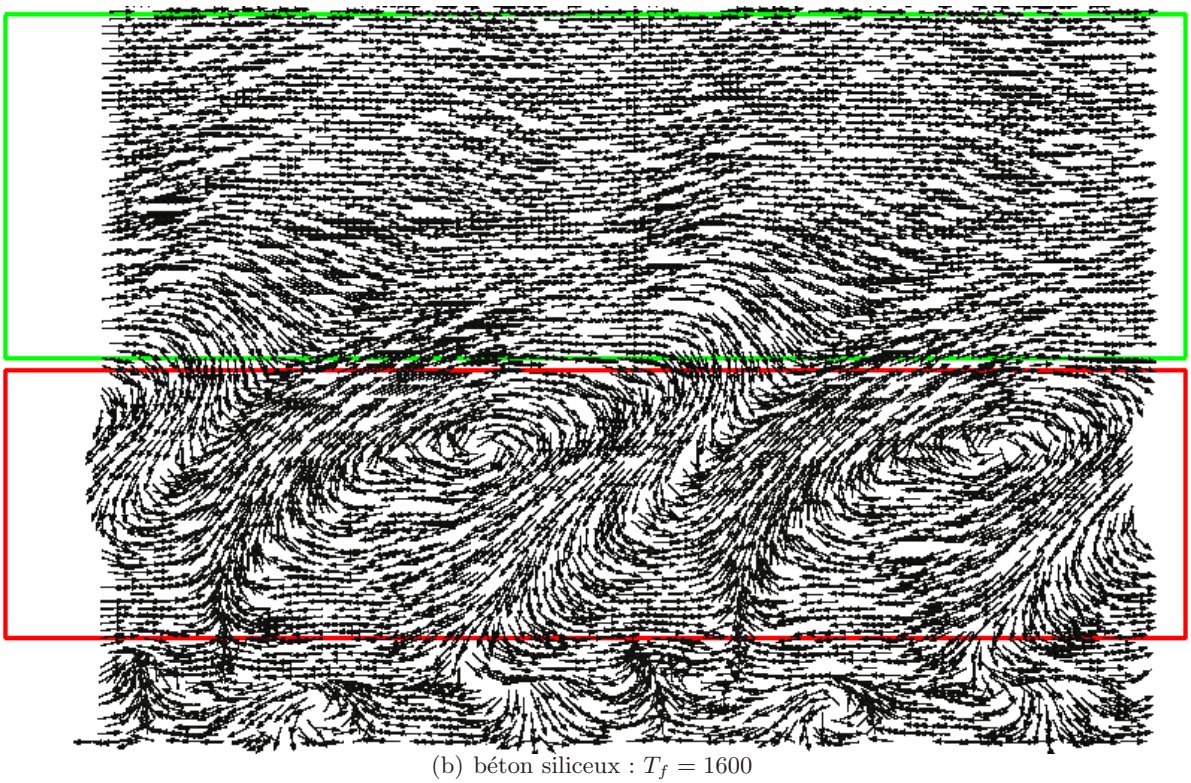


(b) béton siliceux : $T_f = 1600$

Fig. IV.15: Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 1600$K. Amplitude des rugosités à l'instant $t = 150$s pour un béton silico-calcaire (haut) et un béton siliceux (bas).

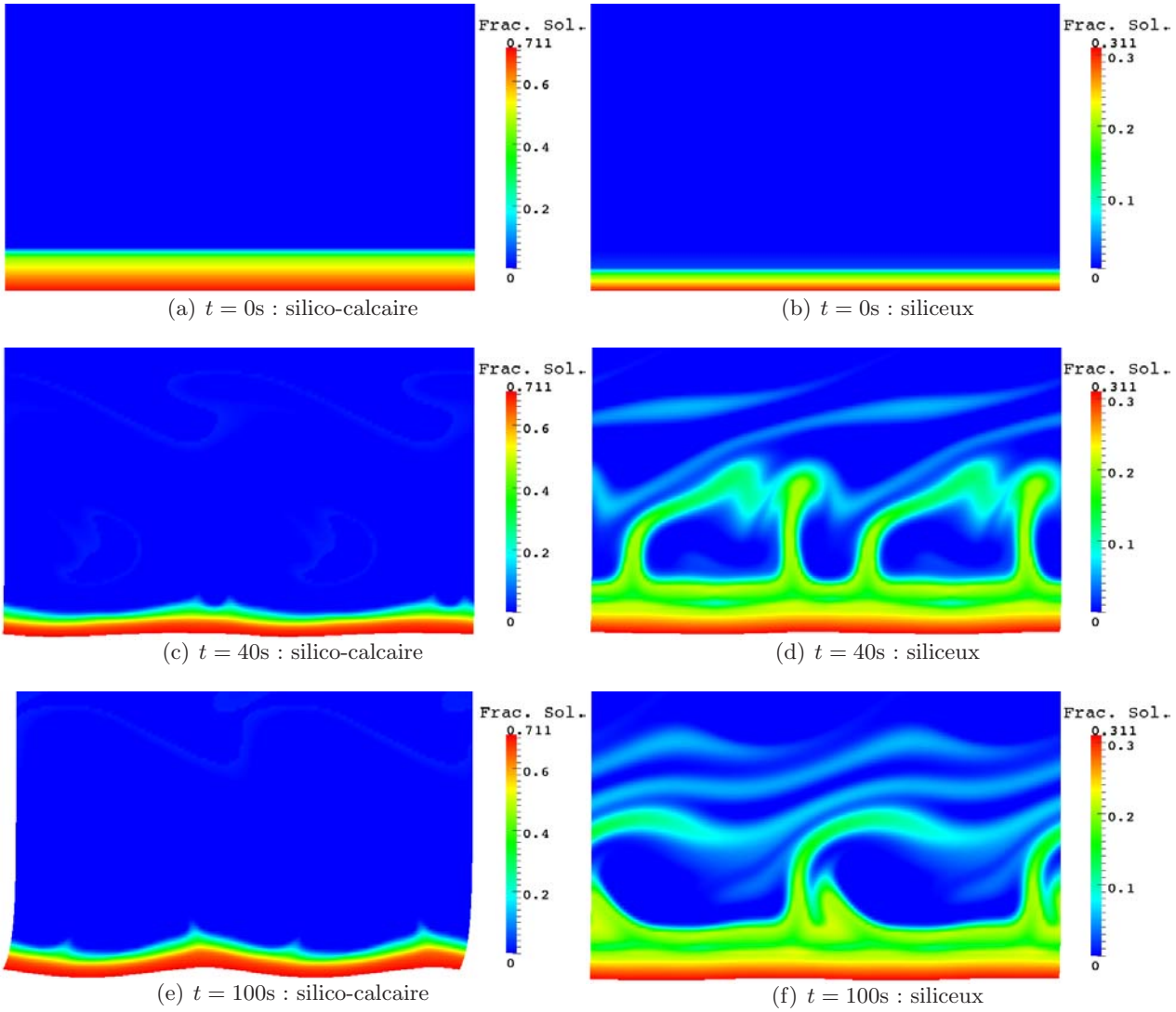


(a) béton silico-calcaire : $T_f = 1600$



(b) béton siliceux : $T_f = 1600$

Fig. IV.16: Champ de vitesse à l'instant $t = 150$s pour un béton silico-calcaire (haut) et un béton siliceux (bas)

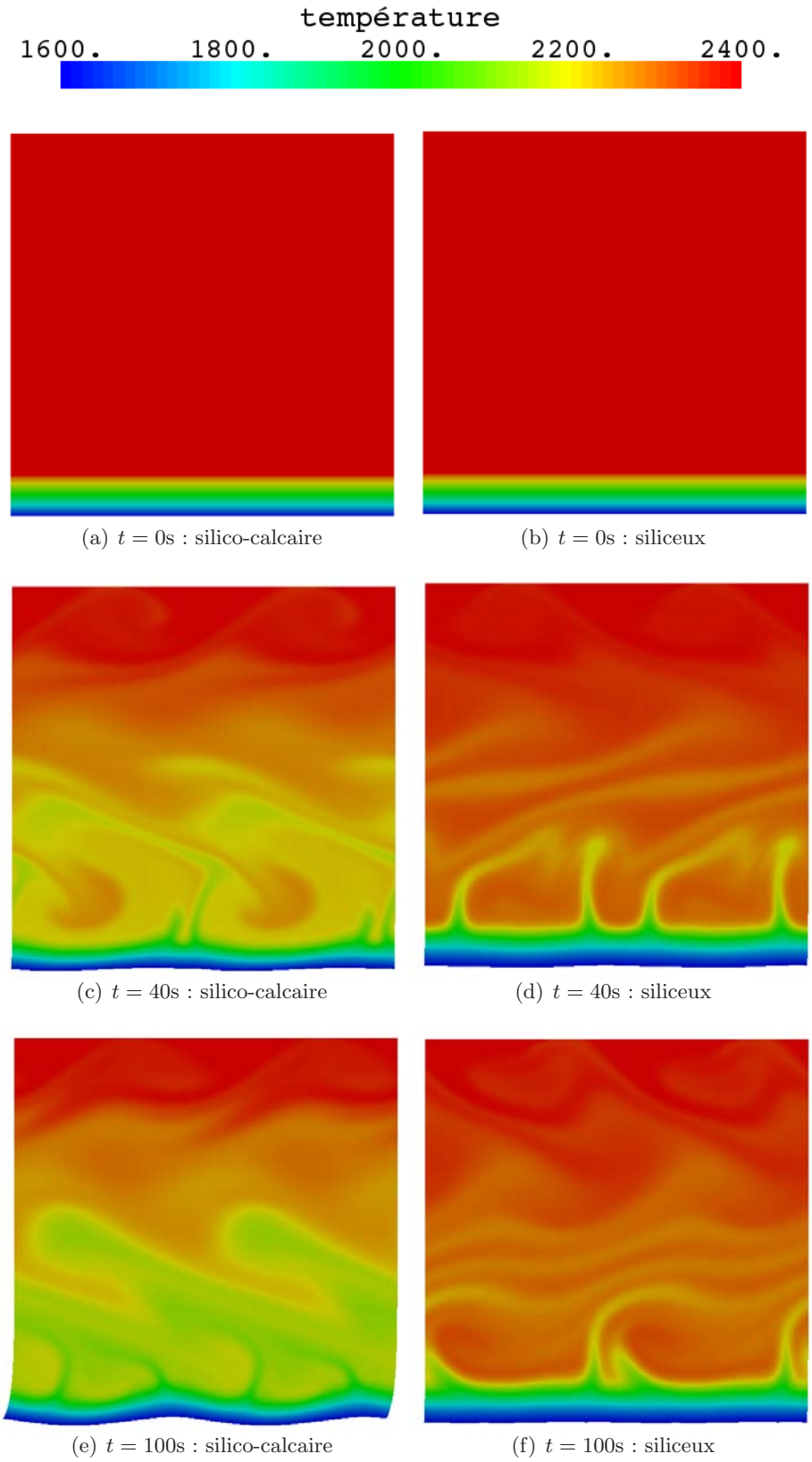


(a) $t = 0$s : silico-calcaire (b) $t = 0$s : siliceux

(c) $t = 40$s : silico-calcaire (d) $t = 40$s : siliceux

(e) $t = 100$s : silico-calcaire (f) $t = 100$s : siliceux

Fig. IV.17: Evolution de la fraction de solide Φ_{sol} aux instants $t = \{0\text{s}, 40\text{s}, 100\text{s}\}$ pour une température d'ablation $T_f = 1600$K dans le cas d'un béton silico-calcaire (gauche) et d'un béton siliceux (droite).

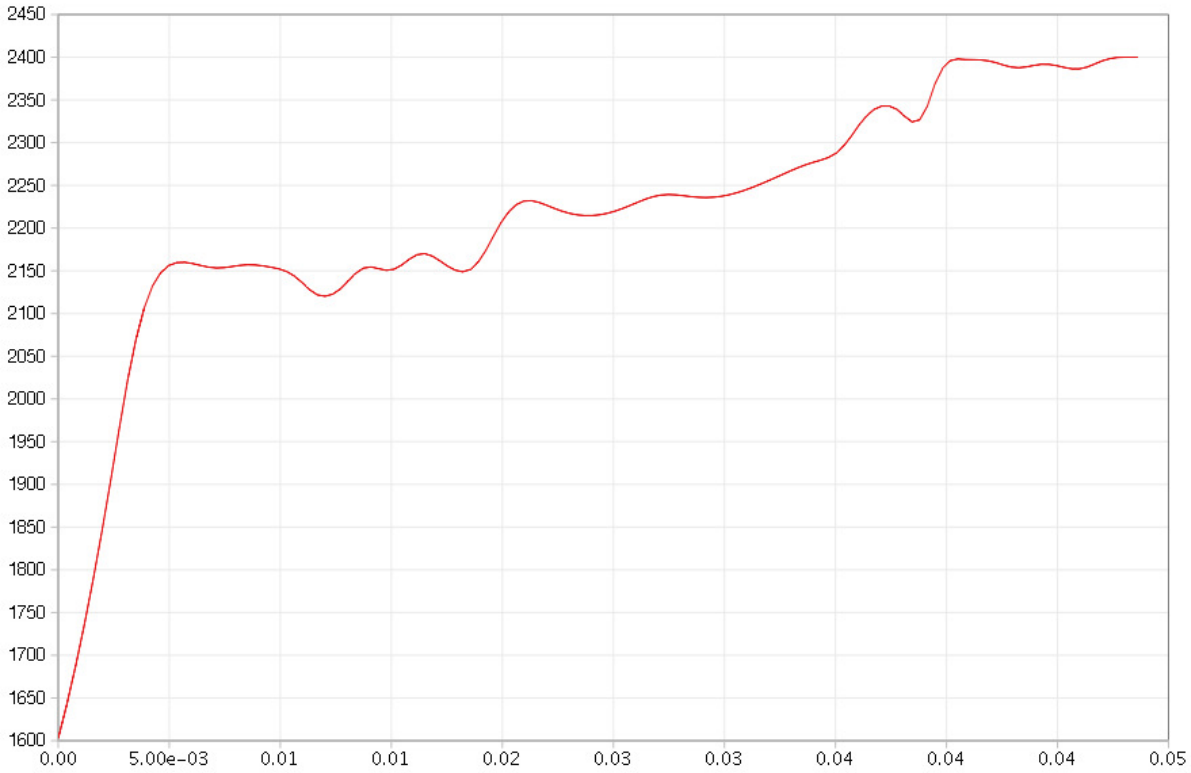


(a) $t = 0$s : silico-calcaire (b) $t = 0$s : siliceux

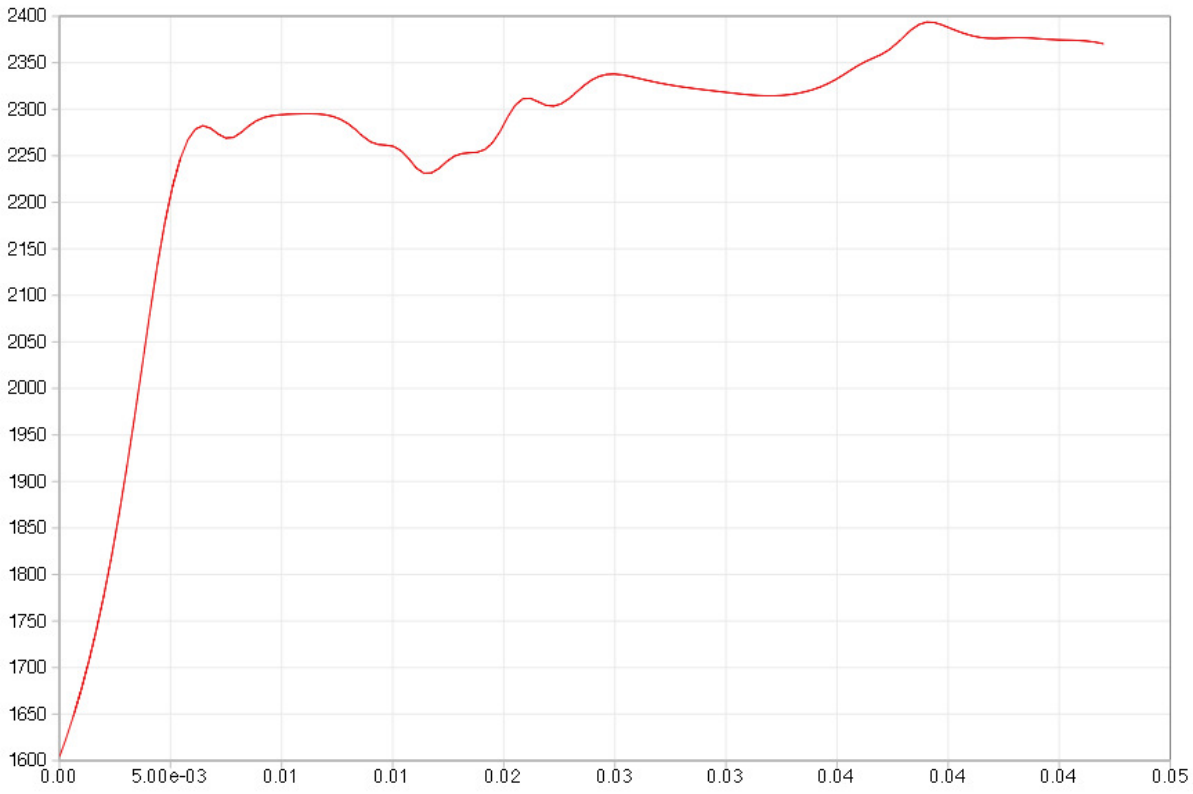
(c) $t = 40$s : silico-calcaire (d) $t = 40$s : siliceux

(e) $t = 100$s : silico-calcaire (f) $t = 100$s : siliceux

Fig. IV.18: Evolution de la température T aux instants $t = \{0\text{s}, 40\text{s}, 100\text{s}\}$ pour une température d'ablation $T_f = 1600$K dans le cas d'un béton silico-calcaire (gauche) et d'un béton siliceux (droite).



(a) béton silico-calcaire



(b) béton siliceux

Fig. IV.19: Profil de température (en K) suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150$s dans le cas d'un béton silico-calcaire (haut) et dans le cas d'un béton siliceux (bas) : $T_f = 1600$K

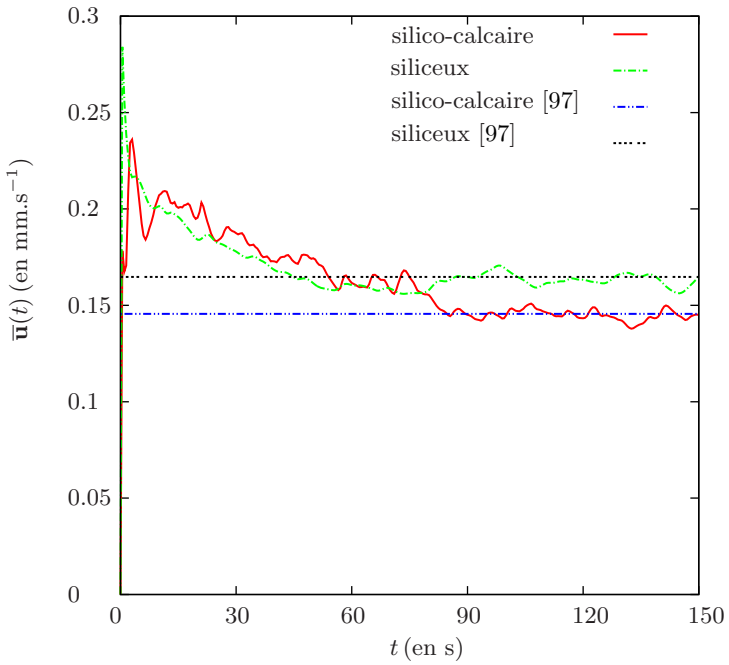


Fig. IV.20: Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) : $T_f = 1600$K

IV.1.3.b Cas II : température d'ablation $T_f = 1700$K

Cette partie est consacrée aux simulations numériques réalisées sur 150s avec une température d'ablation T_f égale à 1700K. A cette température, la fraction de solide présente dans le béton fondu Φ_{sol} est de 67% pour un béton silico-calcaire et de 26% pour un béton siliceux. D'après la relation (IV.16) la viscosité du béton fondu η_3 est de 249.96Pa.s dans le cas silico-calcaire et de 1204.39Pa.s dans le cas siliceux. Or, comme la viscosité du bain de corium η_2 à 2400K est de 15.2×10^{-3}Pa.s lorsqu'il est enrichi en béton silico-calcaire et de 22.6×10^{-3}Pa.s lorsqu'il est enrichi en béton siliceux, les contrastes de viscosité sont respectivement donnés par $\mathcal{R} = 16445$ dans le cas silico-calcaire et $\mathcal{R} = 53292$ dans le cas siliceux. Bien que l'augmentation de 100K de la température d'ablation ait entraîné une nette réduction du contraste de viscosité (*i.e.* $\mathcal{R}_{1600}/\mathcal{R}_{1700} \sim 6,12$ pour un béton siliceux et $\mathcal{R}_{1600}/\mathcal{R}_{1700} \sim 2,85$ pour un béton silico-calcaire), les valeurs obtenues restent néanmoins très importantes.

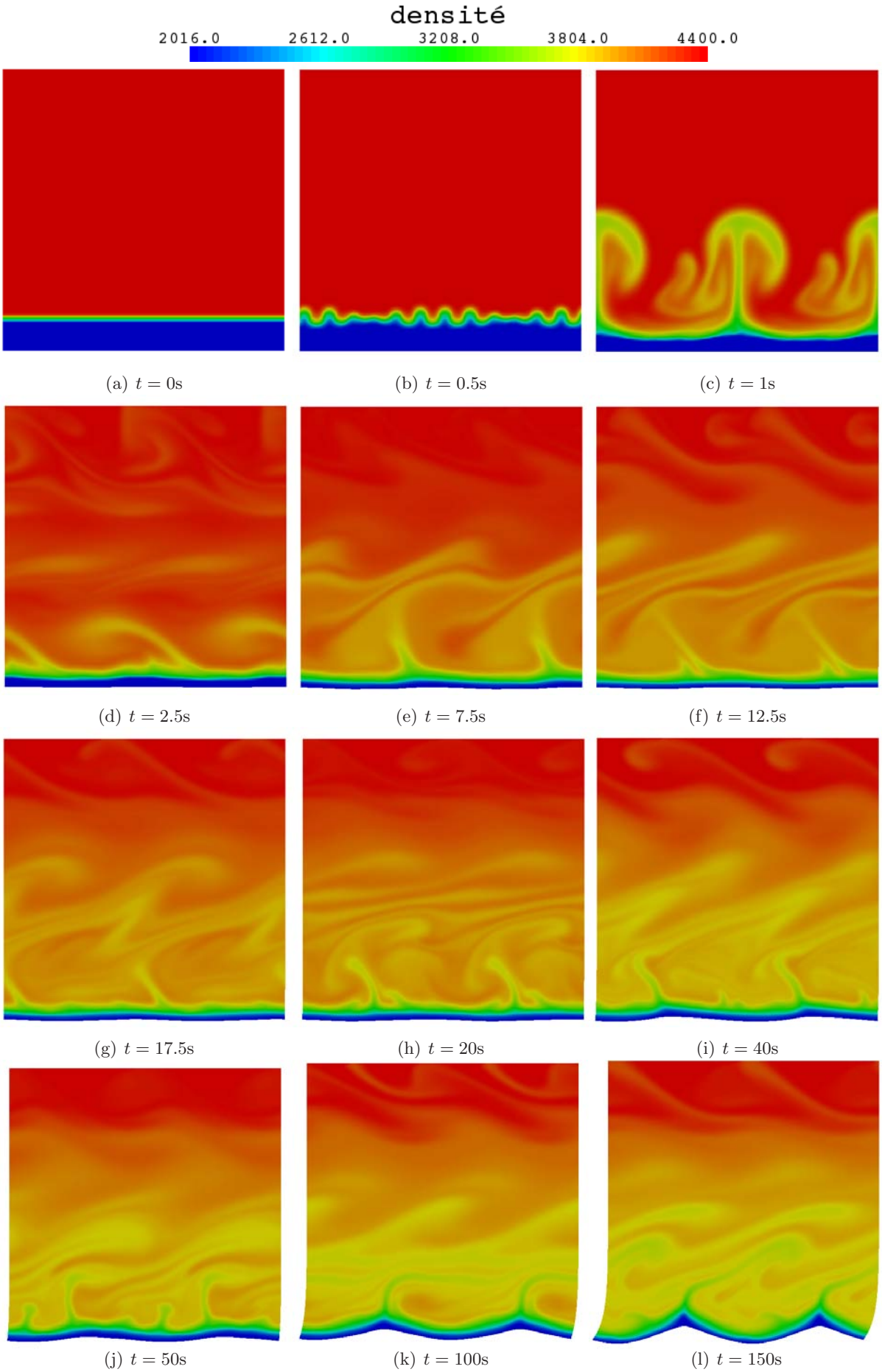
Les figures (IV.21) et (IV.22) montrent l'évolution de la densité du mélange à différents instants $t \in [0, 150\text{s}]$ pour les bétons silico-calcaire et siliceux. Les résultats montrent que la structure de l'écoulement à l'échelle du front d'ablation est similaire à celle précédemment décrite pour une température d'ablation de 1600K. Pour les deux types de bétons, on observe à nouveau quatre régions correspondant à la couche de béton fondu, une zone de mélange, une région avec d'importants mouvements convectifs caractérisés par des cellules de convection et un écoulement majoritairement transverse (*cf.* Fig.IV.24), et, enfin, une région principalement riche en corium. Bien que la tendance générale reste la même, il existe des points particuliers qui soulignent l'impact de l'augmentation de la température d'ablation ou de manière équivalente, la diminution du contraste de viscosité. Tout d'abord, comme le contraste de viscosité diminue, la couche de béton fondu devient moins stable. Cela se traduit par un amincissement de cette couche dont l'épaisseur observée au bout de 150s est de 2mm pour un béton siliceux et de 0.8mm pour béton fondu silico-calcaire. La quantité de matériaux fondus injecté dans le bain de corium est donc plus importante (*cf.* Fig.IV.21-Fig.IV.22 : *e.g.* (j)-(l)) ce qui contribue au mélange convectif tel que nous l'avons décrit dans la précédente étude (*cf.* Fig.IV.26). Concernant la température, la figure (IV.27) montre les profils de température effectués suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150$s. La tendance observée ici est similaire à celle obtenue avec $T_f = 1600$K. Les profils de température présentent essentiellement trois parties. La première partie correspond à une couche limite thermique d'une hauteur de l'ordre de 5mm et donc qui englobe la couche de béton fondu. Une seconde partie se distingue avec une augmentation progressive de température pour atteindre un plateau associé à la zone riche en corium et correspondant ici à la troisième partie.

La figure (IV.23) montre la structure de ces rugosités au bout de 150s dans le cas d'un béton silico-calcaire et siliceux. Les résultats montrent que l'augmentation de la température d'ablation a également pour effet d'augmenter la taille des rugosités sur le front d'ablation. L'amplitude observée au bout de 150s est de 3mm dans le cas silico-calcaire et de 0.85mm dans le cas siliceux.

En ce qui concerne la fraction de solide Φ_{sol}, les résultats présentés sur la figure (IV.26) montrent la même tendance que dans le cas précédent à $T_f = 1600$K (*cf.* Fig.IV.18) avec notamment, pour un béton siliceux, la présence d'une zone de transition dans laquelle la fraction de solide fluctue lorsque la température et la teneur en corium augmentent.

La figure (IV.28) présente l'évolution de la vitesse moyenne d'ablation au cours du temps pour un béton silico-calcaire et un béton siliceux. La tendance observée ici est similaire à celle de l'étude à $T_f = 1600$K. Les résultats montrent en effet un première étape dans laquelle la vitesse moyenne d'ablation augmente fortement lorsque la couche de béton fondu se déstabilise puis décroit progressivement pour atteindre un régime quasi-permanent avec des valeurs de l'ordre de quelques dixièmes de millimètres par seconde. La valeur de la vitesse moyenne d'ablation est à nouveau légèrement plus importante dans le cas d'un béton siliceux. Enfin, comme pour l'étude précédente, nous comparons les vitesses d'ablation calculées à la vitesse d'ablation estimée à partir

du modèle de Kerr [97]. Cette dernière, définie par la relation (IV.20), est représentée sur la figure (IV.36). Dans le cas d'un béton silico-calcaire, on a $\mathcal{V} \simeq 1.60 \times 10^{-4}\text{m.s}^{-1}$ avec une constante de proportionnalité $A = 0.8$. Dans le cas d'un béton siliceux, on a $\mathcal{V} \simeq 1.89 \times 10^{-4}\text{m.s}^{-1}$ avec une constante de proportionnalité $A = 0.6$. Comme dans l'étude précédente, les résultats montrent que la relation (IV.20) constitue une très bonne approximation de la vitesse moyenne d'ablation lorsque la vitesse moyenne calculée est dans un état quasi-permanent. Désormais, à partir de la relation (IV.21), on peut en déduire les estimations de l'épaisseur de couche de béton fondu. On a en effet $h \sim 3.26$mm pour un béton silico-calcaire et $h \sim 8$mm pour un béton siliceux. Comme précédemment, ces valeurs restent supérieures aux épaisseurs de couche de béton fondu calculées, à savoir 0.8mm pour un béton silico-calcaire et 2mm pour un béton siliceux.



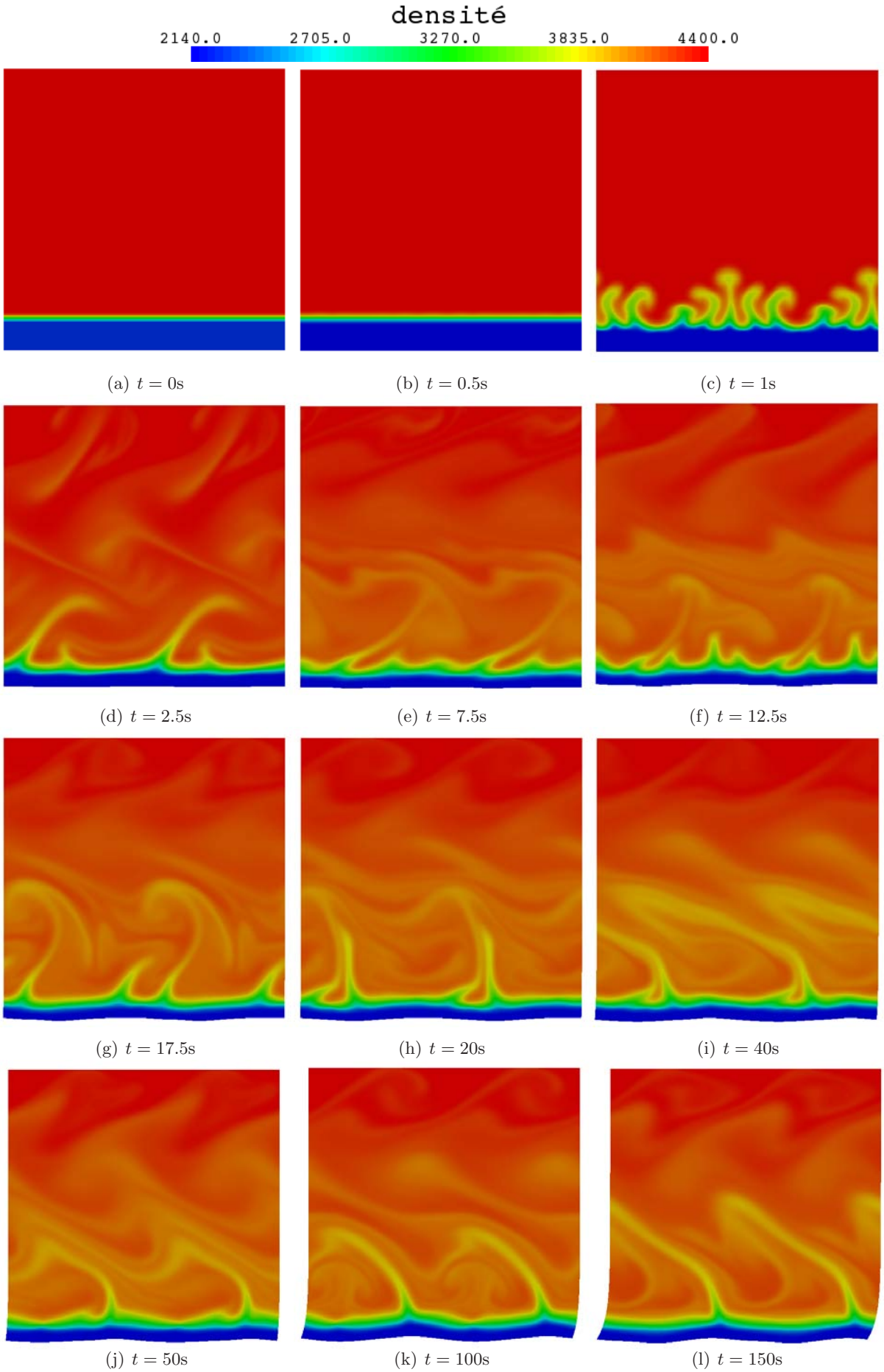
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.5$s (c) $t = 1$s

(d) $t = 2.5$s (e) $t = 7.5$s (f) $t = 12.5$s

(g) $t = 17.5$s (h) $t = 20$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 50$s (k) $t = 100$s (l) $t = 150$s

Fig. IV.21: Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton silico-calcaire.



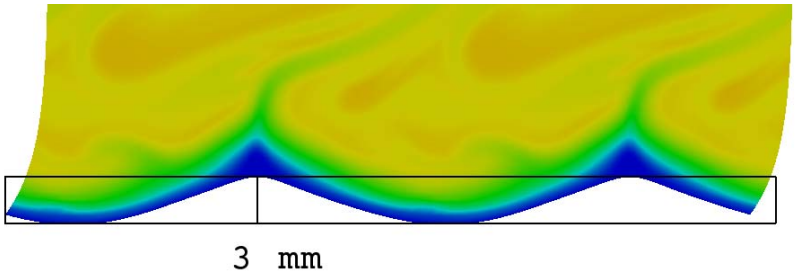
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.5$s (c) $t = 1$s

(d) $t = 2.5$s (e) $t = 7.5$s (f) $t = 12.5$s

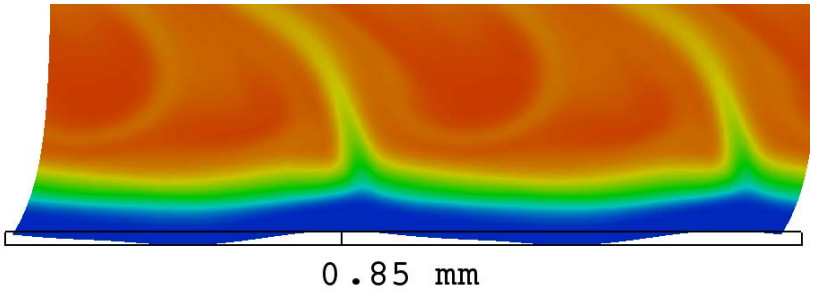
(g) $t = 17.5$s (h) $t = 20$s (i) $t = 40$s

(j) $t = 50$s (k) $t = 100$s (l) $t = 150$s

Fig. IV.22: Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton siliceux.

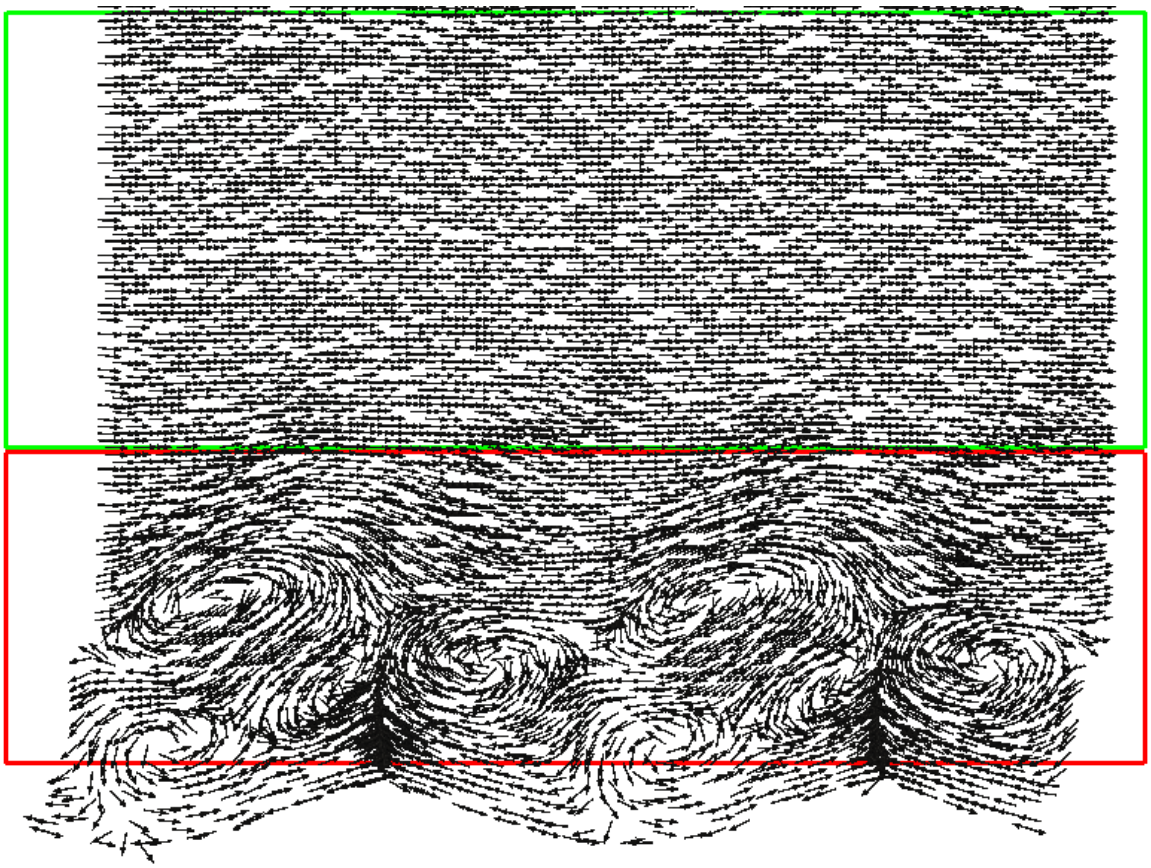


(a) béton silico-calcaire : $T_f = 1700$

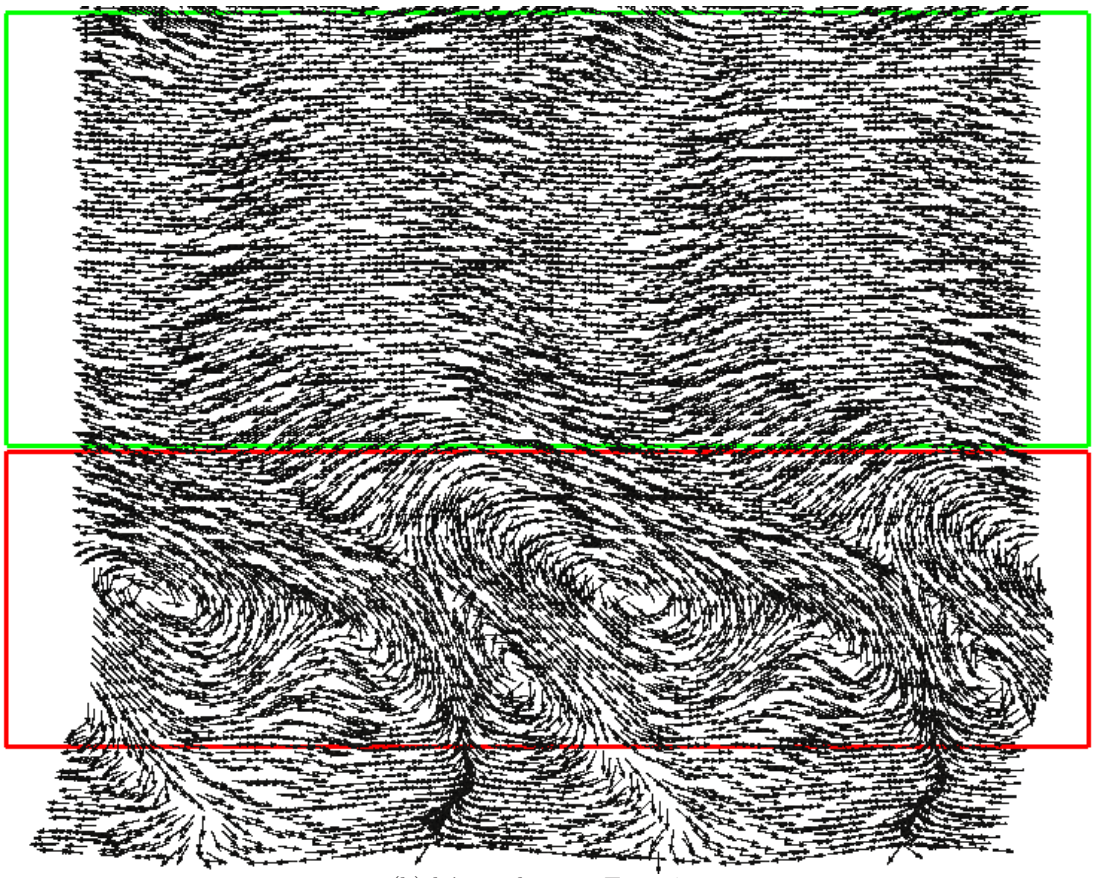


(b) béton siliceux : $T_f = 1700$

Fig. IV.23: Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 1700$K. Amplitude des rugosités à l'instant $t = 150$s pour un béton silico-calcaire (haut) et un béton siliceux (bas).

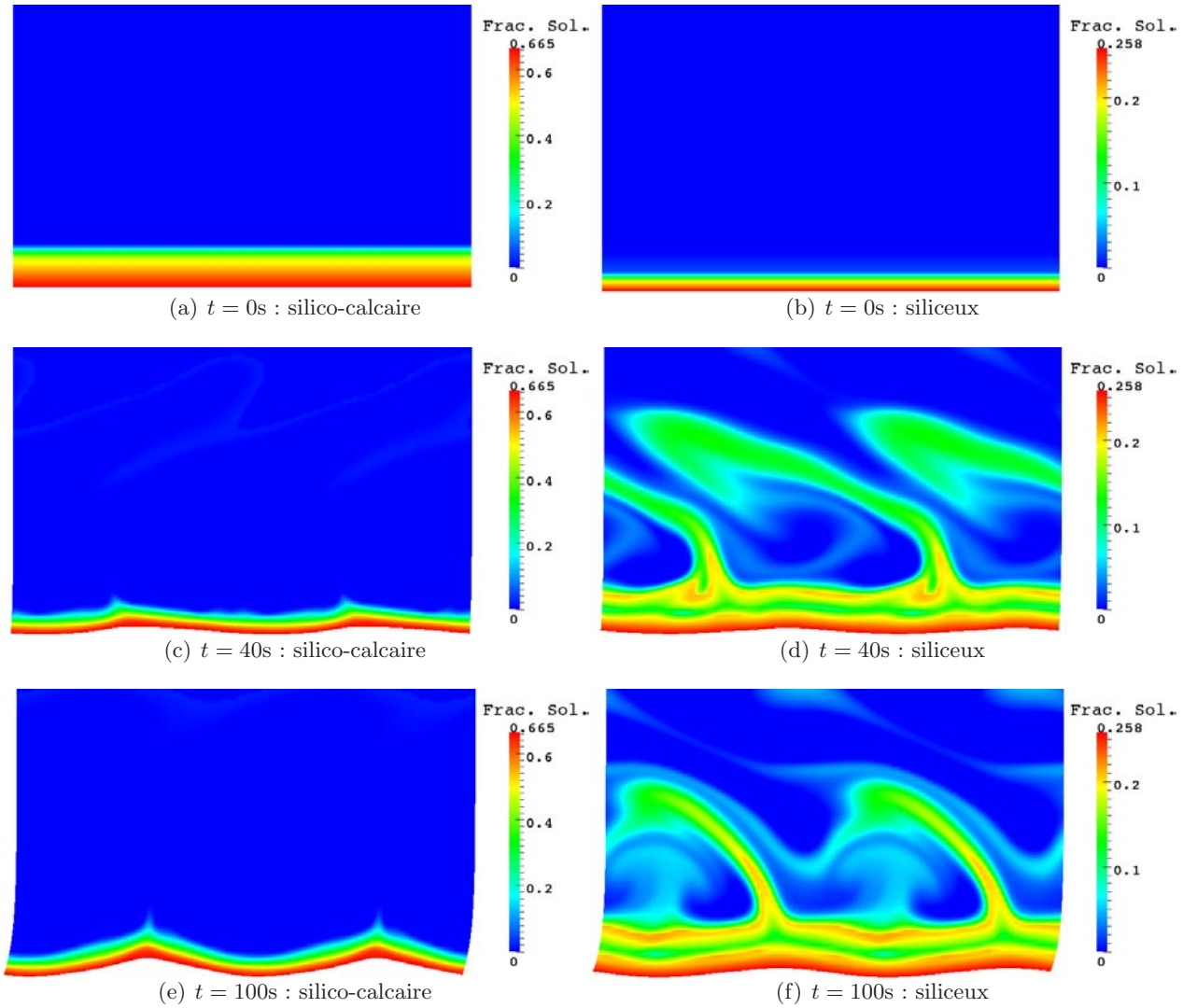


(a) béton silico-calcaire : $T_f = 1700$



(b) béton siliceux : $T_f = 1700$

Fig. IV.24: Champ de vitesse à l'instant $t = 150$s pour un béton silico-calcaire (haut) et un béton siliceux (bas)

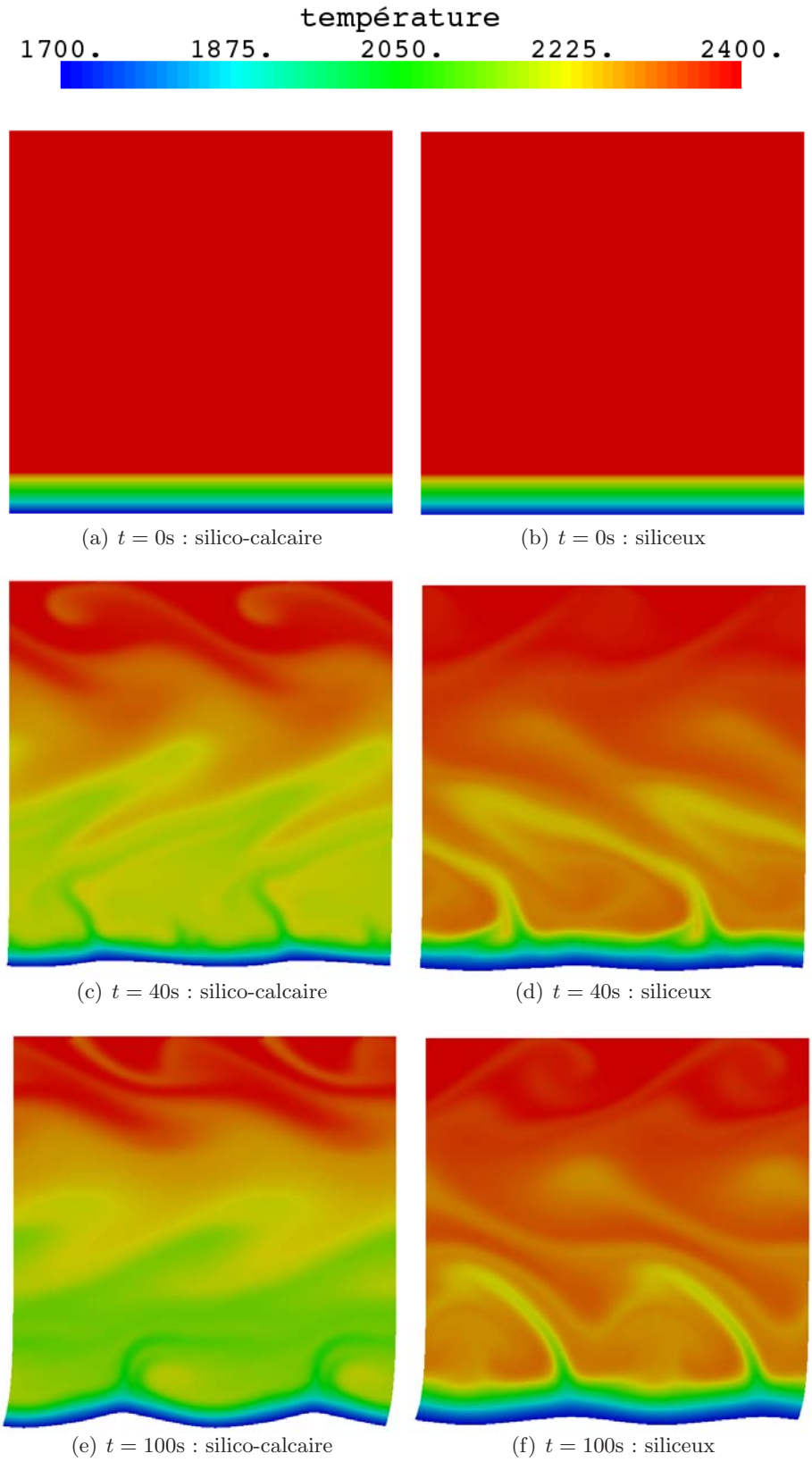


(a) $t = 0$s : silico-calcaire (b) $t = 0$s : siliceux

(c) $t = 40$s : silico-calcaire (d) $t = 40$s : siliceux

(e) $t = 100$s : silico-calcaire (f) $t = 100$s : siliceux

Fig. IV.25: Evolution de la fraction de solide Φ_{sol} aux instants $t = \{0\text{s}, 40\text{s}, 100\text{s}\}$ pour une température d'ablation $T_f = 1700$K dans le cas d'un béton silico-calcaire (gauche) et d'un béton siliceux (droite).



(a) $t = 0$s : silico-calcaire

(b) $t = 0$s : siliceux

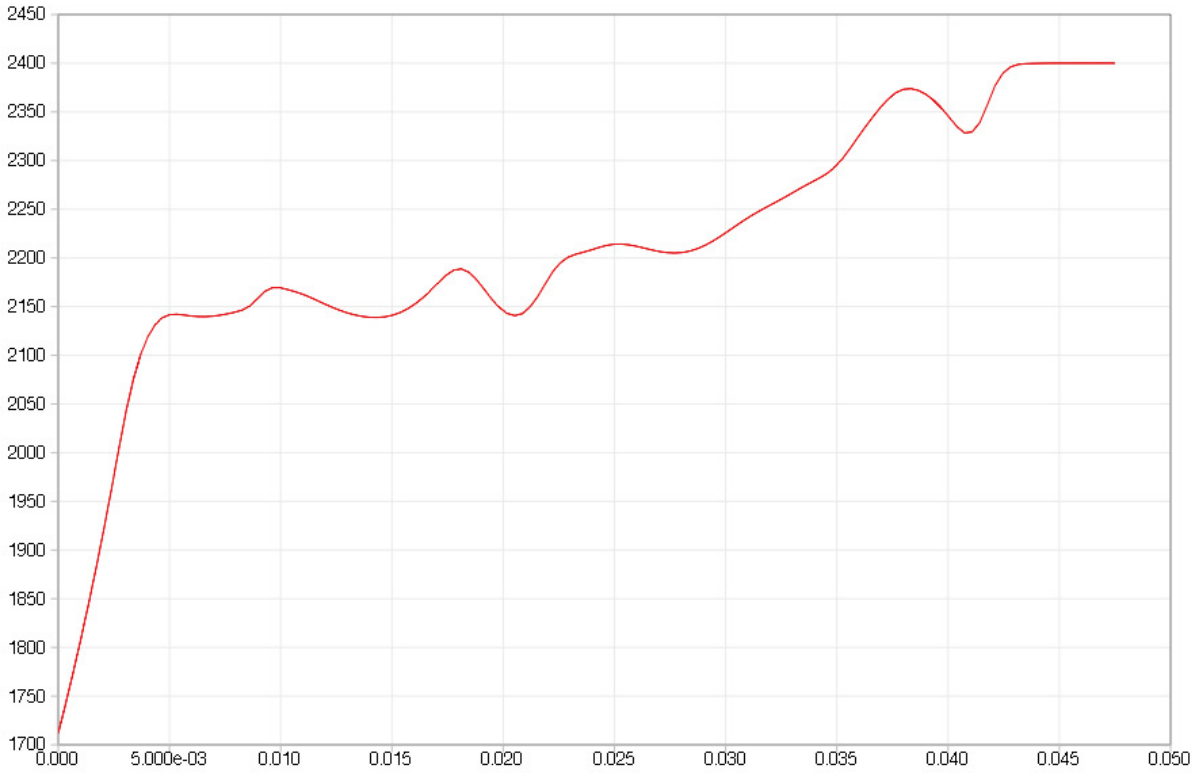
(c) $t = 40$s : silico-calcaire

(d) $t = 40$s : siliceux

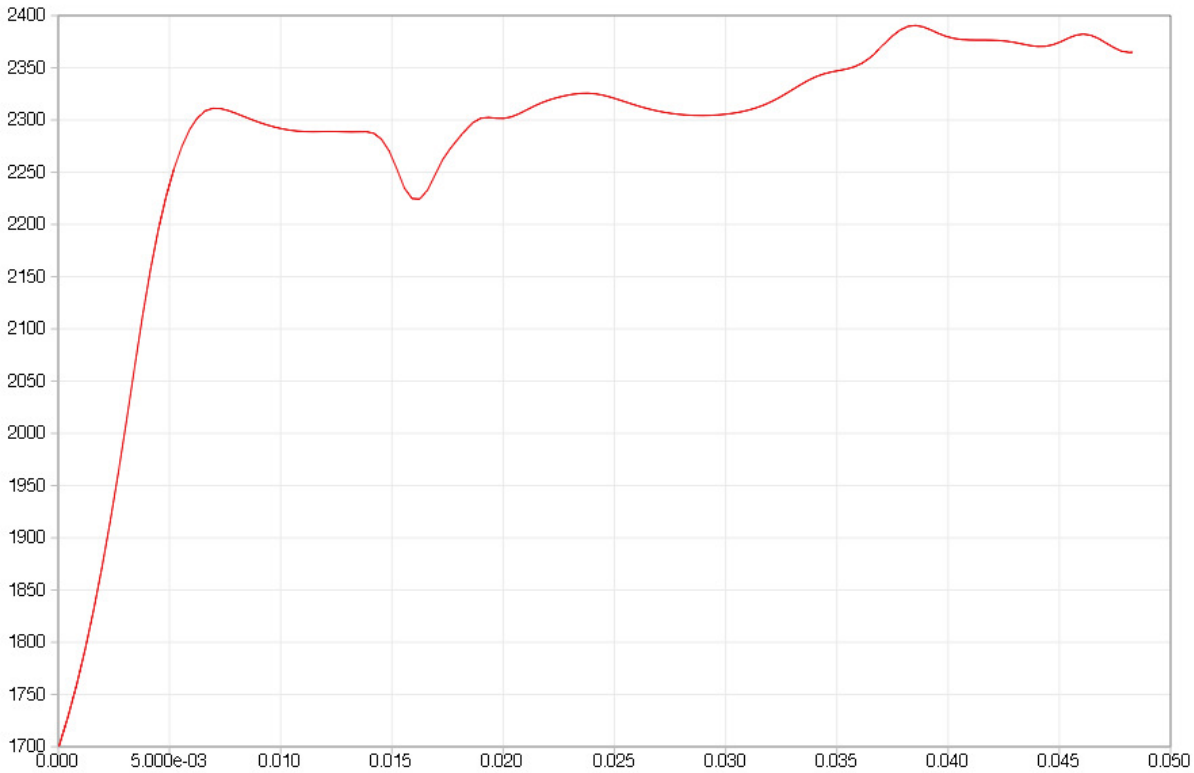
(e) $t = 100$s : silico-calcaire

(f) $t = 100$s : siliceux

Fig. IV.26: Evolution de la température T aux instants $t = \{0\text{s}, 40\text{s}, 100\text{s}\}$ pour une température d'ablation $T_f = 1700$K dans le cas d'un béton silico-calcaire (gauche) et d'un béton siliceux (droite).



(a) béton silico-calcaire



(b) béton siliceux

Fig. IV.27: Profil de température (en K) suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 150$s dans le cas d'un béton silico-calcaire (haut) et dans le cas d'un béton siliceux (bas) : $T_f = 1700$K

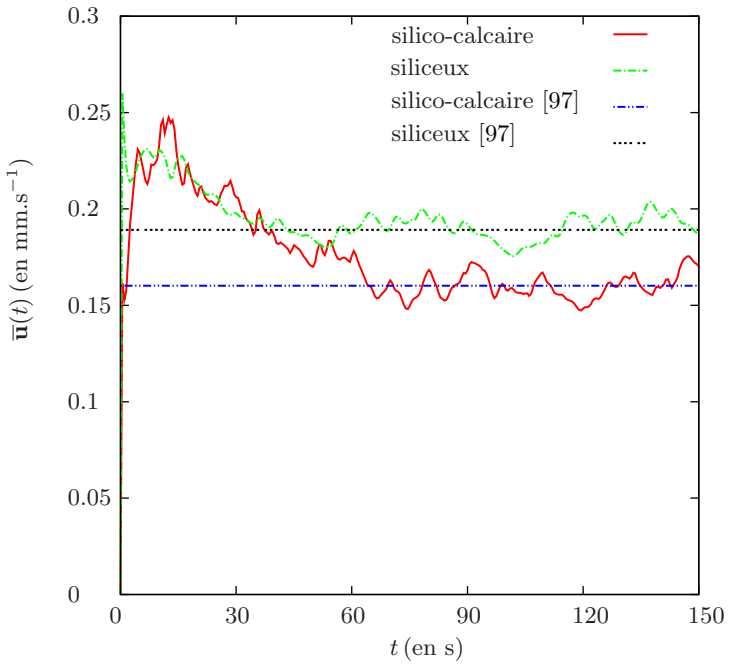


Fig. IV.28: Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) : $T_f = 1700$K

IV.1.3.c Cas III : température d'ablation $T_f = 2000$K

On présente ici les simulations numériques réalisées avec une température d'ablation T_f égale à 2000K. A cette température, la valeur de la fraction de solide Φ_{sol} est de 51% pour un béton silico-calcaire et de 1.5% pour un béton siliceux. Dans ces conditions, la valeur de la viscosité du béton silico-calcaire (*i.e.* $\eta_3 = 12.52$Pa.s) obtenue à partir de la relation (IV.16) devient supérieure à celle du béton siliceux (*i.e.* $\eta_3 = 4.89$Pa.s). De plus, la valeur des contrastes de viscosité diminuent mais restent néanmoins importantes avec $\mathcal{R} = 824$ dans le cas silico-calcaire et $\mathcal{R} = 216$ dans le cas siliceux.

Au cours des simulations numériques réalisées dans le cadre de cette étude, l'ablation du béton a entraîné une déformation conséquente du maillage (perte de convexité des éléments) provoquant l'arrêt prématuré des calculs. C'est pourquoi, le temps final des simulations numériques présentées ici est de 70s dans le cas d'un béton silico-calcaire et de 26s dans le cas d'un béton siliceux. Toutefois, comme les résultats obtenus sont satisfaisants, nous trouvons intéressant de les présenter et de les analyser.

Les figures (IV.29) et (IV.30) montrent l'évolution de la densité du mélange respectivement dans le cas d'un béton silico-calcaire et dans le cas d'un béton siliceux. Comme dans les deux précédentes études, la couche de béton fondu initialement présente se déstabilise rapidement, des instabilités de type Rayleigh-Taylor se développent et un mouvement convectif important prend place dans le bain de corium. On distingue à nouveau quatre régions comme celles décrites dans les deux précédentes études. Par contre, comme le contraste de viscosité est plus faible, la couche de béton fondu est moins stable et donc plus fine (*i.e.* 0.26mm dans le cas silico-calcaire et 0.35mm dans le cas siliceux). La quantité de béton fondu injectée dans le bain de corium est donc plus importante et le mélange convectif est d'autant plus intense (*cf.* Fig.IV.29 : *e.g.* (j)-(l) et Fig.IV.34).

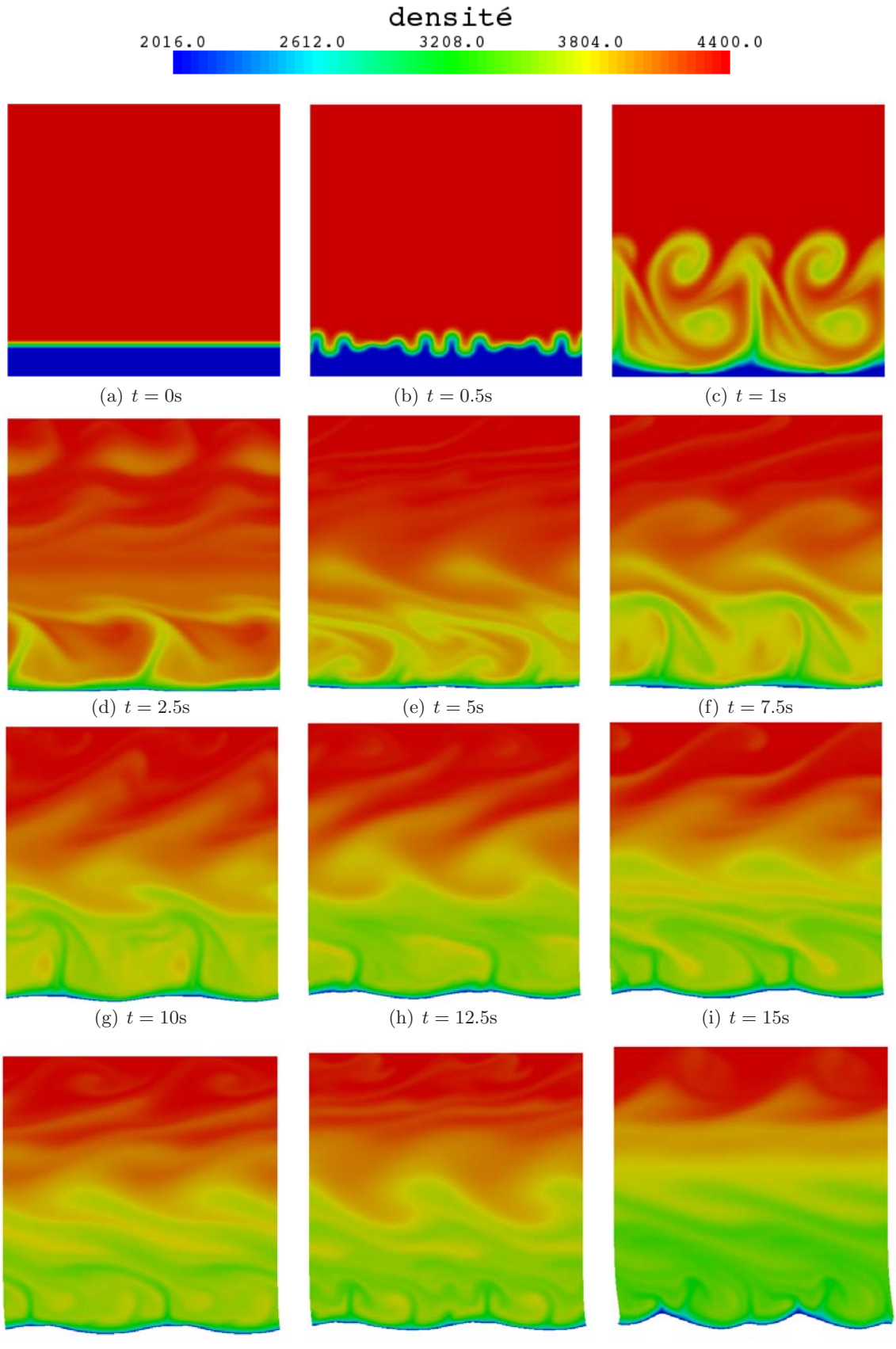
La figure (IV.32) présente le champ de vitesse dans le cas d'un béton silico-calcaire et dans le cas d'un béton siliceux. Comme pour les deux précédentes températures d'ablation, les résultats pour un béton silico-calcaire montrent la présence d'une première zone caractérisée par des cellules de convection et d'une seconde zone dans laquelle un écoulement majoritairement transverse et intense prend place (*cf.* Fig.IV.32). En revanche, pour un béton siliceux, bien que deux zones soient également présentes, l'écoulement au voisinage du front d'ablation n'a pas eu le temps de se mettre en place et il s'avère difficile d'observer des structures convectives cohérentes.

La figure (IV.35) montre les profils de température effectués suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant final. La tendance observée ici est similaire à celle obtenue dans les deux précédentes études. On observe que la hauteur de la couche limite thermique est plus faible pour cette température d'ablation. Il est néanmoins délicat de comparer ces profils de température avec ceux obtenus dans les deux précédentes études car les simulations numériques présentées ici ont été réalisées sur un temps plus court.

De plus, comme cela a été expliqué au début de cette partie, l'augmentation de la température d'ablation entraîne la formation de rugosités prononcées sur le front d'ablation. Les résultats présentés sur la figure (IV.31) montrent que l'amplitude de ces hétérogénéités est de 2.75mm dans le cas silico-calcaire et de 1.4mm dans le cas siliceux. La valeur de l'amplitude dans le cas silico-calcaire est plus faible que celle obtenue avec $T_f = 1700$K. On rappelle néanmoins que la valeur proposée dans cette étude a été obtenue pour un temps final plus faible. On peut donc s'attendre à une valeur plus élevée pour des temps de simulation plus longs. On remarque également que la période de ces rugosités est plus petite que celle observée dans les deux précédentes études.

La figure (IV.34) montre la distribution de la fraction de solide Φ_{sol} dans le mélange. Dans le cas d'un béton silico-calcaire, les résultats montrent, d'une part, que Φ_{sol} est maximale au front et, d'autre part, que la zone pâteuse s'amincit sensiblement au cours du temps. Dans le cas d'un béton siliceux, on observe la formation d'une zone pâteuse au dessus d'une zone quasi-liquide en raison d'une augmentation de la teneur en corium dans cette région.

La figure (IV.36) montre l'évolution de la vitesse d'ablation au cours du temps pour un béton siliceux et un béton silico-calcaire. La tendance observée pour un béton silico-calcaire est identique à celle des deux précédentes études. Par contre, les résultats obtenus dans le cas d'un béton siliceux sur seulement 26s ne permettent pas ici de conclure. L'évolution de la vitesse moyenne d'ablation calculée dans le cas d'un béton silico-calcaire est comparée à l'estimateur proposé par Kerr [97]. La valeur de cet estimateur défini par la relation (IV.20) est représentée sur la figure (IV.36). On a $\mathcal{V} \simeq 1.66 \times 10^{-4}\text{m.s}^{-1}$ avec une constante de proportionnalité $A = 0.6$. Cet estimateur constitue à nouveau une très bonne approximation de la vitesse moyenne d'ablation lorsque la vitesse moyenne calculée est dans un état quasi-permanent. A ce niveau, nous trouvons intéressant de remarquer que l'augmentation de la température d'ablation entraîne une diminution de la constante de proportionnalité A. Ces variations de la constante de proportionnalité ont été discutées par Kerr [97] dans un autre contexte. Une erreur dans le calcul de la vitesse moyenne d'ablation défini par (IV.19) ou encore une erreur dans les propriétés physiques des matériaux utilisés dans l'estimateur (IV.20) pourraient expliquer ce comportement. Cette dernière explication semble plausible car les valeurs utilisées ne tiennent pas compte du mélange. Enfin, l'épaisseur de couche de béton fondu estimée par la relation (IV.21) est de 0.74mm. Comme précédemment, cette valeur est supérieure à l'épaisseur de couche de béton fondu calculée de 0.26mm.



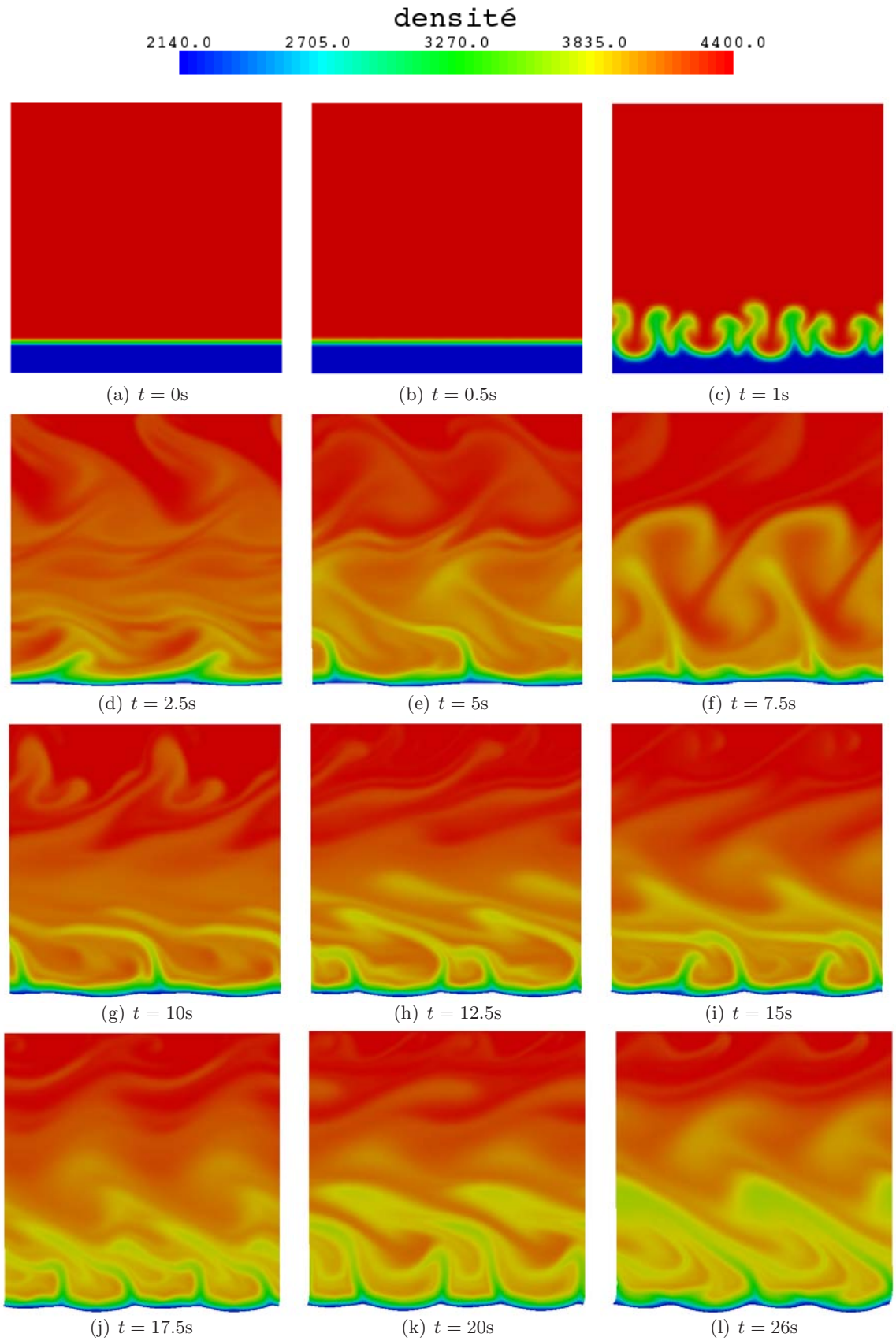
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.5$s (c) $t = 1$s

(d) $t = 2.5$s (e) $t = 5$s (f) $t = 7.5$s

(g) $t = 10$s (h) $t = 12.5$s (i) $t = 15$s

(j) $t = 17.5$s (k) $t = 20$s (l) $t = 70$s

Fig. IV.29: Evolution de la densité pour $t \in [0, 70\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton silico-calcaire.



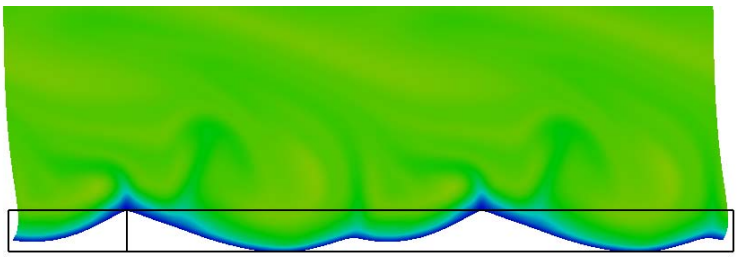
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.5$s (c) $t = 1$s

(d) $t = 2.5$s (e) $t = 5$s (f) $t = 7.5$s

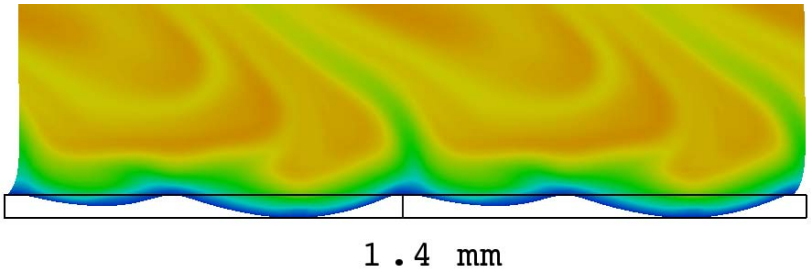
(g) $t = 10$s (h) $t = 12.5$s (i) $t = 15$s

(j) $t = 17.5$s (k) $t = 20$s (l) $t = 26$s

Fig. IV.30: Evolution de la densité pour $t \in [0, 26\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton siliceux.

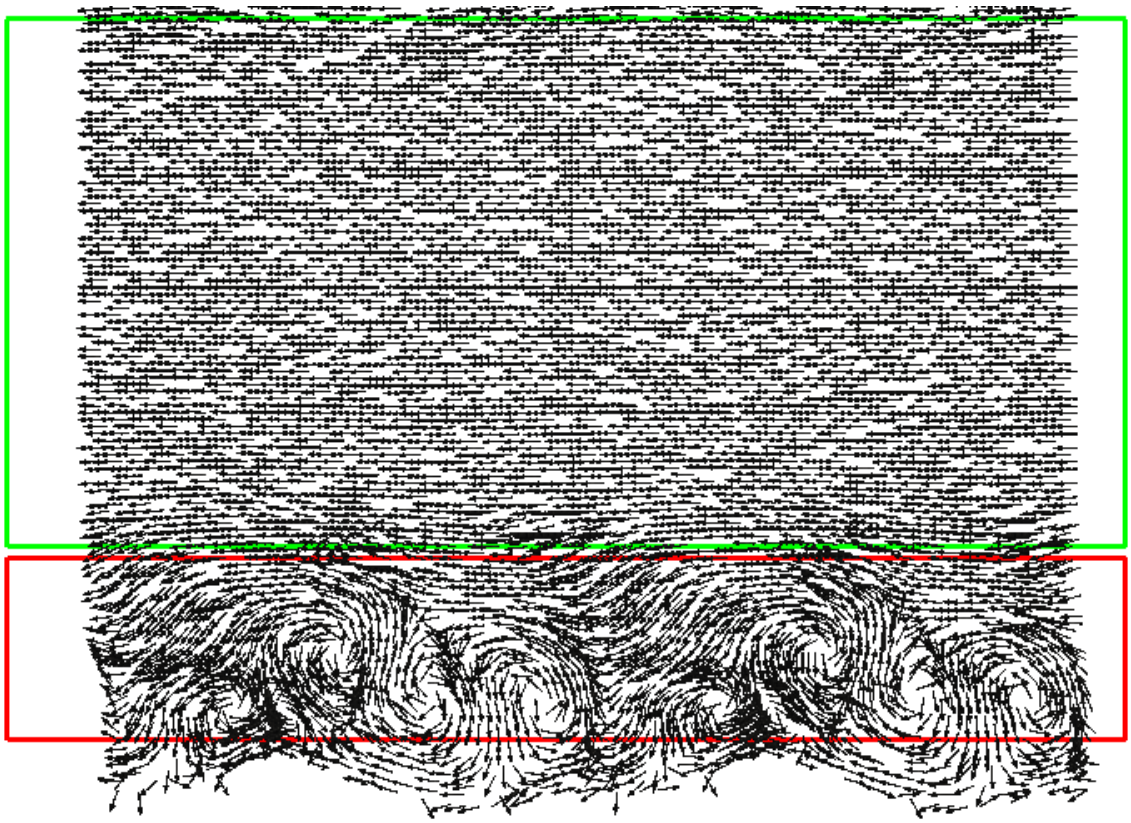


(a) béton silico-calcaire : $T_f = 2000$

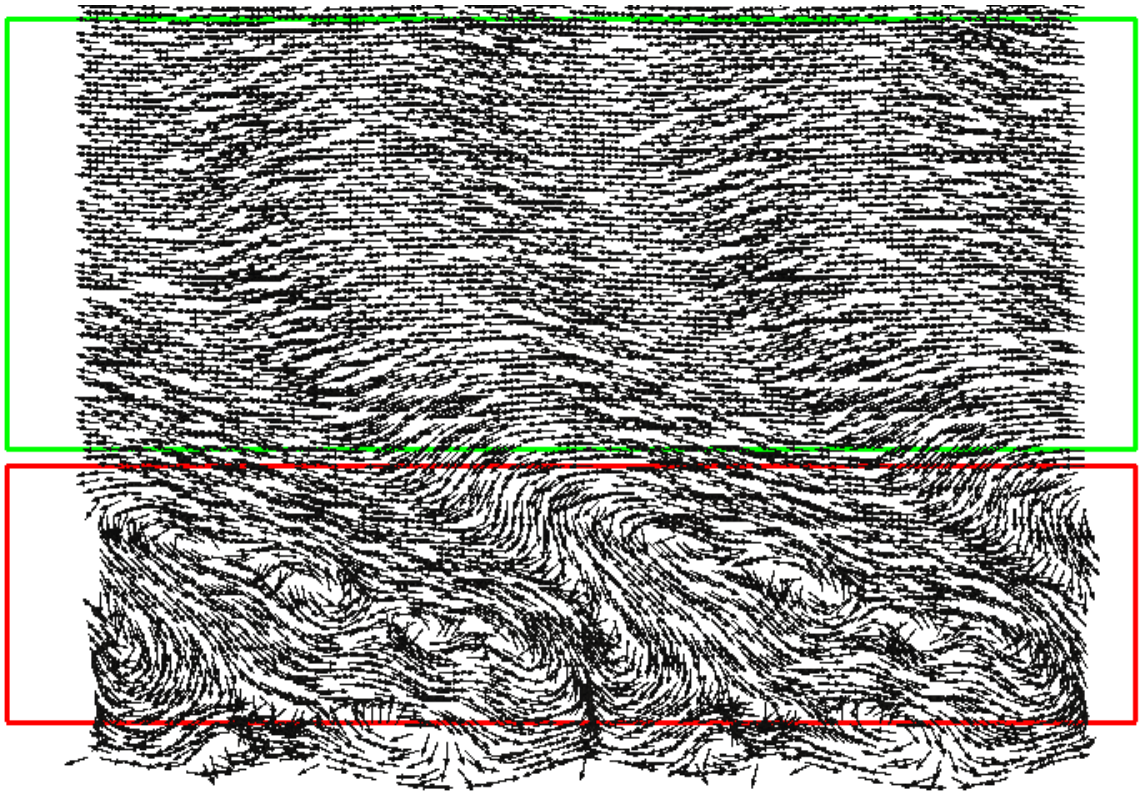


(b) béton siliceux : $T_f = 2000$

Fig. IV.31: Zoom au voisinage du front d'ablation lorsque $T_f = 2000$K. Amplitude des rugosités à l'instant $t = 70$s dans le cas d'un béton silico-calcaire (haut) et à l'instant $t = 26$s dans le cas d'un béton siliceux (bas).

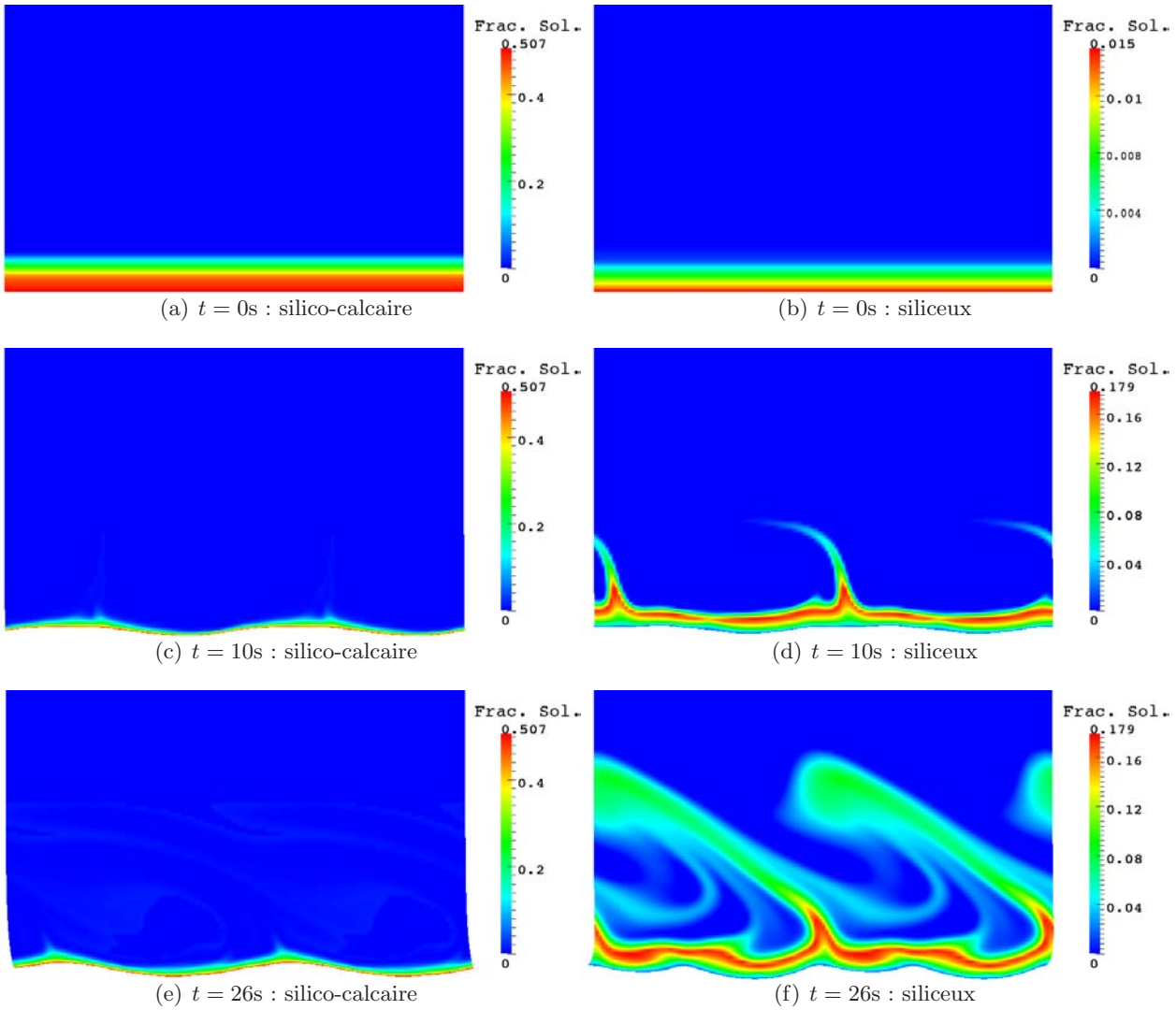


(a) béton silico-calcaire : $T_f = 2000$



(b) béton siliceux : $T_f = 2000$

Fig. IV.32: Champ de vitesse à l'instant $t = 70$s dans le cas d'un béton silico-calcaire (haut) et à l'instant $t = 26$s dans le cas d'un béton siliceux (bas).



(a) $t = 0$s : silico-calcaire

(b) $t = 0$s : siliceux

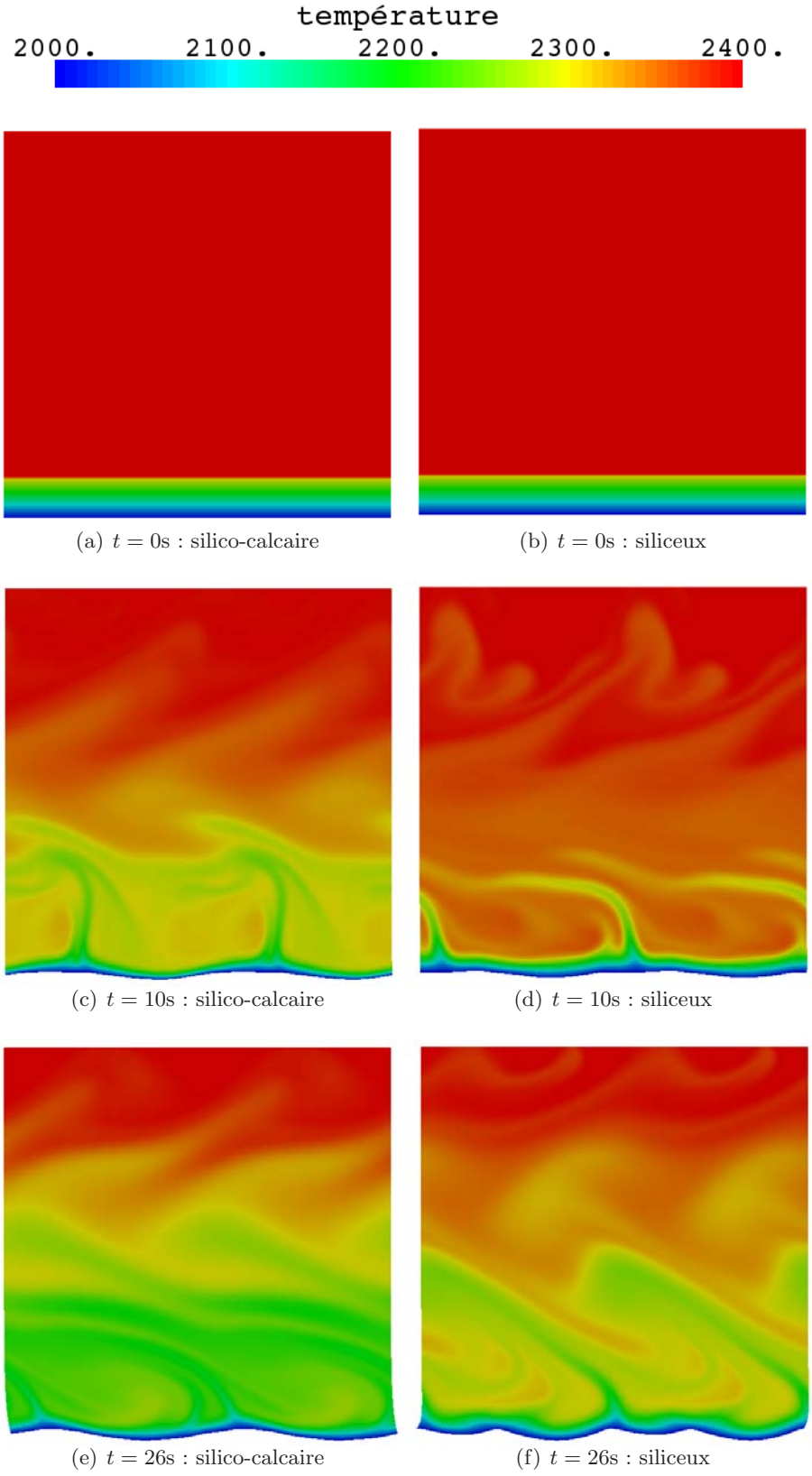
(c) $t = 10$s : silico-calcaire

(d) $t = 10$s : siliceux

(e) $t = 26$s : silico-calcaire

(f) $t = 26$s : siliceux

Fig. IV.33: Evolution de la fraction de solide Φ_{sol} aux instants $t = \{0\text{s}, 10\text{s}, 26\text{s}\}$ pour une température d'ablation $T_f = 2000$K dans le cas d'un béton silico-calcaire (gauche) et d'un béton siliceux (droite).

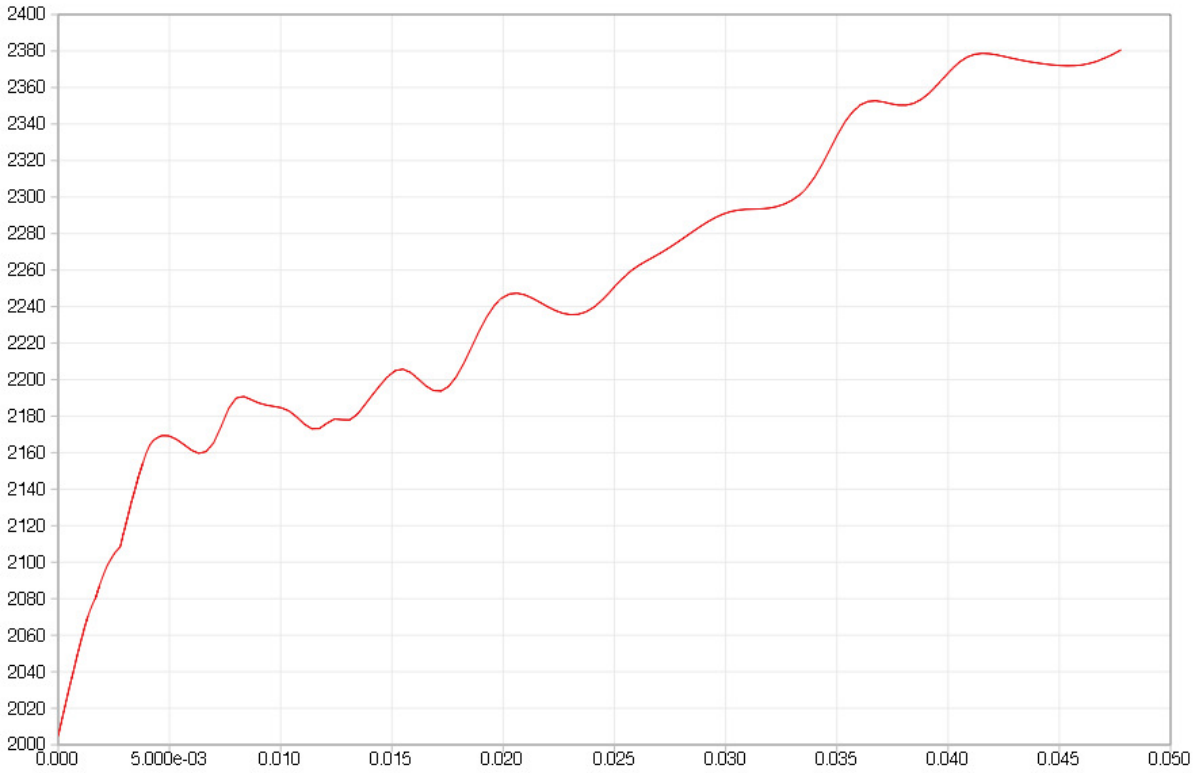


(a) $t = 0$s : silico-calcaire (b) $t = 0$s : siliceux

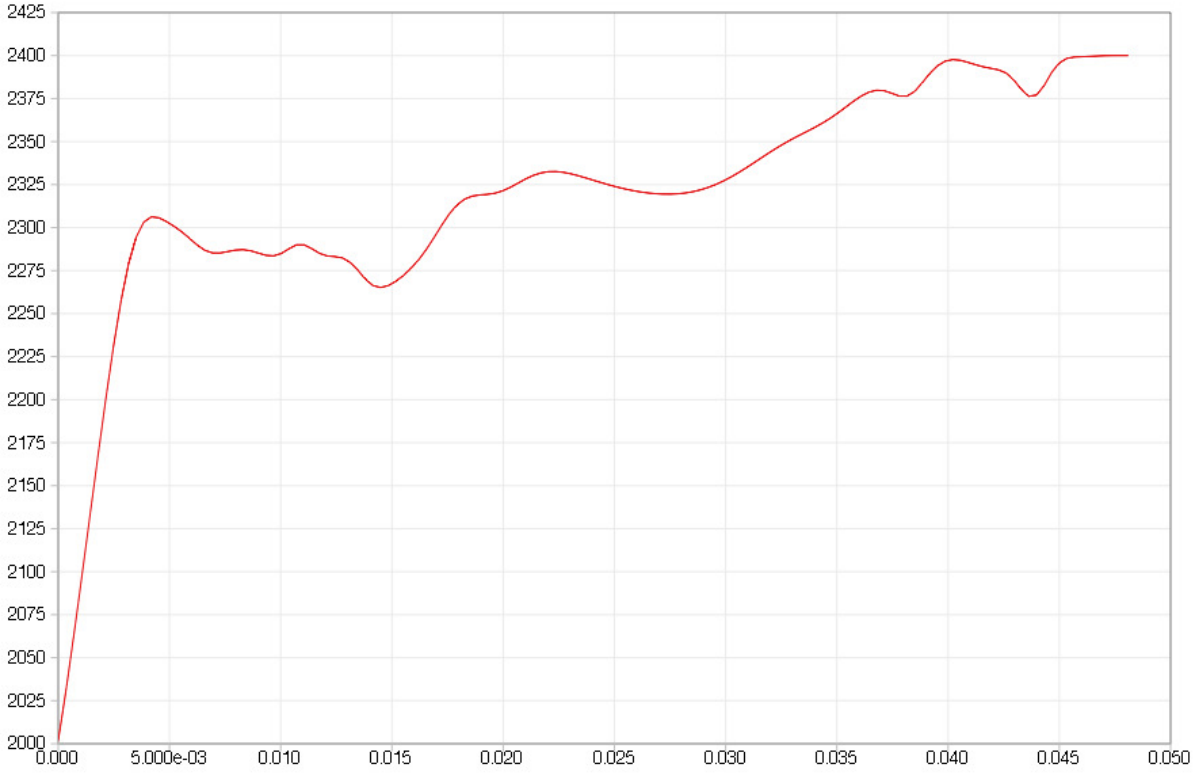
(c) $t = 10$s : silico-calcaire (d) $t = 10$s : siliceux

(e) $t = 26$s : silico-calcaire (f) $t = 26$s : siliceux

Fig. IV.34: Evolution de la température T aux instants $t = \{0\text{s}, 10\text{s}, 26\text{s}\}$ pour une température d'ablation $T_f = 2000$K dans le cas d'un béton silico-calcaire (gauche) et dans le cas d'un béton siliceux (droite).



(a) béton silico-calcaire



(b) béton siliceux

Fig. IV.35: Profil de température (en K) suivant l'axe (Oy) en $x = R/2$ à l'instant $t = 70$s dans le cas d'un béton silico-calcaire (haut) et à l'instant $t = 26$s dans le cas d'un béton siliceux (bas) : $T_f = 2000$K.

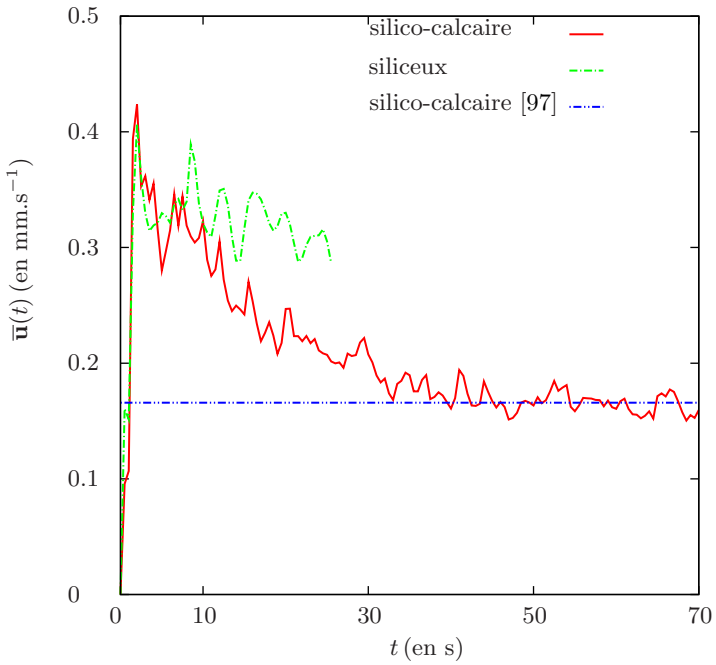


Fig. IV.36: Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) : $T_f = 2000$K.

IV.2 Cas diphasiques compositionnels

Dans la section précédente, nous avons présenté une étude numérique des effets compositionnels au voisinage du front d'ablation. Cette première étude a permis d'obtenir des informations qualitatives sur la structure locale de la couche limite telle que la hauteur de la couche de béton fondu, la vitesse moyenne d'ablation, la structure des rugosités ou encore la dynamique des panaches de béton fondu qui sont injectés dans le bain de corium. Dans la continuité de l'étude numérique menée dans le cas purement compositionnel, nous abordons ici les effets supplémentaires couplés liés au dégagement des gaz de décomposition du béton et nous étudions leur impact sur la structure de la couche limite. Même si les simulations présentées dans cette partie sont réalisées sur des temps courts comparativement à ceux présentés dans le cas purement compositionnel, principalement en raison de la limitation du pas de temps et des problèmes numériques rencontrés, les résultats proposés apportent une première contribution à la description de la structure de la couche limite.

Nous avons utilisé dans la section (IV.1) une condition de Stefan avec une méthode de type ALE pour décrire l'ablation du radier et suivre l'évolution en temps et en espace du front. Dans le cas diphasique compositionnel, l'utilisation d'une telle approche s'avère être délicate à cause notamment de la déformation des sites d'injection de gaz. C'est pourquoi, nous proposons ici, pour simplifier, une seconde approche qui consiste à réaliser des simulations dans le repère lié au front d'ablation (*i.e.* sans déformation du maillage) et à décrire le comportement moyen de l'ablation selon une vitesse d'injection de béton fondu correspondant à une moyenne de la vitesse de Stefan. La présentation de cette approche fait l'objet de la première partie de cette section (*cf.* section (IV.2.1)) où on présente également une comparaison avec les résultats obtenus précédemment dans le cadre d'une méthode ALE.

L'étude des effets liés au dégagement des gaz de décomposition du béton couplés aux phénomènes compositionnels fait l'objet de la seconde partie. Cette étude est dirigée suivant deux axes :

1. Le premier axe (*cf.* (IV.2.2)) s'inscrit directement dans la continuité de l'étude menée dans le cas purement compositionnel (*cf.* section (IV.1)) puisqu'il concerne l'étude de l'impact de la température d'ablation T_f sur la dynamique de l'écoulement et la structure de la couche limite. Nous choisissons ici deux des trois températures d'ablation considérées dans la section (IV.1), à savoir $T_f = 1700$K et $T_f = 2000$K, et nous réalisons des simulations numériques pour une distribution donnée des sites de relâchement de gaz.

2. Le deuxième axe (*cf.* (IV.2.3)) concerne l'étude de l'impact de la distance entre les sites de relâchement de gaz sur la structure du mélange. Nous avons en effet indiqué dans l'introduction générale que la distribution des sites de relâchement dépendait non seulement du type de béton mais aussi des fractures naturelles ou induites au cours de l'interaction. A notre connaissance, les données proposées par Epstein [53] constituent l'unique référence sur ce sujet dans le cadre de l'interaction corium-béton et correspondent à une distance entre les sites de l'ordre de 40mm. La distance considérée pour le premier axe est près de deux fois inférieure à cette estimation et on considère ici une distance près de deux fois supérieure à une température d'ablation fixée à 1700K.

Bien que l'intensité du relâchement de gaz dépende du type de béton (*cf.* (I.2)), nous considérons dans le cadre de cette première étude une seule et même vitesse d'injection pour réaliser l'ensemble de nos simulations. De cette manière, pour un "mécanisme d'injection donné" (distribution des sites, vitesse d'injection, diamètre d'injection, ...) correspondant ici à la distribution des sites, nous nous attachons plus particulièrement à l'étude les effets liés à la composition en considérant comme dans la section (IV.1.3) deux types de béton.

IV.2.1 Description de l'ablation dans le repère lié au front

Dans le cas diphasique compositionnel, le dégagement des gaz de décomposition du béton est pris en compte selon un ou plusieurs sites d'injection de gaz positionnés sur le front d'ablation. L'utilisation d'une condition de Stefan avec une méthode ALE pour décrire l'ablation du béton implique dans ce cas la prise en compte des déformations éventuelles de ces sites d'injection de gaz lors du suivi en temps et en espace du front. Comme le traitement numérique de ces déformations peut être complexe et délicat à mettre en œuvre, nous choisissons ici, pour simplifier, une seconde approche qui consiste à réaliser nos simulations numériques dans un repère fixe lié au front d'ablation. Dans ce cas, pour décrire le comportement moyen de l'ablation, notre démarche consiste à prendre en compte la vitesse de Stefan définie par la relation (IV.6) dans une condition à la limite de Dirichlet pour la vitesse d'injection de béton fondu. En reprenant les notations de la section (IV.1), cette condition s'écrit

$$\mathbf{u} \;=\; < u_i >_{\Gamma_i} \mathbf{n} \quad \text{sur } \Gamma_i \tag{IV.22}$$

où $< u_i >_{\Gamma_i}$ désigne la moyenne de la vitesse de Stefan sur Γ_i définie par

$$< u_i >_{\Gamma_i} \;=\; \frac{1}{|\Gamma_i|} \int_{\Gamma_i} \mathbf{n} \cdot \mathbf{u}_i \tag{IV.23}$$

Soit, à partir de la relation (IV.6)

$$< u_i >_{\Gamma_i} \;=\; -\frac{1}{|\Gamma_i|} \int_{\Gamma_i} \mathbf{n} \cdot \frac{k_l}{\varrho_l L} \nabla T_l \tag{IV.24}$$

où $|\Gamma_i|$ désigne la mesure de la surface Γ_i.

Nous nous proposons de tester numériquement cette seconde approche en reprenant intégralement le cas **II** présenté dans l'étude purement compositionnelle (*cf.* la section (IV.1.3)). Nous comparons les résultats des simulations réalisées dans le repère lié au front d'ablation à ceux précédemment obtenus avec la méthode ALE. Ces résultats concernent la structure générale de couche limite et la vitesse moyenne d'ablation. Comme dans la section (IV.1), les illustrations proposées consistent en une juxtaposition de deux domaines de calcul périodiques pour améliorer la visibilité.

Les figures (IV.38) et (IV.39) montrent l'évolution de la densité du mélange à différents instants $t \in [0, 150\text{s}]$ pour les bétons silico-calcaire et siliceux. Sur chacune de ces figures, les résultats des simulations réalisées dans le repère lié au front d'ablation (*cf.* (d)-(f) ; (j)-(l)) sont comparés aux mêmes instants à ceux obtenus dans la partie (IV.1.3) avec la méthode ALE. Pour chacun des bétons, même si la formation des rugosités n'est pas prise en compte, les résultats montrent que la structure de la couche limite obtenue à partir de la condition à la limite (IV.22) est similaire à celle obtenue avec la méthode ALE. On observe en effet que l'écoulement est à nouveau structuré selon quatre régions distinctes avec une couche de béton fondu (en bleu), une zone de mélange (en vert), une région où les mouvements convectif sont importants (en jaune) et, enfin, une région principalement riche en corium (en rouge). La dynamique ainsi que la structure des panaches qui s'échappent de la fine couche de béton fondu sont également très proches de ceux observés dans la partie (IV.1.3). La figure (IV.37) présente l'évolution au cours du temps de la vitesse moyenne d'ablation définie par la relation (IV.19). Les résultats illustrés sur cette figure montrent un très bon accord entre les deux approches utilisées pour décrire l'ablation (*i.e.* avec ou sans ALE) et confirment ainsi la tendance observée sur les figures (IV.38) et (IV.39).

Ces résultats montrent bien la capacité de la condition à limite (IV.22) à décrire de manière satisfaisante le comportement moyen de l'ablation dans le repère lié au front. Il nous semble donc pertinent d'utiliser cette approche dans le cadre de nos applications diphasiques compositionnelles (*cf.* section (IV.2.2)) pour décrire l'ablation en présence de sites de relâchement de gaz.

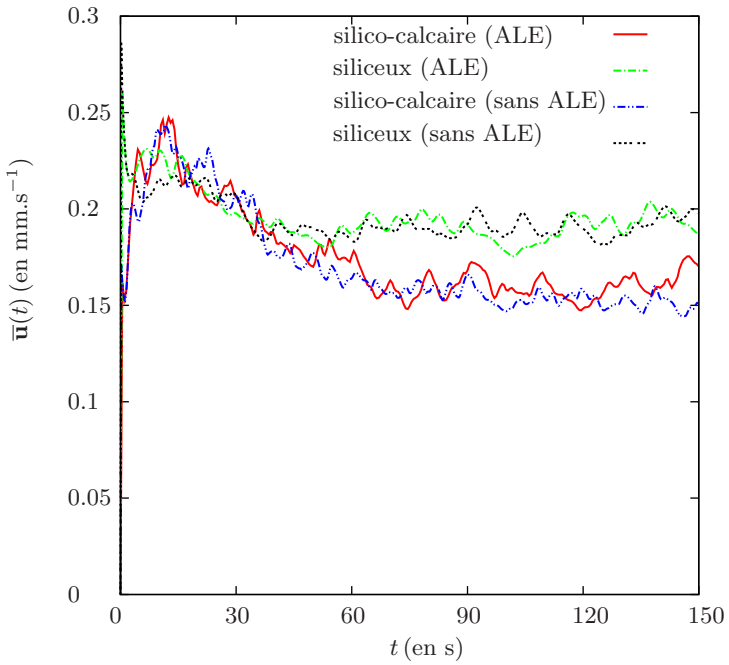
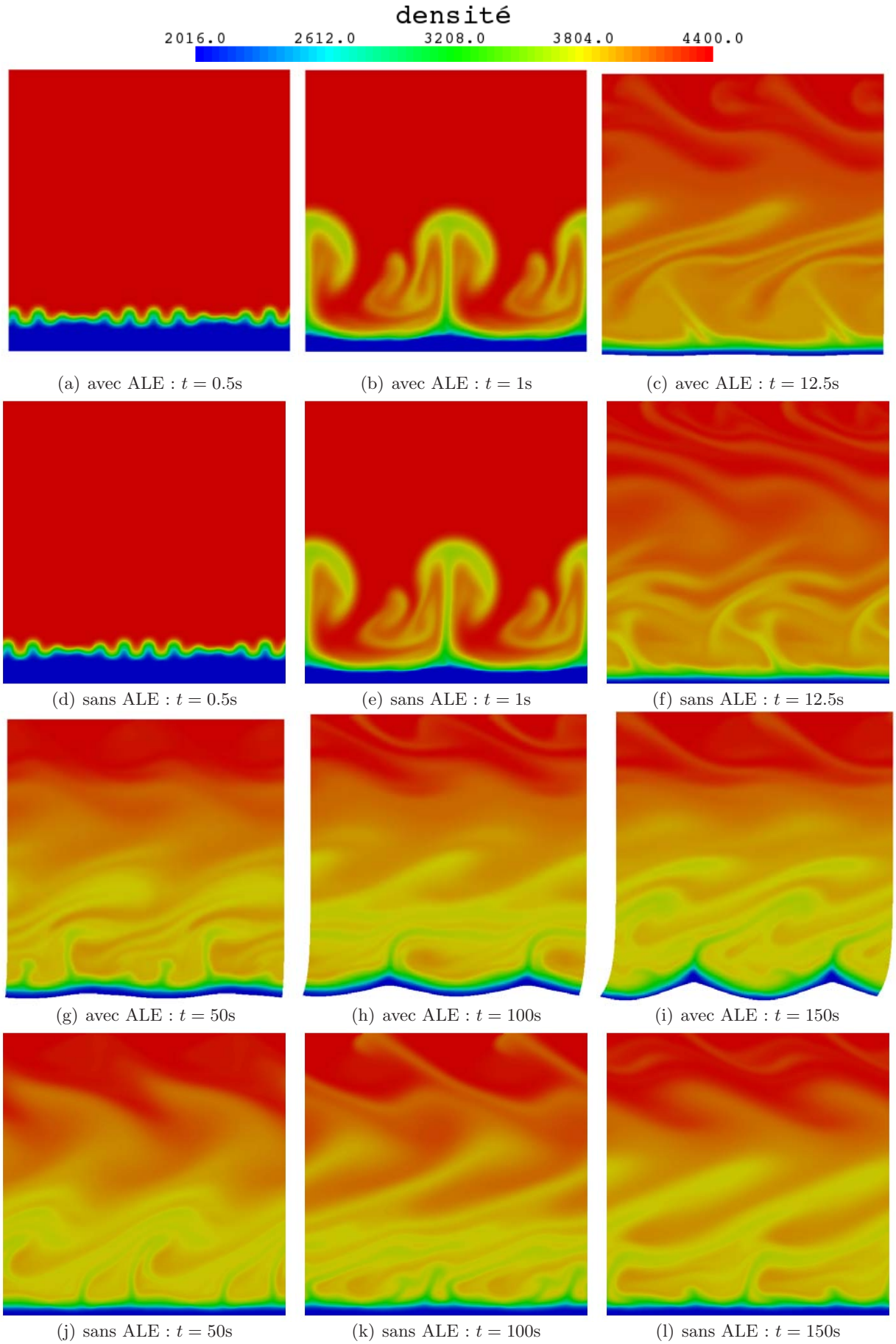


Fig. IV.37: Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) : $T_f = 1700$K



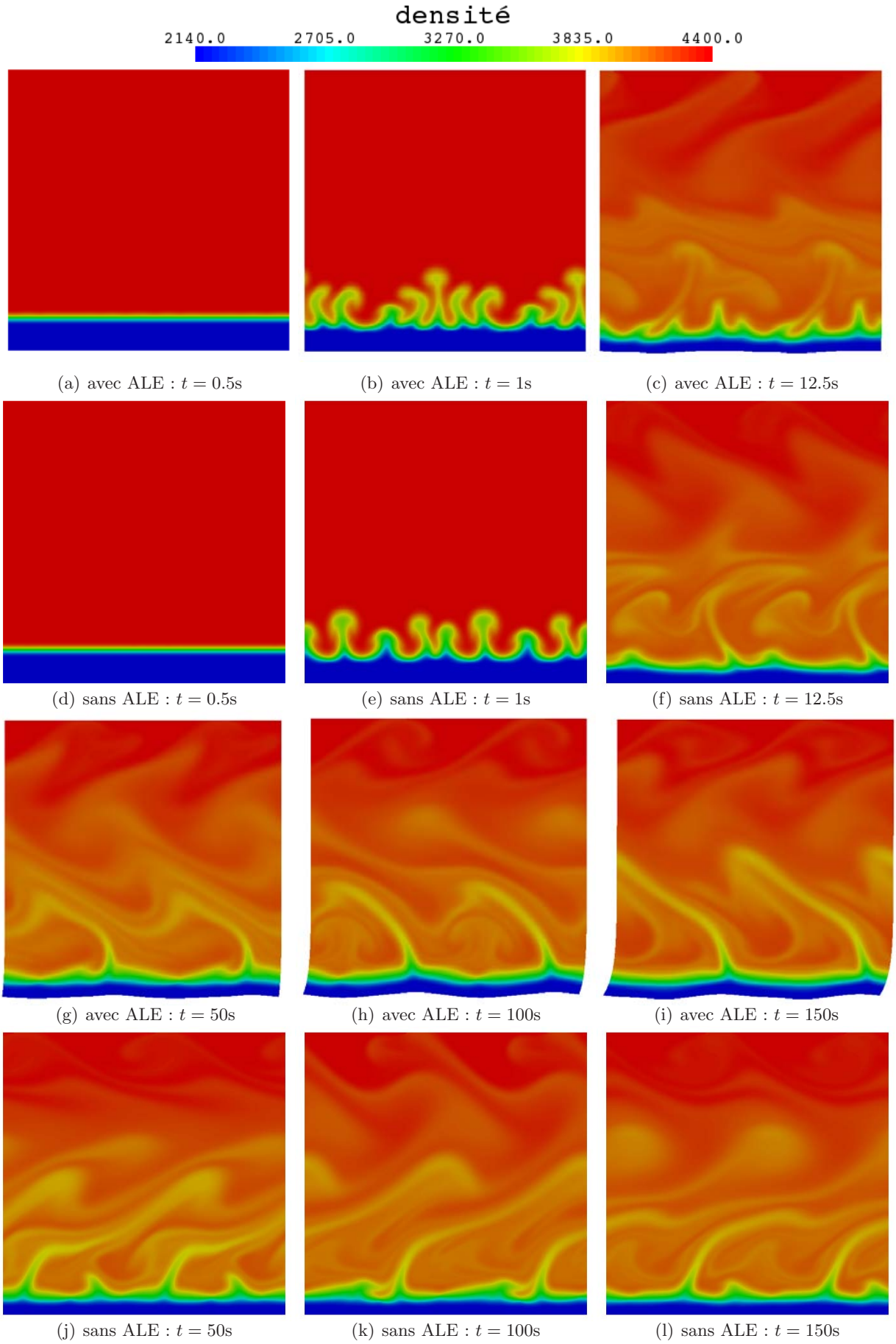
(a) avec ALE : $t = 0.5$s (b) avec ALE : $t = 1$s (c) avec ALE : $t = 12.5$s

(d) sans ALE : $t = 0.5$s (e) sans ALE : $t = 1$s (f) sans ALE : $t = 12.5$s

(g) avec ALE : $t = 50$s (h) avec ALE : $t = 100$s (i) avec ALE : $t = 150$s

(j) sans ALE : $t = 50$s (k) sans ALE : $t = 100$s (l) sans ALE : $t = 150$s

Fig. IV.38: Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$: comparaison des deux approches proposées pour décrire l'ablation du radier (*i.e.* avec ou sans ALE). Cas du béton silico-calcaire, $T_f = 1700$K.



(a) avec ALE : $t = 0.5$s (b) avec ALE : $t = 1$s (c) avec ALE : $t = 12.5$s

(d) sans ALE : $t = 0.5$s (e) sans ALE : $t = 1$s (f) sans ALE : $t = 12.5$s

(g) avec ALE : $t = 50$s (h) avec ALE : $t = 100$s (i) avec ALE : $t = 150$s

(j) sans ALE : $t = 50$s (k) sans ALE : $t = 100$s (l) sans ALE : $t = 150$s

Fig. IV.39: Evolution de la densité pour $t \in [0, 150\text{s}]$: comparaison des deux approches proposées pour décrire l'ablation du radier (*i.e.* avec ou sans ALE). Cas du béton siliceux, $T_f = 1700$K.

IV.2.2 Impact de la température d'ablation

Dans la continuité de l'étude menée dans le cas purement compositionnel (*cf.* section (IV.1)), on se propose ici d'étudier l'impact de la température d'ablation T_f sur la structure de la couche limite. Nous choisissons ici deux des trois températures d'ablation considérées dans la section (IV.1), à savoir $T_f = 1700$K et $T_f = 2000$K, et nous réalisons des simulations pour une distribution donnée des sites de relâchement de gaz.

La géométrie du problème est 2D cartésienne et le domaine de calcul consiste en un rectangle $\Omega = [0, R] \times [0, 4R]$ avec $R = 0.024$m, dont les parois latérales sont supposées périodiques (*cf.* Fig.IV.40). Comme pour l'étude purement compositionnelle, on considère ici deux bétons mis

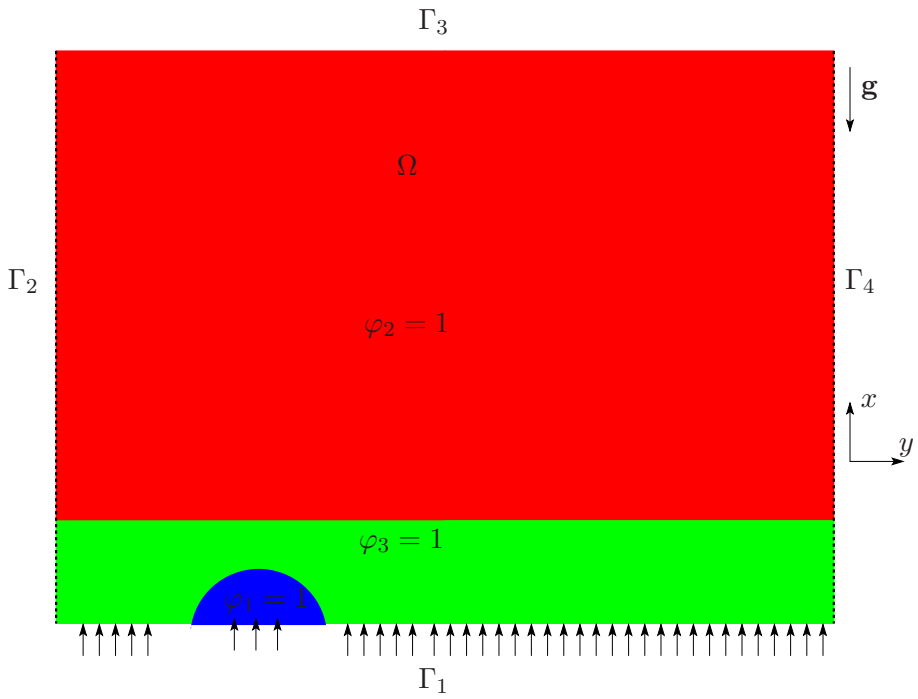


Fig. IV.40: Domaine de calcul Ω utilisé pour l'étude des effets diphasiques compositionnels.

en oeuvre dans les expériences VULCANO de type siliceux et silico-calcaire (*e.g.* [31]) dont la composition ainsi que les propriétés thermo-physiques ont été présentées dans la section (IV.1.3). On suppose à nouveau pour cette étude que la masse volumique du corium est de 4400kg.m^{-3} ce qui correspond, à partir de la composition des matériaux (*cf.* Tab.IV.3), à un enrichissement de 55.7% en volume en béton siliceux (*i.e.* 72.3% en masse) ou un enrichissement de 57% en volume en béton silico-calcaire (*i.e.* 74.5% en masse). Nous rappelons ici que les gaz de décomposition du béton sont assimilés ici à une seule et même phase gazeuse. Les propriétés thermo-physiques du gaz sont répertoriées dans le tableau (IV.5) et correspondent aux propriétés de la vapeur d'eau pour des températures de l'ordre de 2000K.

ϱ_1 (kg.m^{-3})	η_1 (Pa.s)	k_1 (W.K^{-1}.m^{-1})	C_{p_1} (J.kg^{-1}.K^{-1})
0.1	10^{-4}	0.3	2800

Tab. IV.5: Propriétés thermo-physiques du gaz.

Pour les mélanges corium-béton fondu, de nombreuses incertitudes sont associées à l'estimation des tensions de surface. Le tableau (IV.6) présente les valeurs des tensions de surface proposées dans [79] pour les principaux constituants présents. On constate que les valeurs proposées dans ce

tableau sont du même ordre de grandeur ce qui est en bon accord avec notre choix de développer un outil de simulation numérique directe avec une seule tension de surface. Comme dans [17], on choisit dans cette étude une valeur proche de celles exposées dans le tableau (IV.6), à savoir $\sigma = 0.5\text{N.m}^{-1}$.

matériaux		béton silico-calcaire	béton siliceux	UO_2	ZrO_2
tension de surface	(2400 K)	0.432	0.333	0.5436	0.5136
(N.m^{-1})	(1800 K)	0.554	0.37		

Tab. IV.6: Tensions de surface des principaux constituants

La viscosité du mélange est définie dans cette étude selon une loi harmonique sous la forme

$$\frac{1}{\eta} = \frac{\varphi_1}{\eta_1} + \frac{1-\varphi_1}{\eta_{eff}} \tag{IV.25}$$

où $\eta_1 = 10^{-4}$Pa.s et η_{eff} désignent respectivement la viscosité dynamique du gaz et la viscosité effective du pseudo-binaire corium-béton défini à partir de la loi d'Urbain par la relation (IV.16).

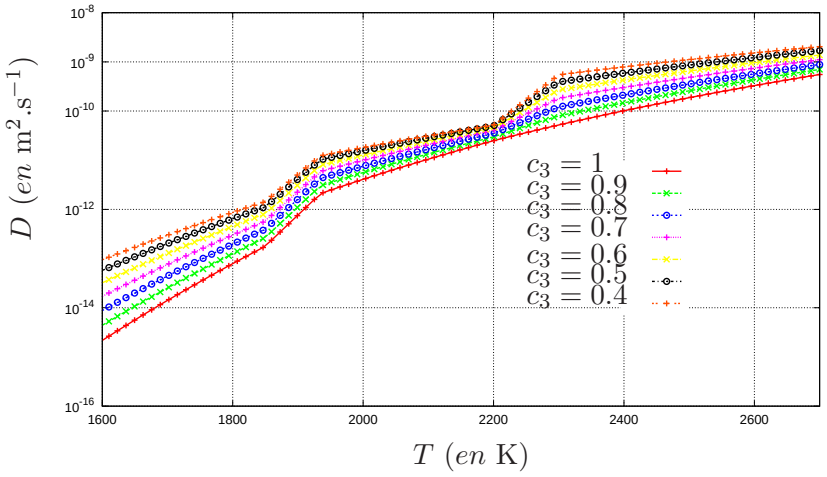
Concernant la diffusion entre le corium et le béton, l'étude des effets purement compositionnels (*cf.* section (IV.1)) a été réalisée avec la constante $D = 10^{-9}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$. Nous choisissons ici le modèle de diffusion généralement recommandé pour l'étude des bains silicatés correspondant à la loi de Mungall [31, 118]

$$D = \frac{T}{\eta_{eff}} 10^{\alpha-4} \quad (\text{en m}^2.\text{s}^{-1}) \tag{IV.26}$$

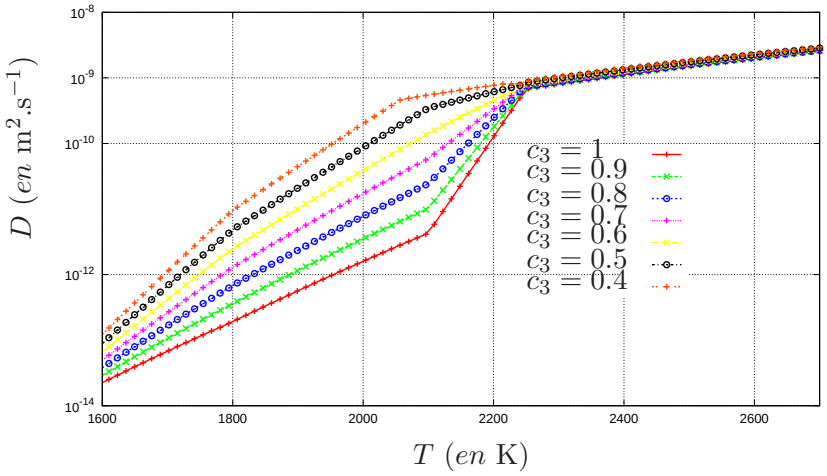
où η_{eff} désigne la viscosité effective définie par la relation (IV.16), $\alpha = -9$ pour les bétons silico-calcaires et $\alpha = -10$ pour les bétons siliceux [31]. Une description détaillée de la relation (IV.26) et plus particulièrement du coefficient α sort du cadre de cette étude et nous renvoyons le lecteur intéressé à la référence [118]. La figure (IV.41) montre l'évolution de la diffusion définie par la loi de Mungall en fonction de la température et de l'enrichissement en béton fondu dans le mélange corium-béton fondu. Les résultats montrent que la diffusion augmente fortement avec la température mais reste néanmoins très faible. Sans perte de consistance, la relation (IV.26) est étendue au cas diphasique compositionnel sous la forme suivante

$$D = \frac{T}{\eta} 10^{\alpha-4} \quad (\text{en m}^2.\text{s}^{-1}) \tag{IV.27}$$

où η désigne la viscosité du mélange définie par la relation (IV.25). Nous signalons ici que, d'un point de vue numérique, cette extension de la loi de Mungall au cas diphasique compositionnel est intéressante puisqu'elle permet de stabiliser naturellement la contribution compositionnelle des équations de Cahn-Hilliard dans la phase gazeuse. En effet, dans certaines de nos applications diphasiques compositionnelles réalisées avec un très petit coefficient de diffusion (*e.g.* $D \sim 10^{-9}\text{m}^2.\text{s}^{-1}$) uniforme dans le mélange, nous avons été confronté à un problème d'instabilités numériques pour les paramètres d'ordre associés aux espèces miscibles (*i.e.* φ_2 et φ_3) qui apparaissent essentiellement dans les régions de fort cisaillement au voisinage de l'interface liquide-gaz et se développent progressivement dans le gaz. De notre point de vue, le développement de ces instabilités s'explique pour deux raisons. La première raison est que les mobilités diphasiques M_i pour $i = 1, 2, 3$ et les coefficients de diffusions D_i pour $i = 2, 3$ sont très faibles dans ces régions. La seconde raison est que la stabilisation par viscosité entropique présentée dans la section (III.4) ne permet pas de palier le développement de ces instabilités dans la phase gazeuse en raison des faibles valeurs calculées dans cette zone pour la viscosité entropique. Le coefficient de diffusion D donné par la relation



(a) Béton siliceux



(b) Béton silico-calcaire

Fig. IV.41: Diffusion massique du mélange en fonction de la température et de l'enrichissement en béton fondu (*i.e.* $c_3 = \varrho_3\varphi_3/\rho$) dans le mélange.

(IV.27) n'est plus uniforme au sein du mélange diphasique compositionnel mais varie continûment entre le mélange corium-béton fondu et le gaz avec un facteur de variation inversement proportionnel à la viscosité du gaz (ici $1/\eta_1 = 10^4$). De cette manière, même si la valeur du coefficient de diffusion est très faible dans le mélange compositionnel (*cf.* Fig.IV.41), celle-ci devient beaucoup plus importante dans la phase gazeuse (ici $D \sim 10^{-3}$) ce qui permet d'atténuer sensiblement les oscillations numériques observées dans le cas d'un faible coefficient de diffusion uniforme.

Concernant les conditions aux limites sur Γ_1, on impose, d'une part, une condition de Dirichlet pour la vitesse et les paramètres d'ordre et, d'autre part, une condition de Neumann homogène pour le potentiel chimique généralisé. La paroi Γ_3 modélise à nouveau un bord libre. Dans l'étude purement compositionnelle, une condition à la limite de Dirichlet pour les paramètre d'ordres φ_i avec $i = 2, 3$ imposée par pénalisation permettait de faire rentrer du corium dans le domaine de calcul lorsque l'écoulement était rentrant (*i.e.* $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0$). Dans le cas diphasique compositionnel, cette condition à la limite de sortie conduit en pratique à des oscillations sur les paramètres d'ordre qui ne permettent pas à terme d'exploiter les résultats. Dans ces circonstances, pour continuer à disposer tout au long du calcul d'une quantité suffisamment importante de corium dont la

température et la composition initiale n'aient pas été altérées par le mélange, nous choisissons ici de doubler la hauteur du domaine de calcul et nous imposons sur Γ_3 des conditions aux limites de Neumann homogène pour les paramètres d'ordres φ_2 et φ_3 ainsi que pour le potentiel chimique généralisé. Concernant le paramètre d'ordre φ_1 et la vitesse, nous continuons ici d'imposer les conditions aux limites de sorties présentées dans la section (III.5).

Les conditions initiales pour les paramètres d'ordres s'écrivent

$$\varphi_1 = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(-\frac{2}{\epsilon}\sqrt{\left(r-\frac{R}{4}\right)^2 + z^2} - \frac{13}{14}r_b\right) & \forall\, r \in]\frac{R}{8}, \frac{3R}{8}[\\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{IV.28}$$

$$\varphi_2 = \begin{cases} 0 & \forall\, z < \frac{R}{5} \\ \frac{50}{3R}\left(z - \frac{R}{5}\right) & \forall\, z \in [\frac{R}{5}, \frac{13R}{50}[\\ 1 - \varphi_D & \forall\, z \geq \frac{13R}{50} \end{cases} \tag{IV.29}$$

$$\varphi_3 = 1 - \varphi_1 - \varphi_2 \tag{IV.30}$$

où $\epsilon = r_b/7$, $r_b = 2 \times 10^{-3}$m et φ_D désignent respectivement l'épaisseur d'interface, le rayon de la bulle de gaz à l'instant initial et l'enrichissement en volume en béton fondu dans le mélange. La condition initiale pour la température T s'écrit

$$T = \begin{cases} (T_2 - 100 - T_f)\,\frac{5z}{R} + T_f & \forall\, z < \frac{R}{5} \\ T_2 & \forall\, z \geq \frac{R}{5} \end{cases} \tag{IV.31a}$$

où $T_2 = 2400$K désigne la température du corium. Enfin, la condition initiale pour la vitesse est donnée par

$$\mathbf{u} = u_z \mathbf{e}_z \text{ avec } u_z = \begin{cases} < u_i >_{\Gamma_i} & \forall\, r \in]0, \frac{R}{8}] \cup [\frac{3R}{8}, R[\\ 0.12\left(-\frac{r^2}{{r_b}^2} + 6\frac{r}{r_b} - 8\right) & \forall\, r \in [\frac{R}{4} - r_b, \frac{R}{4} + r_b[\\ 0 & \forall\, r \in [\frac{R}{8}, \frac{R}{4} - r_b[\cup [\frac{R}{4} + r_b, \frac{3R}{8}[\end{cases} \tag{IV.32}$$

où $< u_i >_{\Gamma_i}$ désigne la moyenne de la vitesse de Stefan sur Γ_i définie par la relation (IV.24).

Enfin, les différents paramètres numériques utilisés dans cette section sont résumés dans le tableau (IV.7).

CH/NS		discrétisation				stabilisation					
$M^\star$	M_c	Δt	t_{final}	Δx	Δy	c_1^η	c_2^η	c_1^D	c_2^D	c_1^k	c_2^k
5×10^2	10^{-9}	5×10^{-4}	50	24	96	1	200	1	200	1	50

Tab. IV.7: Paramètres numériques utilisés pour l'ensemble des calculs de la section (IV.1)

On présente dans un premier temps les résultats obtenus avec une température de 1700K puis dans un second temps ceux obtenus avec une température de 2000K. Comme dans la section (IV.1), les illustrations proposées consistent en une juxtaposition de deux domaines de calcul périodiques pour améliorer la visibilité et la compréhension des phénomènes observés.

IV.2.2.a Cas I : température d'ablation $T_f = 1700$K

Les résultats présentés ici concernent les simulations numériques réalisées sur 4s avec une température d'ablation de 1700K. A cette température, on rappelle que la fraction de solide présente dans

le béton fondu Φ_{sol} est de l'ordre de 66% pour un béton silico-calcaire et de l'ordre de 26% pour un béton siliceux. Dans ce cas, le contraste de viscosité est de 16445 pour un béton silico-calcaire (*cf.* (IV.1.3) (cas **II**) : $\mathcal{R} = \eta_3/\eta_2 = 249.96/15.2$) et de 53292 pour un béton siliceux (*cf.* (IV.1.3) (cas **II**) : $\mathcal{R} = \eta_3/\eta_2 = 1204.39/22.6$).

La figure (IV.42) montre l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'un béton silico-calcaire. Les résultats montrent que la couche de béton fondu est très rapidement déstabilisée par le relâchement des gaz de décomposition et la formation d'une première série de bulles (*cf.* (b)). Ces dernières entraînent une certaine quantité de béton fondu (*cf.* (b)-(d)) qui va progressivement se mélanger au cours des différents cycles de détachement (*cf.* (e)-(f)). En raison du fort contraste de densité existant entre le béton fondu et le corium, la déstabilisation de la couche de béton entraîne le développement d'instabilités de type Rayleigh-Taylor de très faible amplitude entre chaque site de relâchement de gaz (*cf.* (c)). Cependant, ces instabilités perdent rapidement leur identité puisqu'elles sont balayées en direction des sites par les courants de recirculation générés dans le sillage des premières bulles (*cf.* (d)). La proximité des sites de relâchement de gaz ne permet pas aux instabilités de type Rayleigh-Taylor de se développer (*cf.* (e)-(f)) et d'engendrer un mouvement de convection compositionnel vigoureux tel qu'il a pu être observé dans l'étude réalisée dans le cas purement compositionnel (*cf.* (IV.1.3)). Les cycles de détachement des bulles commencent alors à se succéder (*cf.* (d)-(h) : ~ 4 cycles) jusqu'à la mise en place d'un mouvement de convection *oscillant* qui entraîne un ballotement latéral des bulles (de forme ellipsoïdale) lors de leur ascension dans le bain de corium (*cf.* (h)-(l)). A partir de ce moment là, on constate une diminution progressive et non symétrique de la couche de béton fondu entre les sites de relâchement de gaz. Comme le montre la figure (IV.46), ce phénomène peut être expliqué par la présence entre chaque site d'une cellule de convection à l'échelle de la bulle qui balaye la couche de béton fondu dans une direction préférentielle (ici de gauche à droite) et qui par conséquent, alimente continûment les sites de relâchement gaz en béton fondu. De cette manière, au cours de chaque cycle, les bulles entraînent une certaine quantité de béton fondu qui va se mélanger dans le bain de corium (*cf.* (k)).

Dans le cas d'un béton siliceux, l'évolution de la densité du mélange est présentée sur la figure (IV.46). Dans ce cas, la phénoménologie observée est similaire à celle d'un béton silico-calcaire avec pour commencer une phase de perturbation de la couche de béton fondu par le relâchement des gaz de décomposition (*cf.* (b)). On remarque ici que la déstabilisation de la couche de béton fondu n'entraîne pas le développement d'instabilités de type Rayleigh-Taylor, même de très faible amplitude comme nous avons pu l'observer pour un béton silico-calcaire. Ceci s'explique par le caractère très visqueux de la couche de béton fondu qui a pour effet d'augmenter la longueur d'onde critique et donc de retarder le développement des instabilités (*cf.* (IV.1.2)). On distingue ensuite une phase au cours de laquelle un mouvement de convection oscillant prend place dans le bain de corium et provoque un ballotement latéral des bulles dont la forme est à nouveau ellipsoïdale (*cf.* (h)-(l)). On observe enfin une dernière phase où l'épaisse couche de béton fondu est progressivement balayée par un rouleau de convection présent à l'échelle des bulles entre les sites de relâchement de gaz (*cf.* Fig.IV.46). Comme pour un béton silico-calcaire, ce mouvement convectif local expulse continûment une certaine quantité de béton fondu vers les sites de relâchement de gaz qui est ensuite transporté de manière quasi-périodique par les bulles dans le bain de corium dans lequel il va se mélanger (*cf.* (j)-(l)).

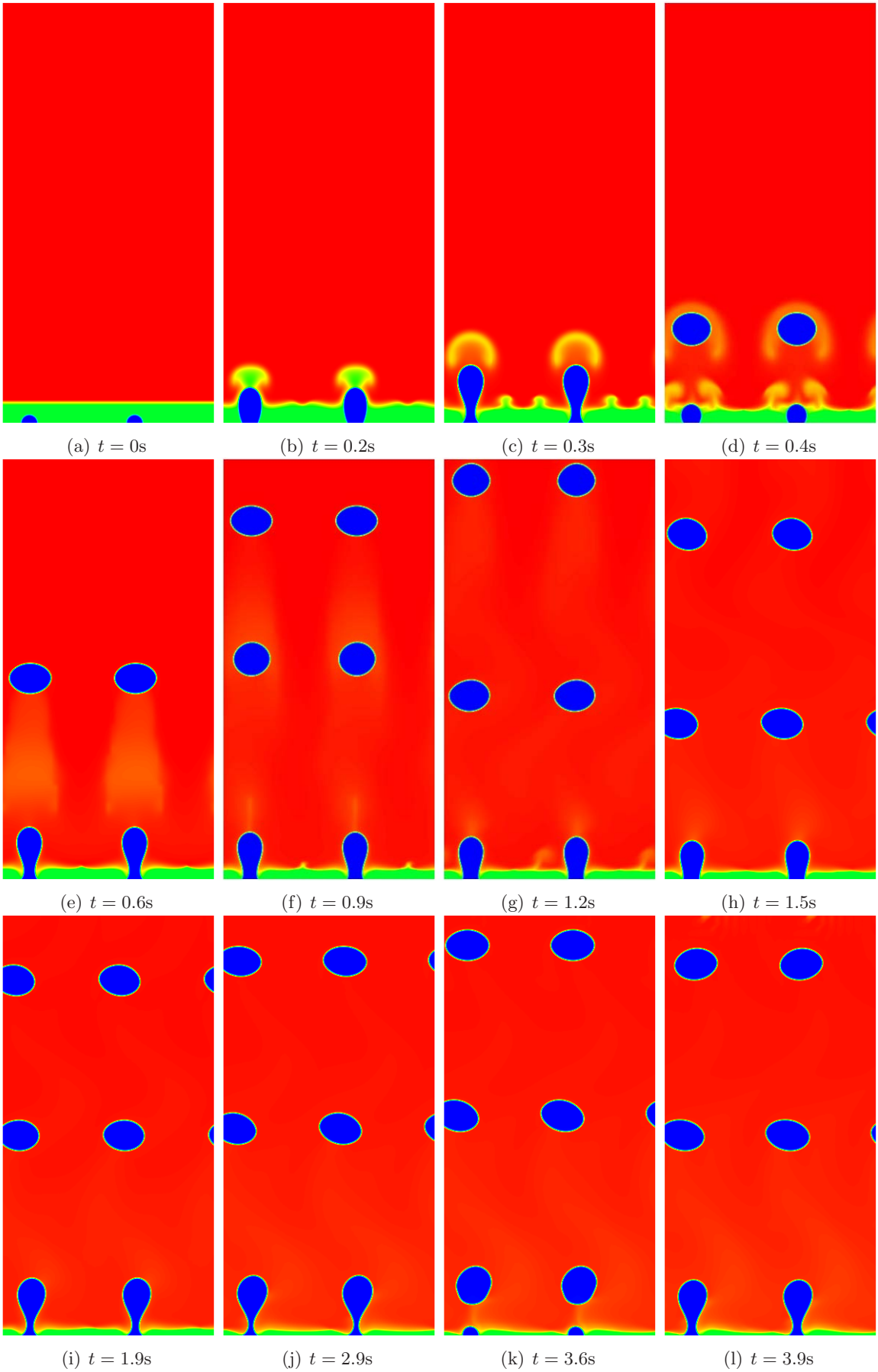
On s'intéresse désormais à la distribution de la fraction de solide Φ_{sol} dans le mélange. Celle-ci est respectivement représentée sur les figures (IV.44) et (IV.45) dans le cas d'un béton silico-calcaire et dans le cas d'un béton siliceux. On observe que Φ_{sol} est maximale au front d'ablation. Pour un béton silico-calcaire, la fraction de solide diminue lorsque la teneur en corium et la température augmente. Dans le cas d'un béton siliceux, les résultats mettent en évidence la présence d'une zone pâteuse entre chaque site de relâchement de gaz dans laquelle se trouve une couche de mélange quasi-liquide. Ces résultats sont en parfait accord avec la distribution de la fraction de solide obtenue précédemment dans le cas d'un mélange purement compositionnel.

La figure (IV.47) montre l'évolution de la vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1}) au cours du temps. La tendance observée dans le cas d'un béton siliceux est similaire à celle d'un béton silico-calcaire. Les résultats montrent un pic de vitesse dans les premiers instants que l'on associe ici à la perturbation de la couche de béton fondu par le bullage. La vitesse moyenne d'ablation diminue ensuite progressivement durant une certaine période qui correspond à la phase d'établissement de l'écoulement dans le bain. On observe enfin un changement de pente et une augmentation progressive de la vitesse moyenne d'ablation. Cette intensification de l'ablation est en parfait accord avec l'amincissement progressif de la couche de béton fondu précédemment décrit. Dans le cas d'un béton siliceux, le changement de pente s'établit légèrement plus tard et de manière moins prononcée que dans le cas d'un béton silico-calcaire. Ceci peut à nouveau s'expliquer par le caractère très visqueux de la couche de béton fondu qui, pour cette température d'ablation, est plus stable et plus épaisse. Signalons, enfin, que les valeurs de la vitesse moyenne d'ablation sont de l'ordre de quelques dixièmes de millimètres par seconde et légèrement supérieures à celles obtenues dans les premiers instants de l'étude réalisée dans le cas purement compositionnel. De notre point de vue, ce comportement est essentiellement lié au relâchement des gaz de décomposition. Toutefois, il serait intéressant de réaliser une étude sur des temps plus longs pour vérifier la persistance de ce comportement.

IV.2.2.b Cas II : température d'ablation $T_f = 2000$K

Les résultats présentés ici concernent les simulations numériques réalisées sur 4s avec une température d'ablation de 2000K. A cette température, on rappelle que la fraction de solide présente dans le béton fondu Φ_{sol} est de l'ordre de 51% pour un béton silico-calcaire et de l'ordre de 1.5% pour un béton siliceux. Dans ce cas, la viscosité du béton silico-calcaire ($\eta_3 = 12.52$Pa.s) devient supérieure à celle du béton siliceux ($\eta_3 = 4.89$Pa.s) et les contrastes de viscosité sont respectivement de 824 et de 216 pour un béton silico-calcaire et un béton siliceux (*cf.* (IV.1.3) (cas **III**)).

La figure (IV.48) présente l'évolution de la densité du mélange dans le cas d'un béton silico-calcaire. Comme dans l'étude précédente réalisée avec une température d'ablation de 1700K, la phénoménologie observée ici peut être décrite selon trois étapes principales avec pour commencer l'étape associée à la perturbation de la couche de béton fondu par le bullage (*cf.* (b)). Cette perturbation entraîne à nouveau la formation d'instabilités de type Rayleigh-Taylor de très faibles amplitude entre chaque site de relâchement de gaz (*cf.* (c)). Par contre, comme la viscosité du béton fondu est plus faible, la longueur d'onde de ces instabilités est légèrement plus petite. La diminution du contraste de viscosité entraîne une diminution de la stabilité de la couche de béton fondu. Dans ces conditions, la quantité de béton fondu entraînée lors de chaque cycle de détachement jusqu'à l'établissement de l'écoulement est plus importante que dans l'étude précédente (*cf.* (d)-(g)) ce qui implique un amincissement de la couche de béton fondu. Cette dernière est ensuite cisaillée par les cellules de convection présentes à l'échelle de la bulle entre chaque site de relâchement de gaz (*cf.* Fig.IV.52). Dans le cas d'un béton siliceux, la déstabilisation de la couche de béton par le bullage n'entraîne toujours pas la formation d'instabilité de type Rayleigh-Taylor (*cf.* (b)-(c)). Par contre, comme la viscosité du béton fondu est nettement plus faible pour cette température d'ablation, la couche de béton est beaucoup moins stable. Dans ces circonstances mais aussi en raison de la proximité des sites de relâchement de gaz, les courants de recirculation générés autour et dans le sillage des bulles entraînent la formation d'un panache de béton fondu à l'échelle des bulles (*cf.* (e)-(f)). La mise en place d'un mouvement de convection oscillant provoque alors un ballotement latéral des bulles et donc des panaches qui perdent rapidement leur identité (*cf.* (d)). Enfin, comme dans l'étude précédente, on observe le cisaillement de la couche de béton fondu sous l'effet des cellules de convection présentes entre chaque site de relâchement de gaz à l'échelle de la bulle (*cf.* (k)-(l)). Comme précédemment et pour les deux types de béton, ces cellules convectives (*cf.* Fig.IV.52) contribuent au mélange compositionnel en alimentant chaque site en béton fondu

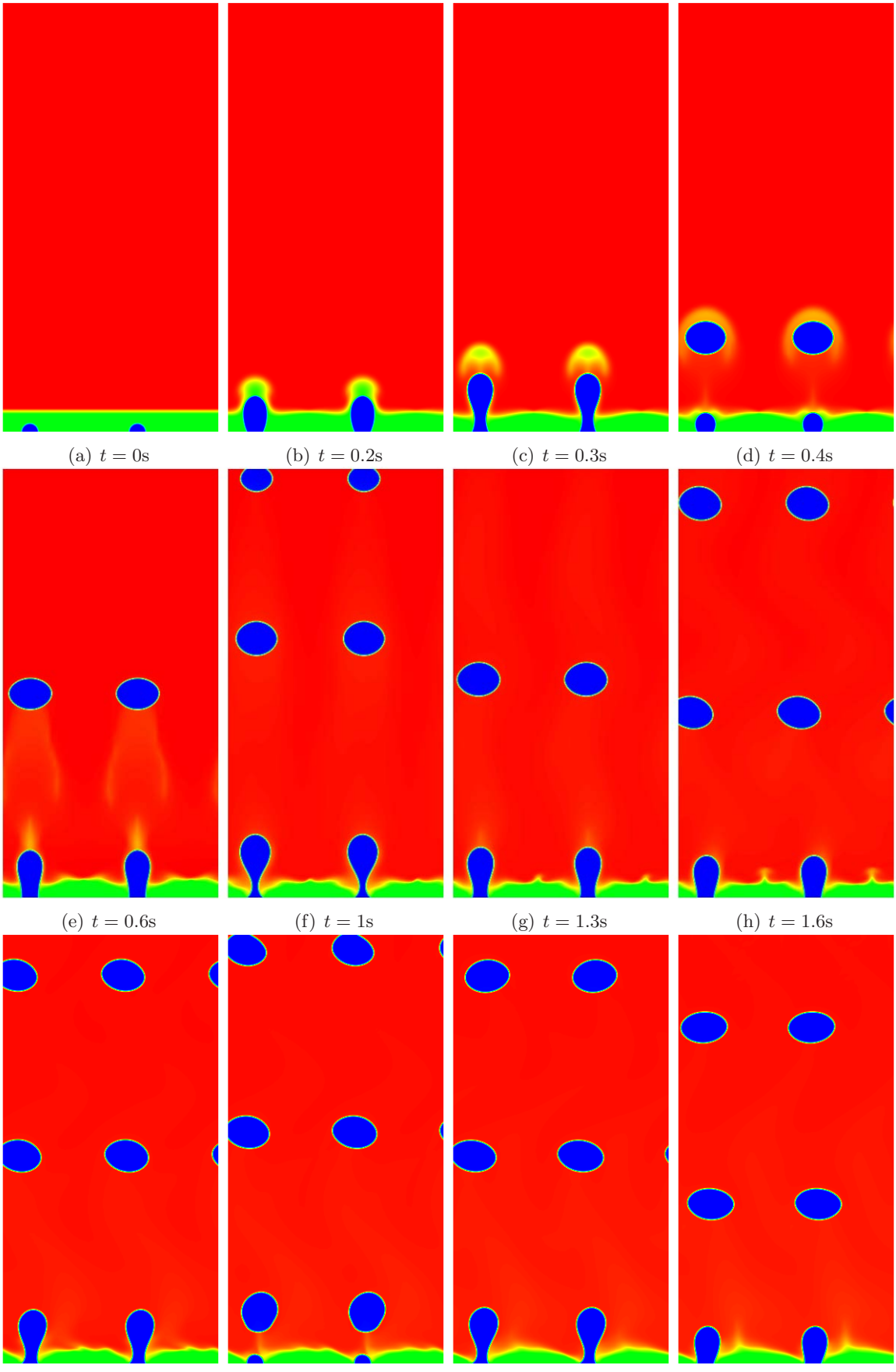


(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s (c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

(e) $t = 0.6$s (f) $t = 0.9$s (g) $t = 1.2$s (h) $t = 1.5$s

(i) $t = 1.9$s (j) $t = 2.9$s (k) $t = 3.6$s (l) $t = 3.9$s

Fig. IV.42: Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton silico-calcaire.

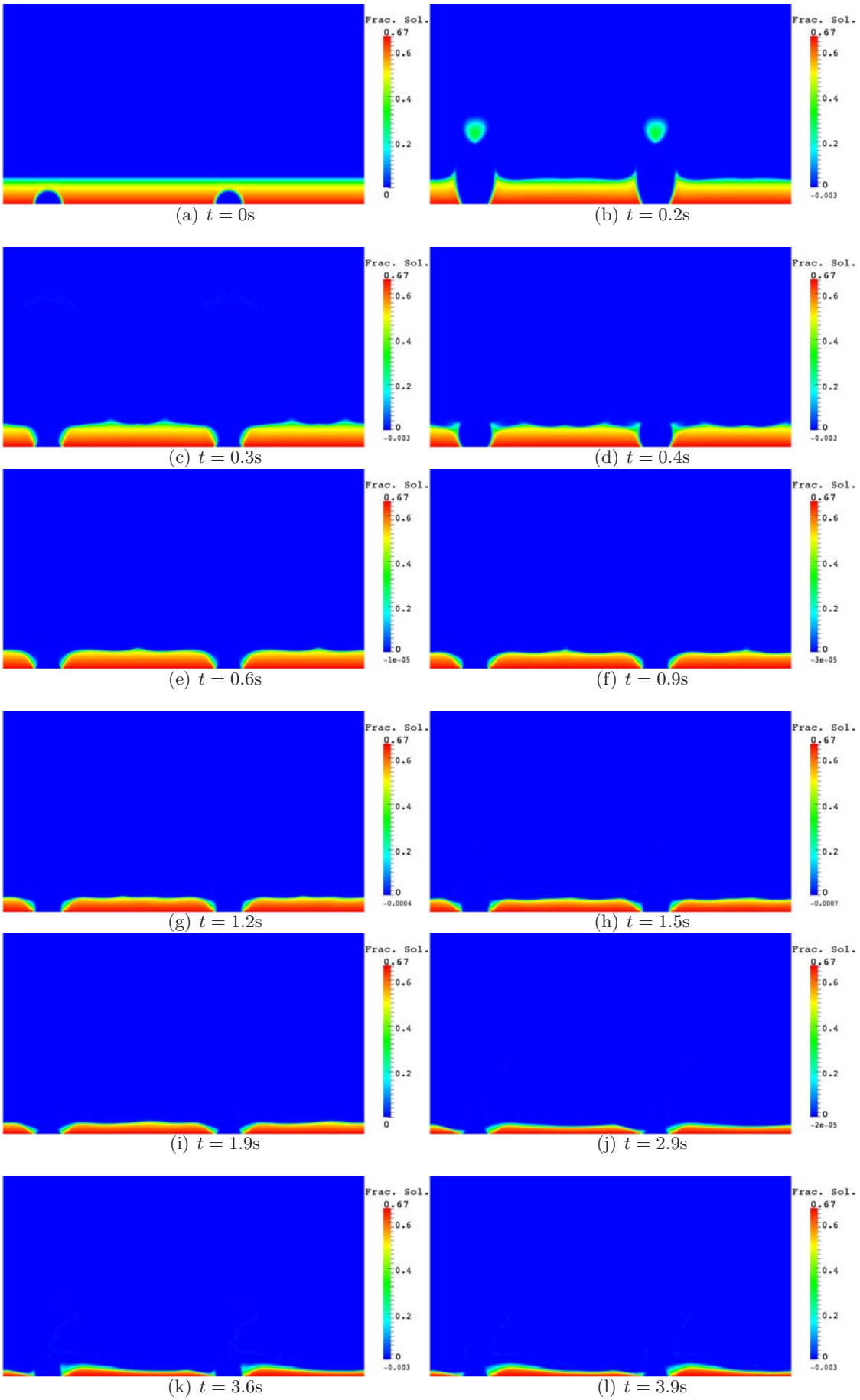


(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s (c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

(e) $t = 0.6$s (f) $t = 1$s (g) $t = 1.3$s (h) $t = 1.6$s

(i) $t = 2$s (j) $t = 2.4$s (k) $t = 3.4$s (l) $t = 4$s

Fig. IV.43: Evolution de la densité pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton siliceux.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s

(c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

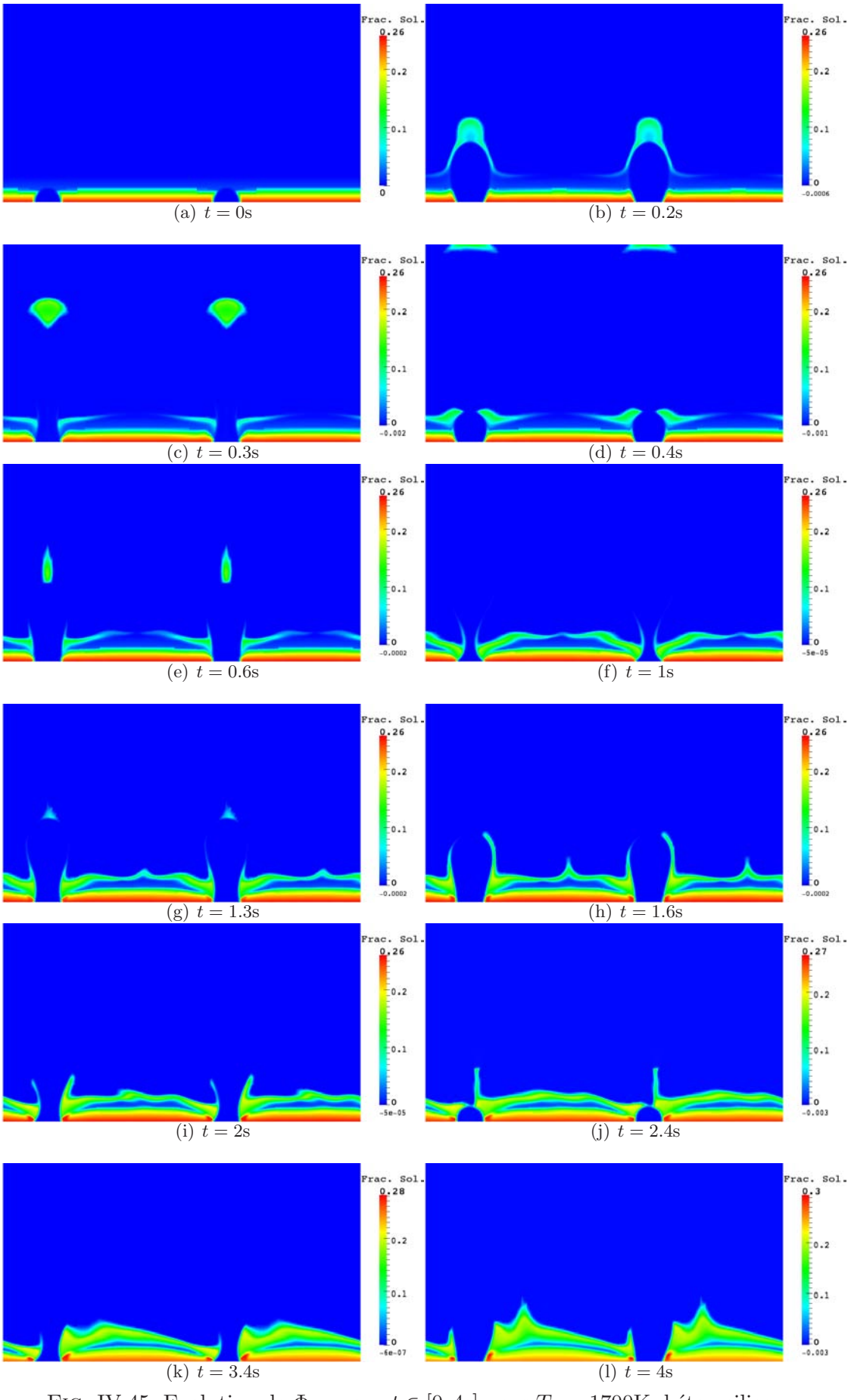
(e) $t = 0.6$s (f) $t = 0.9$s

(g) $t = 1.2$s (h) $t = 1.5$s

(i) $t = 1.9$s (j) $t = 2.9$s

(k) $t = 3.6$s (l) $t = 3.9$s

Fig. IV.44: Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton silico-calcaire.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s

(c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

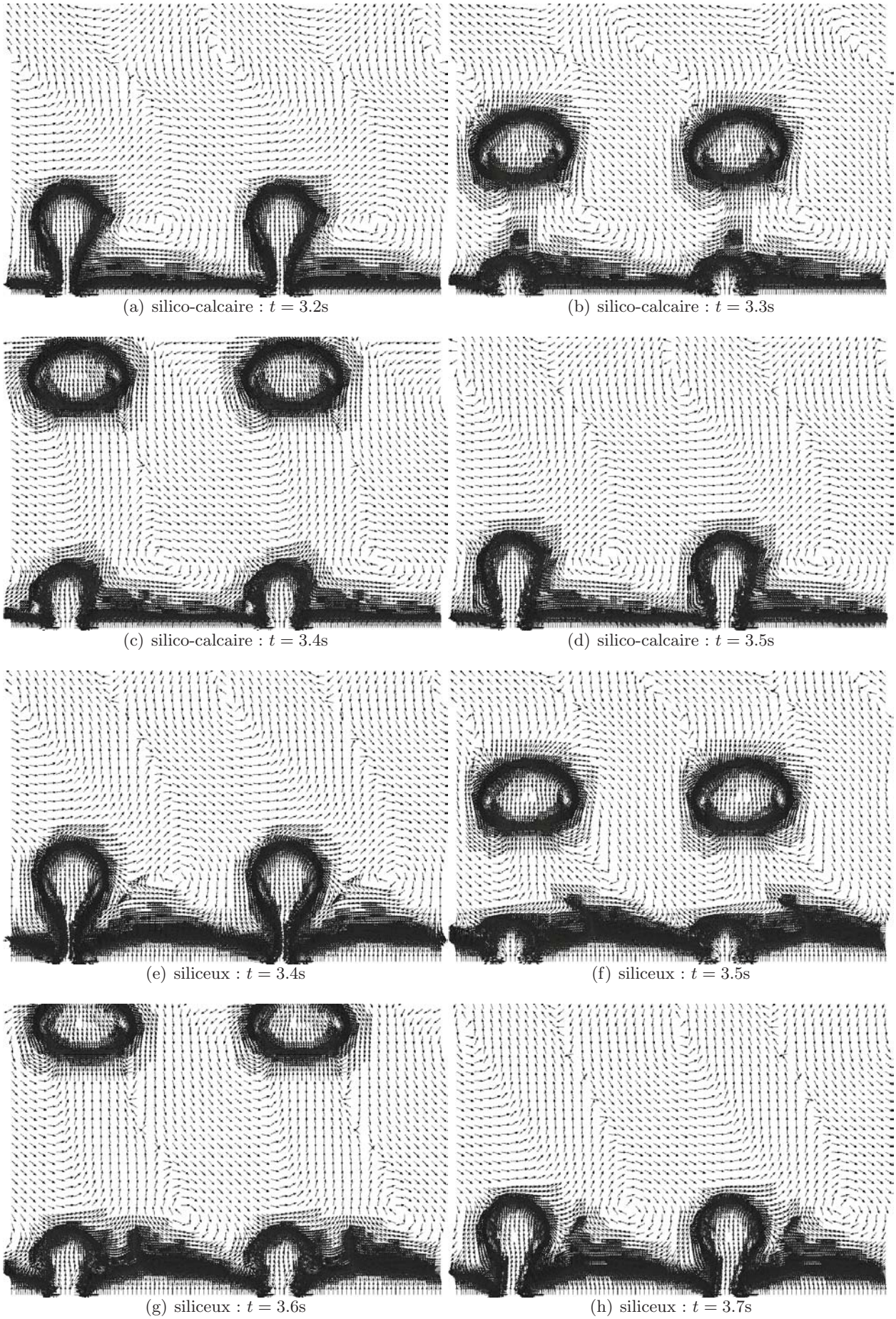
(e) $t = 0.6$s (f) $t = 1$s

(g) $t = 1.3$s (h) $t = 1.6$s

(i) $t = 2$s (j) $t = 2.4$s

(k) $t = 3.4$s (l) $t = 4$s

Fig. IV.45: Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 1700$K, béton siliceux.



(a) silico-calcaire : $t = 3.2$s
(b) silico-calcaire : $t = 3.3$s
(c) silico-calcaire : $t = 3.4$s
(d) silico-calcaire : $t = 3.5$s
(e) siliceux : $t = 3.4$s
(f) siliceux : $t = 3.5$s
(g) siliceux : $t = 3.6$s
(h) siliceux : $t = 3.7$s

Fig. IV.46: Champ de vitesse pour $t = \{3.2\text{s}, 3.3\text{s}, 3.4\text{s}, 3.5\text{s}\}$ dans le cas d'un béton silico-calcaire (a)-(d) et pour $t = \{3.4\text{s}, 3.5\text{s}, 3.6\text{s}, 3.7\text{s}\}$ dans le cas d'un béton siliceux (e)-(g)

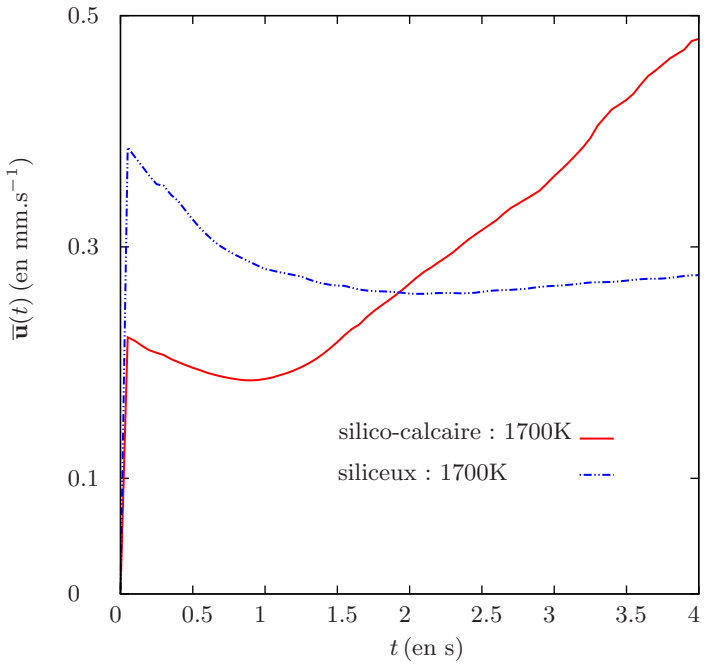


Fig. IV.47: Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1})

qui est ensuite entraîné cycliquement dans le bain de corium sous l'effet du bullage.

La figure (IV.50) montre l'évolution de la fraction de solide présente dans le mélange. La tendance observée est similaire à celle obtenue précédemment dans le cas purement compositionnel. Dans le cas d'un béton silico-calcaire, les résultats montrent, d'une part, que Φ_{sol} est maximale au front d'ablation et, d'autre part, un amincissement progressif et prononcé de la zone pâteuse. Dans le cas d'un béton siliceux, on observe la formation progressive d'une zone pâteuse qui surplombe une région quasi-liquide. Ceci s'explique à nouveau par l'augmentation de la teneur en corium du mélange dans cette région.

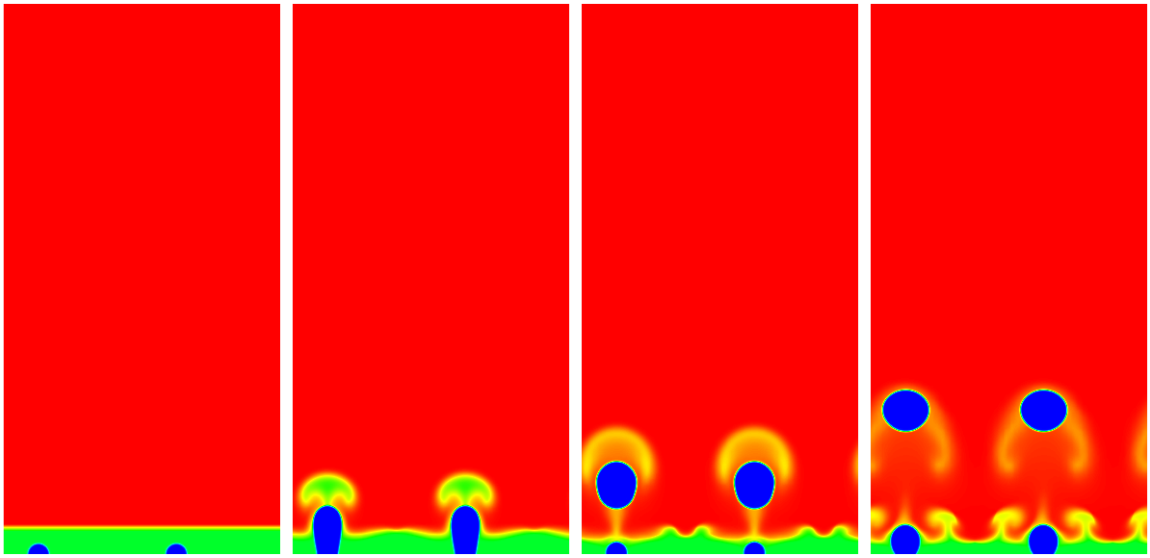
On s'intéresse enfin à l'évolution en temps de la vitesse moyenne d'ablation dont les profils sont représentés (en mm.s^{-1}) sur la figure (IV.53). Afin d'appuyer nos propos, nous avons également représentés sur cette figure les profils obtenus précédemment pour une température d'ablation de 1700K. On remarque, dans un premier temps, que les valeurs de vitesse sont à nouveau de quelques dixièmes de millimètres par seconde et légèrement supérieures à celles obtenues dans les premiers instants de l'étude réalisée en l'absence des gaz de décomposition. Ici encore, nous expliquons cette augmentation de la vitesse moyenne d'ablation par la présence du bullage. Pour les deux types de bétons, la tendance observée est similaire. En effet, comme dans l'étude précédente, on distingue dans un premier temps un pic de vitesse associée à la perturbation de la couche de béton fondu par le relâchement de gaz. La vitesse décroît ensuite légèrement lors de l'établissement de l'écoulement puis on observe un changement de pente et une augmentation progressive de la vitesse moyenne d'ablation. Dans le cas d'un béton silico-calcaire, on constate que la vitesse atteint un régime quasi-permanent où celle-ci fluctue quasi-périodiquement. Signalons ici que chaque période correspond à un cycle de détachement avec un pic de vitesse lors de chaque détachement. Pour ce type de béton, ce comportement souligne l'impact du relâchement des gaz de décomposition sur la cinétique d'ablation. Dans le cas d'un béton siliceux, des fluctuations de vitesse sont également présentes mais celles-ci sont de faible amplitude comparativement au cas d'un béton silico-calcaire. Pour ce béton, on constate en outre que la vitesse moyenne d'ablation décroît à nouveau progressivement. Bien que nous n'ayons pas d'explications précises sur ce comportement, nous pensons qu'il peut

être lié à la formation progressive d'une zone pâteuse au voisinage du front d'ablation qui entraîne alors une augmentation de la viscosité et, par conséquent, un ralentissement de l'écoulement dans cette région. Dans le cas d'un béton silico-calcaire, puisque la zone pâteuse est très fine, celle-ci n'impacte pas sur la cinétique d'ablation. Cette phase de fluctuation n'a pas été observée dans la précédente étude. De notre point de vue, cela s'explique par le caractère très visqueux du béton fondu pour cette température d'ablation qui a donc pour effet soit de retarder cette étape de fluctuation soit de l'atténuer comme nous l'observons ici dans le cas d'un béton siliceux. D'après ces premiers résultats, il serait intéressant de réaliser des simulations numériques sur des temps plus longs pour vérifier d'une part la persistance des fluctuations à $T_f = 2000$K et d'autre part, leur apparition à $T_f = 1700$K.

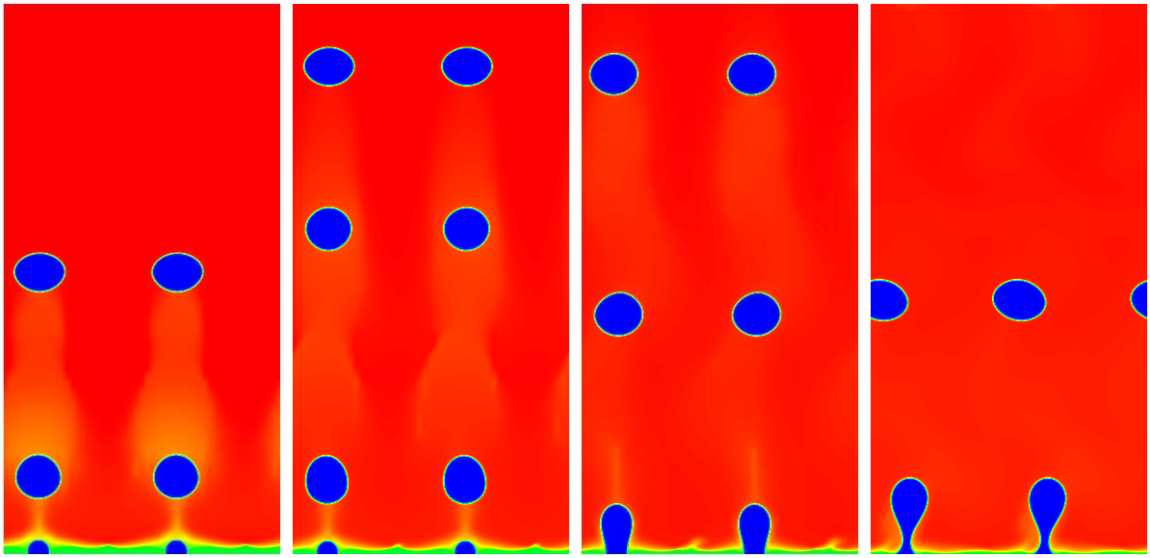
IV.2.3 Impact de la distribution des sites de relâchement de gaz

Dans cette partie, on se propose d'étudier l'impact de la distance entre les sites de relâchement de gaz sur la structure de la couche limite. Comme nous l'avons indiqué dans le chapitre introductif (*cf.* (I)), la distribution des sites dépend non seulement du type de béton mais aussi de la présence de fractures naturelles ou induites lors de l'interaction qui peuvent constituer un chemin préférentiel pour les gaz de décomposition. Les données proposées par Epstein [53] correspondant à une distance entre les sites de l'ordre 40mm constituent, à notre connaissance, l'unique référence sur le sujet dans le cadre de l'interaction corium béton. A partir de cette estimation, Epstein [53] a développé un modèle s'appuyant sur une structure de la couche limite qui correspond à une configuration horizontale dans laquelle les sites de relâchement sont supposés suffisamment loin les uns des autres pour que les bulles n'interagissent pas entre elles et qu'il puisse exister une fine couche de béton fondu d'où s'échappe une certaine quantité de panaches distants de quelques millimètres (*cf.* Fig.I.5). Cette structure de la couche limite n'a pas été observée dans la précédente étude (*cf.* (IV.2.2)) pour laquelle la distance entre les sites était de l'ordre de 20mm soit près de deux fois inférieure à celle considérée par Epstein. Comme cela a été discuté précédemment, la proximité des sites de relâchement de gaz peut être à l'origine du non développement de panaches de béton fondu au voisinage du front d'ablation. Afin de répondre à cette question, on considère ici une distance entre les sites de l'ordre de 70mm et on réalise des simulations pour une température d'ablation fixée à 1700K. Pour des raisons numériques, ces simulations ont été réalisées avec un pas de temps plus faible $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ et un coefficient $M^\star = 8 \times 10^2$. Le nombre de mailles dans la direction horizontale est de $\Delta_x = 72$. Enfin, comme dans l'étude précédente, les illustrations proposées consistent en une juxtaposition de deux domaines de calcul périodiques pour améliorer la visibilité des phénomènes observés.

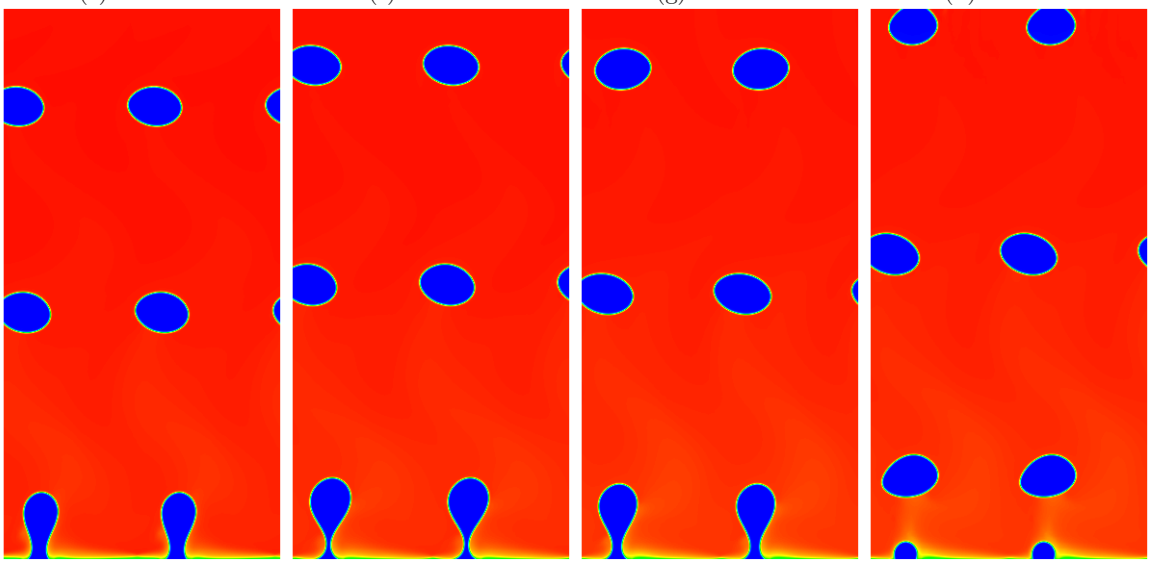
Les résultats présentés ici concernent les simulations numériques réalisées sur 4s dans le cas béton silico-calcaire et sur 3s dans le cas d'un béton siliceux. Les figures (IV.54) et (IV.55) présentent l'évolution de la densité du mélange, respectivement dans le cas d'un béton silico-calcaire et d'un béton siliceux. Comme dans l'étude précédente réalisée avec une distance entre les sites de l'ordre de 20mm, la déstabilisation de la couche de béton fondu par le bullage (*cf.* (b)) entraîne le relâchement de panaches de matériaux fondus entre chaque site de relâchement de gaz (*cf.* (c)). Etant donné l'éloignement des sites, ces panaches sont plus nombreux et de plus grande amplitude. Toutefois, comme précédemment, ces panaches perdent rapidement leur identité (*cf.* (d)-(e)). Un mouvement convectif *oscillant* prend place dans le bain de corium ce qui conduit à un ballotement latéral des bulles (de forme ellipsoïdale) lors de leur ascension (*cf.* (e)-(h)). Malgré l'éloignement des sites, on constate, ici encore, que le développement de panaches de matériaux fondus est contraint par les mouvements convectifs générés par le bullage. En effet, des cellules convectives, de taille différente suivant le type béton considéré, cisaillent la couche de béton fondu (*cf.* Fig.IV.58) et expulsent, en direction des sites, une certaine quantité de béton fondu qui est ensuite entraîné par les bulles dans le bain de corium où il va se mélanger.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s (c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

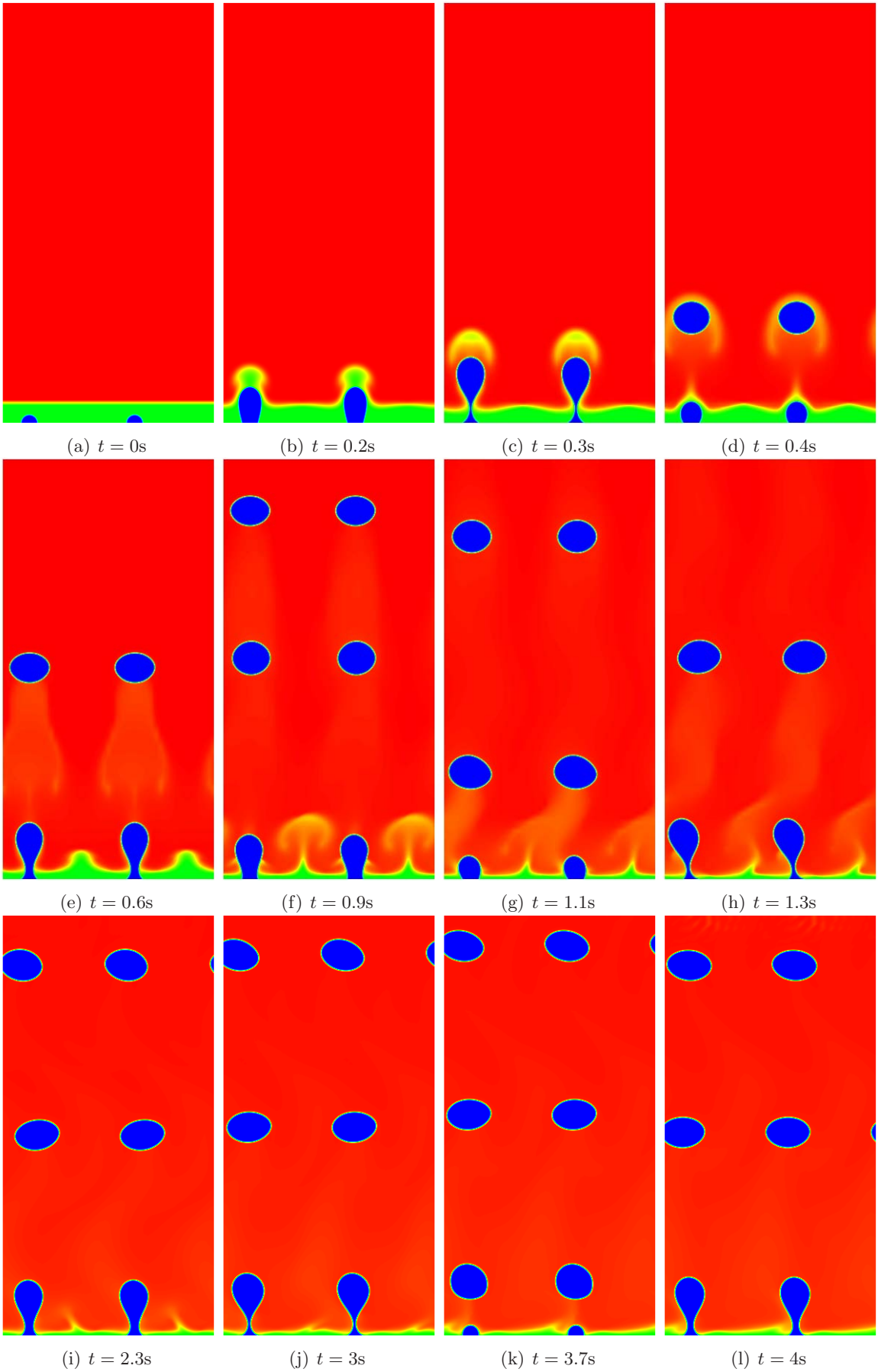


(e) $t = 0.6$s (f) $t = 0.9$s (g) $t = 1.1$s (h) $t = 1.5$s



(i) $t = 1.8$s (j) $t = 2.5$s (k) $t = 3.5$s (l) $t = 3.9$s

Fig. IV.48: Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton silico-calcaire.

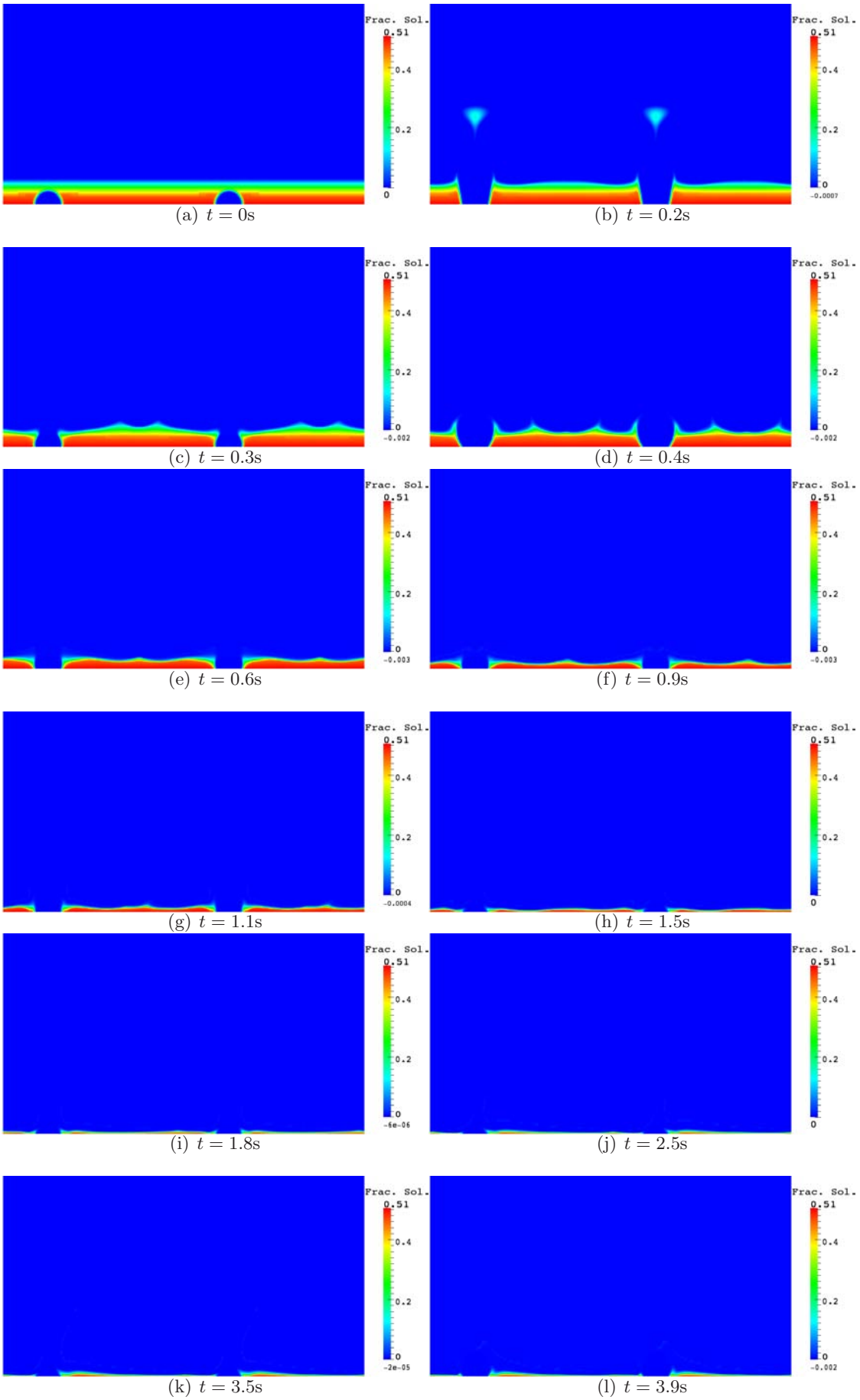


(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s (c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

(e) $t = 0.6$s (f) $t = 0.9$s (g) $t = 1.1$s (h) $t = 1.3$s

(i) $t = 2.3$s (j) $t = 3$s (k) $t = 3.7$s (l) $t = 4$s

Fig. IV.49: Evolution de la densité pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton siliceux.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s

(c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

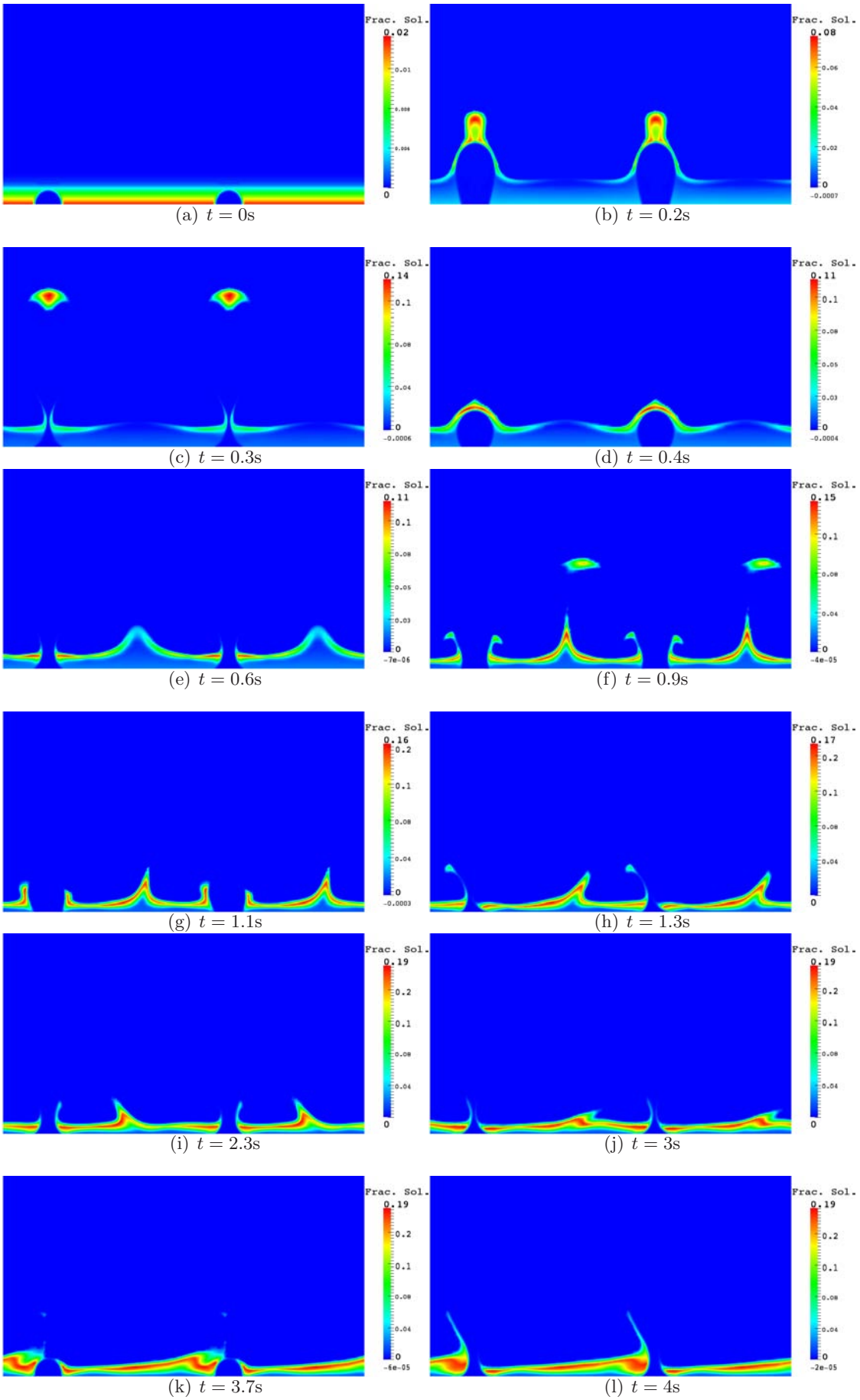
(e) $t = 0.6$s (f) $t = 0.9$s

(g) $t = 1.1$s (h) $t = 1.5$s

(i) $t = 1.8$s (j) $t = 2.5$s

(k) $t = 3.5$s (l) $t = 3.9$s

Fig. IV.50: Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton silico-calcaire.



(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s

(c) $t = 0.3$s (d) $t = 0.4$s

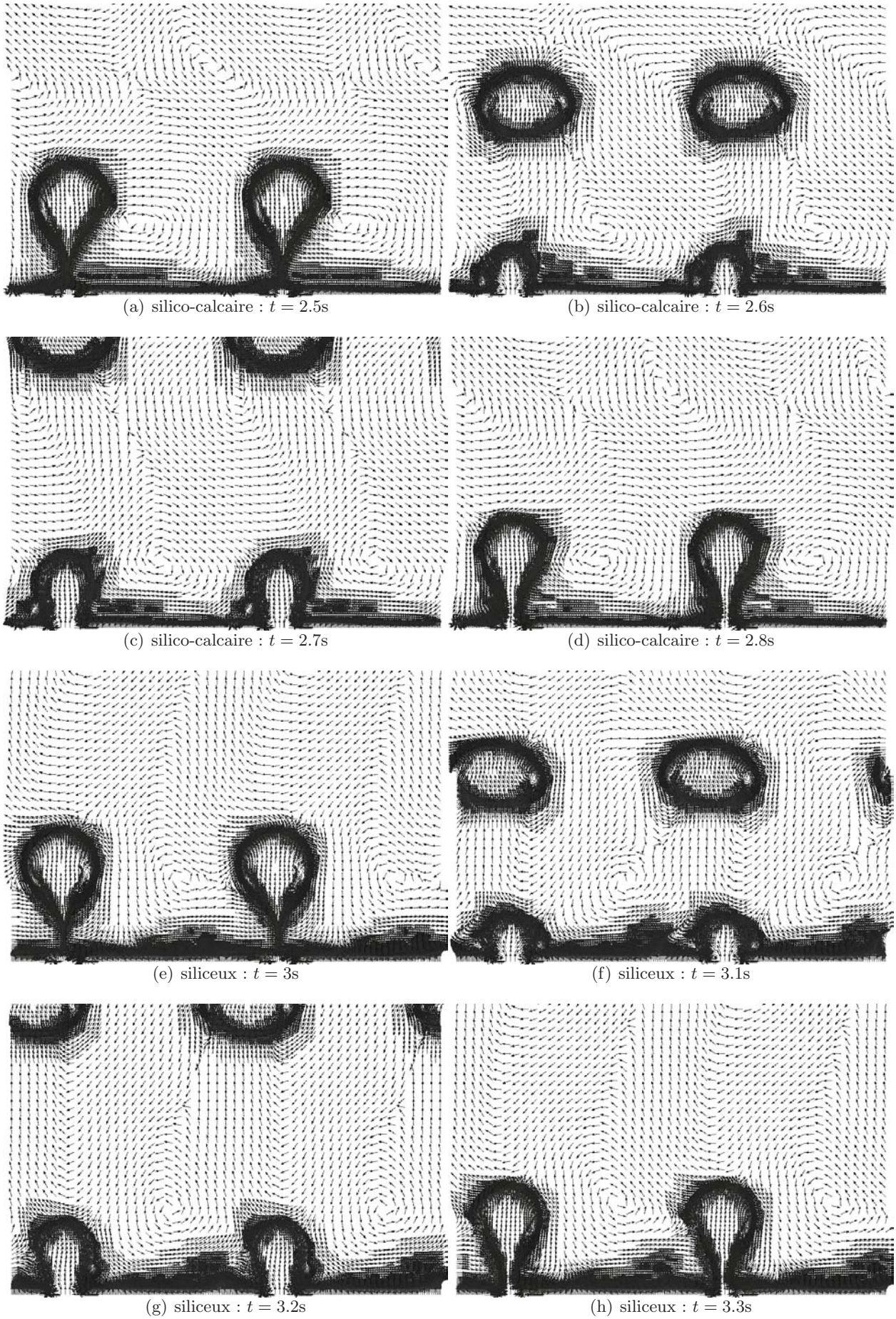
(e) $t = 0.6$s (f) $t = 0.9$s

(g) $t = 1.1$s (h) $t = 1.3$s

(i) $t = 2.3$s (j) $t = 3$s

(k) $t = 3.7$s (l) $t = 4$s

Fig. IV.51: Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: cas $T_f = 2000$K, béton siliceux.



(a) silico-calcaire : $t = 2.5$s (b) silico-calcaire : $t = 2.6$s

(c) silico-calcaire : $t = 2.7$s (d) silico-calcaire : $t = 2.8$s

(e) siliceux : $t = 3$s (f) siliceux : $t = 3.1$s

(g) siliceux : $t = 3.2$s (h) siliceux : $t = 3.3$s

Fig. IV.52: Champ de vitesse pour $t = \{2.5\text{s}, 2.6\text{s}, 2.7\text{s}, 2.8\text{s}\}$ dans le cas d'un béton silico-calcaire (a)-(d) et pour $t = \{3\text{s}, 3.1\text{s}, 3.2\text{s}, 3.3\text{s}\}$ dans le cas d'un béton siliceux (e)-(g)

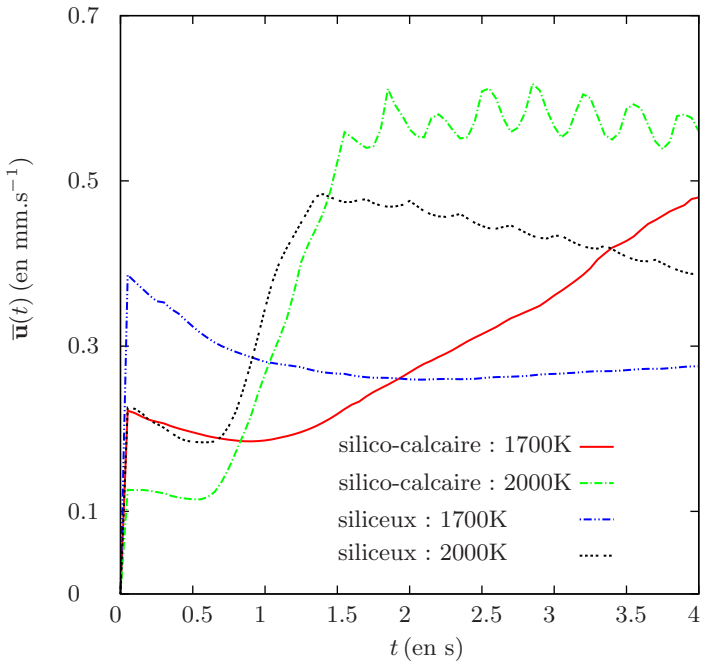
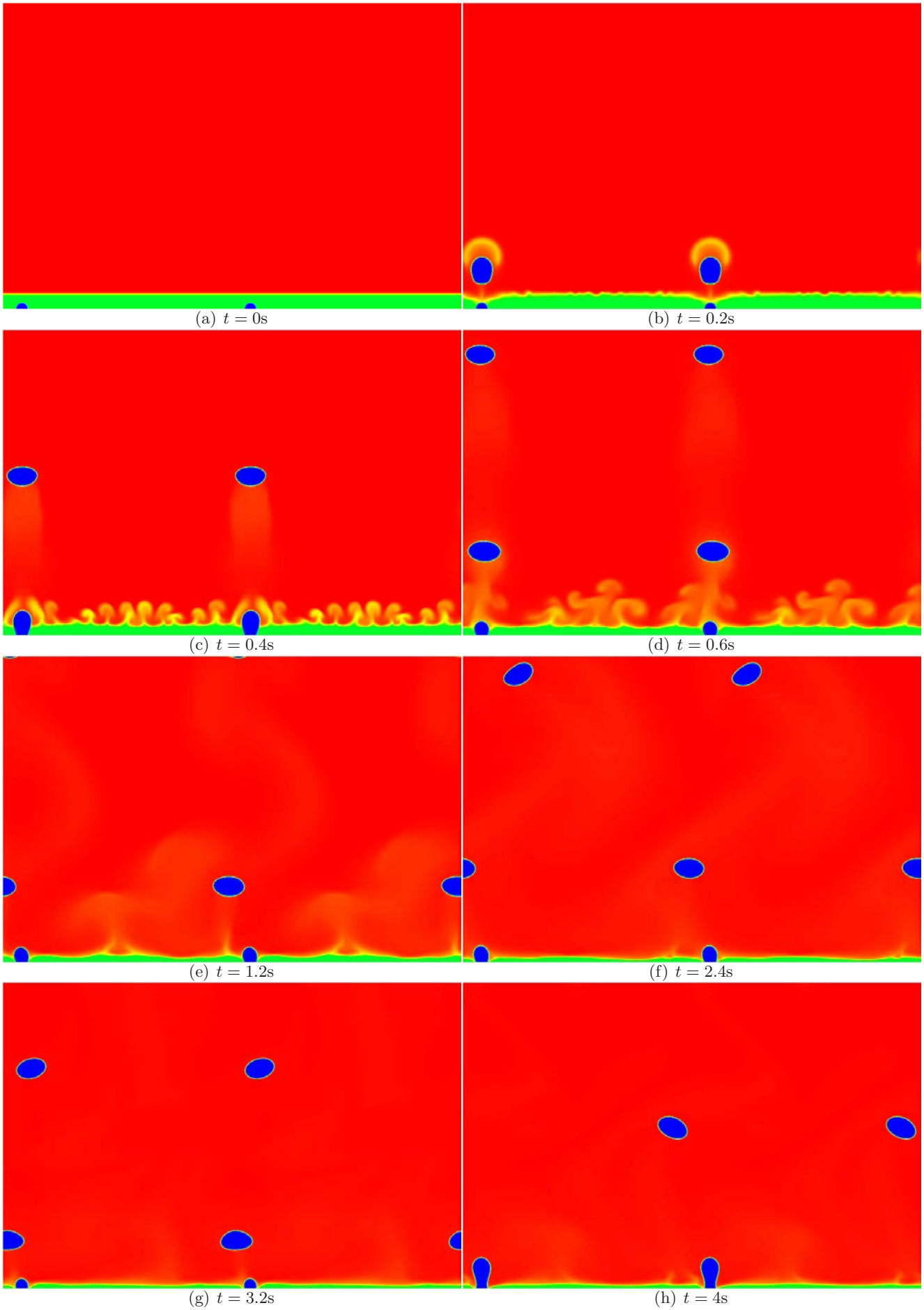


Fig. IV.53: Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1})

Les figures (IV.56) et (IV.57) montrent l'évolution de la fraction de solide présente dans le mélange. La tendance observée est similaire aux précédentes études. En effet, on observe, ici encore, une zone pâteuse entre chaque site de relâchement dont la structure dépend du type de béton. En particulier, dans le cas d'un béton siliceux, on constate la présence d'une zone quasi-liquide au sein de cette région pâteuse.

On s'intéresse désormais à l'évolution en temps de la vitesse moyenne d'ablation dont les profils sont représentés (en mm.s^{-1}) sur la figure (IV.59). Sur cette figure, nous avons également représentés les profils de vitesse obtenus précédemment pour une distance entre les sites de 20mm. On remarque tout d'abord que les valeurs de vitesse sont à nouveau de quelques dixièmes de millimètres par seconde et que, pour les deux types de bétons, la tendance observée dans les premiers instants est similaire au cas $d \sim 20$mm. On remarque ensuite que la vitesse moyenne d'ablation est plus faible pour une distance entre les sites de l'ordre de 70mm ce qui peut s'expliquer par une diminution de la fréquence des cycles de bulles comparativement au cas $d \sim 20$mm. Enfin, dans le cas d'un béton silico-calcaire, les résultats montrent la mise en place d'un régime quasi-permanent. Toutefois, il serait intéressant de réaliser des simulations numériques sur des temps plus longs pour vérifier la persistance de ces résultats.



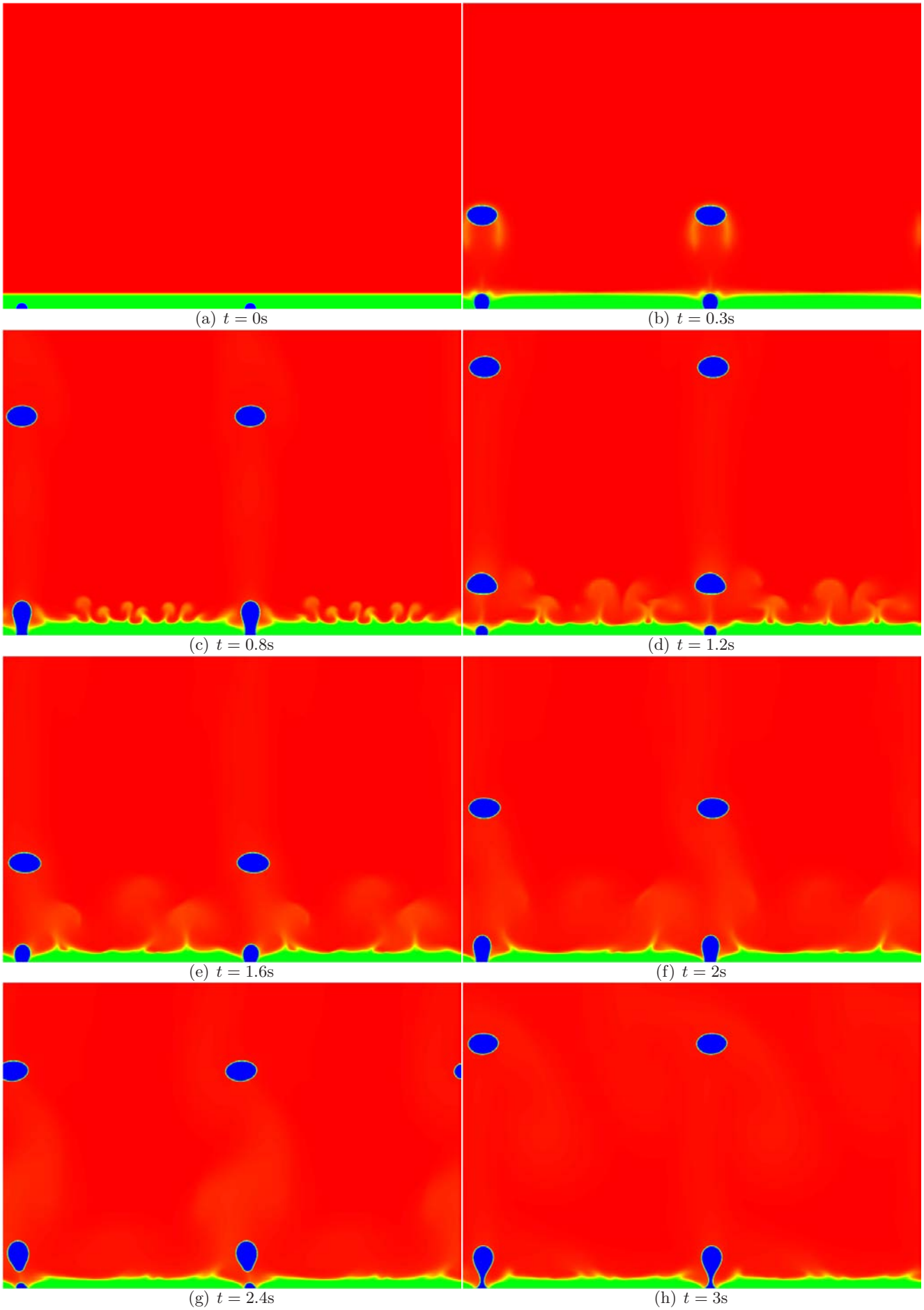
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s

(c) $t = 0.4$s (d) $t = 0.6$s

(e) $t = 1.2$s (f) $t = 2.4$s

(g) $t = 3.2$s (h) $t = 4$s

Fig. IV.54: Evolution de la densité pour $t \in [0, 3.9\text{s}]$: béton silico-calcaire, $d \sim 70$mm.



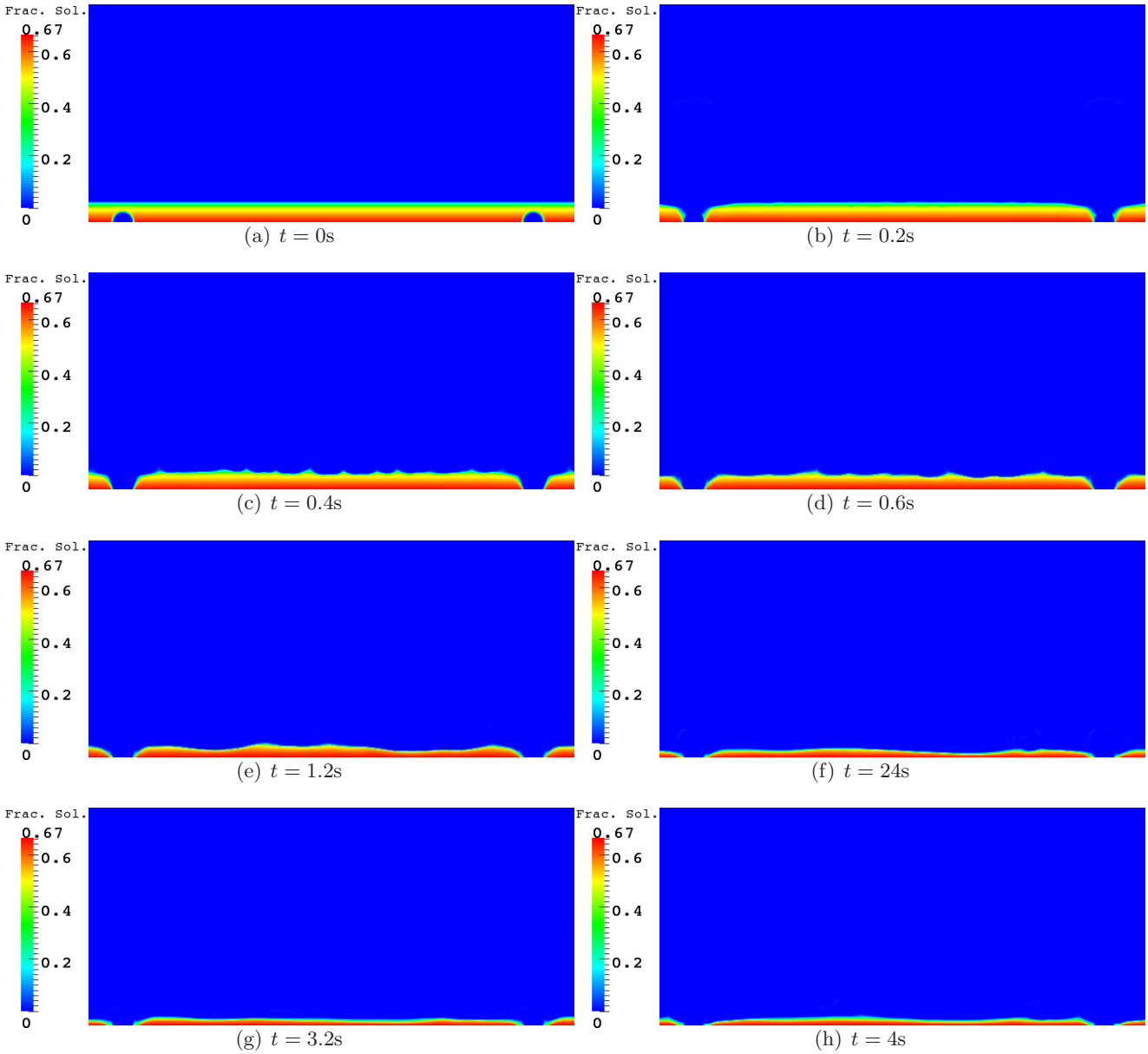
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.3$s

(c) $t = 0.8$s (d) $t = 1.2$s

(e) $t = 1.6$s (f) $t = 2$s

(g) $t = 2.4$s (h) $t = 3$s

Fig. IV.55: Evolution de la densité pour $t \in [0, 4\text{s}]$: béton siliceux, $d \sim 70$mm.



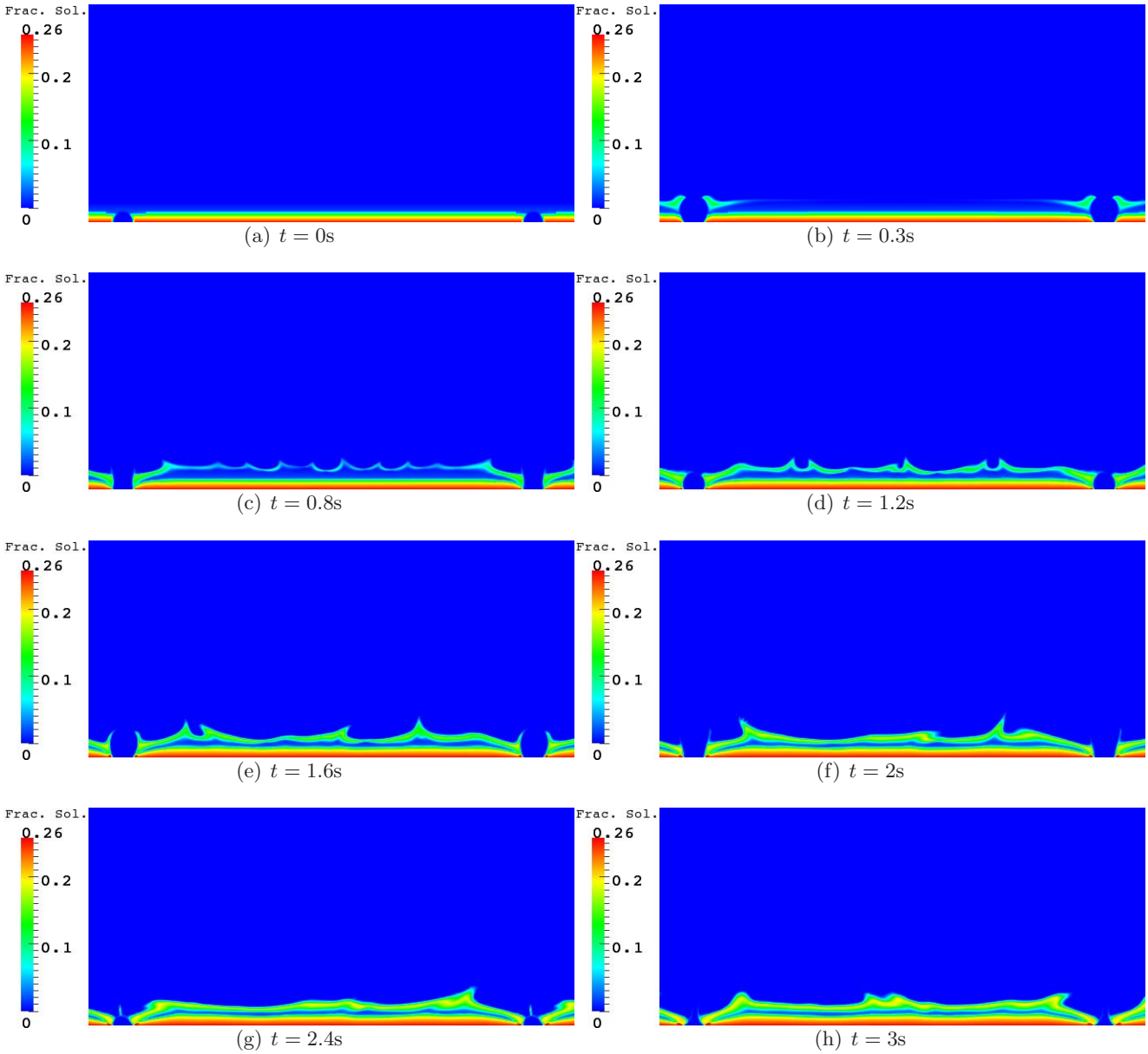
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.2$s

(c) $t = 0.4$s (d) $t = 0.6$s

(e) $t = 1.2$s (f) $t = 24$s

(g) $t = 3.2$s (h) $t = 4$s

Fig. IV.56: Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: béton silico-calcaire, $d \sim 70$mm.



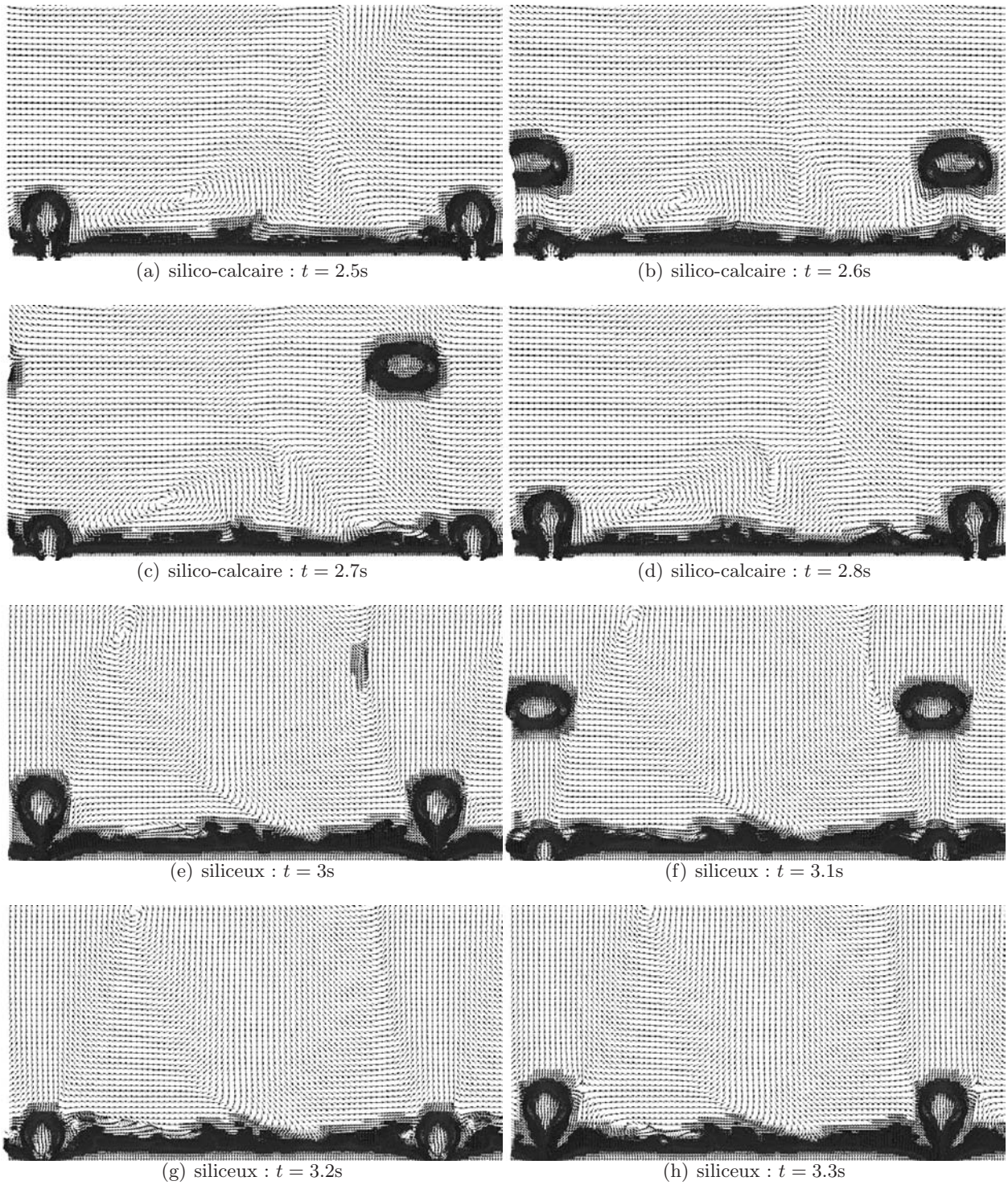
(a) $t = 0$s (b) $t = 0.3$s

(c) $t = 0.8$s (d) $t = 1.2$s

(e) $t = 1.6$s (f) $t = 2$s

(g) $t = 2.4$s (h) $t = 3$s

Fig. IV.57: Evolution de Φ_{sol} pour $t \in [0, 4\text{s}]$: béton siliceux, $d \sim 70$mm.



(a) silico-calcaire : $t = 2.5$s (b) silico-calcaire : $t = 2.6$s

(c) silico-calcaire : $t = 2.7$s (d) silico-calcaire : $t = 2.8$s

(e) siliceux : $t = 3$s (f) siliceux : $t = 3.1$s

(g) siliceux : $t = 3.2$s (h) siliceux : $t = 3.3$s

Fig. IV.58: Champ de vitesse pour $t = \{3.5\text{s}, 3.6\text{s}, 3.7\text{s}, 3.8\text{s}\}$ dans le cas d'un béton silico-calcaire (a)-(d) et pour $t = \{2.7\text{s}, 2.8\text{s}, 2.9\text{s}, 3\text{s}\}$ dans le cas d'un béton siliceux (e)-(g)

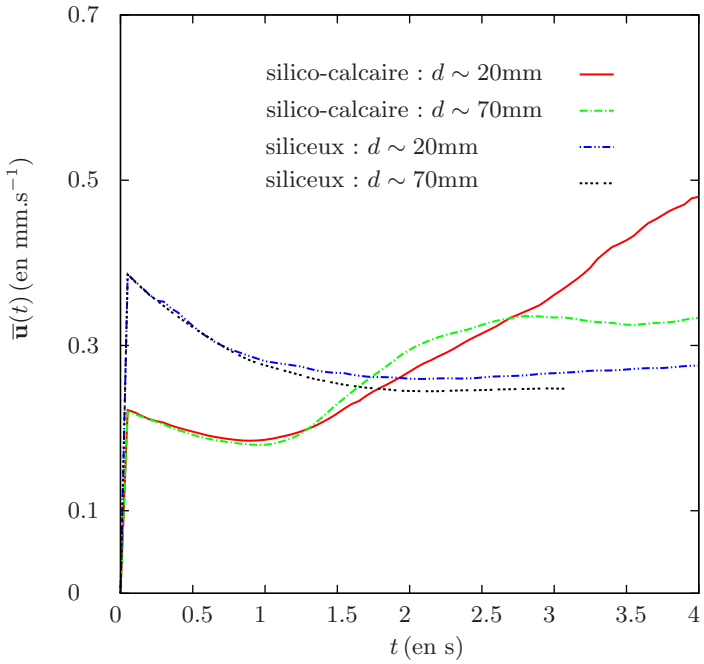


Fig. IV.59: Vitesse moyenne d'ablation (en mm.s^{-1})

IV.3 Conclusion et discussion des configurations étudiées

Nous avons abordé dans ce chapitre une étude de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation par simulation numérique directe. Nous nous sommes intéressé dans un premier temps aux aspects purement compositionnel (*i.e.* sans gaz de décomposition) et en particulier à l'impact des modèles de viscosité effective sur la structure locale de la couche limite. Deux études numériques ont été réalisées pour des configurations 2D et pour des parois ablatables horizontales. La première étude a été menée pour des contrastes de viscosité élevés avec les lois arithmétique et harmonique qui sont fréquemment utilisées dans le contexte multiphasique et/ou multiconstituant et qui peuvent être vues comme des bornes supérieures et inférieures du modèle d'Urbain généralement recommandé pour les bains silicatés. Un des intérêt de cette étude est que le contraste de viscosité a pu être fixé indépendamment de la température qui, d'un point de vue hydrodynamique, jouait donc ici le rôle d'un scalaire passif. Cette étude nous a permis de mettre en évidence l'impact du contraste de viscosité et du choix d'un modèle de viscosité sur la structure du mélange et sur la dynamique des instabilités hydrodynamiques alors que les références citées sur cette problématique s'intéressaient principalement à l'impact du contraste de densité.

Nous avons considéré dans une seconde étude le modèle de viscosité effective s'appuyant sur la loi d'Urbain et sur une correction fonction de la fraction solide dans le mélange. Devant les incertitudes associées à la température d'ablation du béton, nous avons étudié l'impact de plusieurs températures d'ablation choisies entre les températures de liquidus et de solidus du pseudo-binaire corium-béton. La température du mélange corium-béton "loin" du front d'ablation a été fixée pour l'ensemble des simulations à une valeur supérieure au liquidus. Cette étude, menée pour deux types de béton, siliceux et silico-calcaire, nous a permis d'obtenir des informations qualitatives sur la structure locale de la couche limite telle que la hauteur de la couche de béton fondu, la vitesse moyenne d'ablation, la topologie du front d'ablation ou encore la dynamique et la structure des panaches de béton fondu qui sont injectés dans le corium. Cette étude a mis en évidence la présence d'une zone pâteuse au voisinage du front dont la structure dépend du type de béton et dans laquelle le transfert de chaleur s'effectue principalement par diffusion.

De manière générale, la couche limite est constituée de quatre régions. La première région se situe au voisinage du front d'ablation et correspond à une fine couche de béton fondu dont l'épaisseur dépend non seulement du type de béton mais aussi de la température d'ablation. La seconde région se situe au dessus de cette couche et consiste en une zone de mélange d'où s'échappent des panaches de matériaux fondu qui sont rapidement balayés dès qu'ils montent dans le bain de corium. On distingue alors une troisième région dans laquelle les mouvements de convection compositionnelle sont importants et se distinguent selon deux types répartis en deux zones bien distinctes. D'une part, une zone dans laquelle des rouleaux de convection de plus ou moins grande taille prennent place et provoquent un ballotement latéral et aléatoire des panaches. D'autre part, une zone dans laquelle l'écoulement est principalement transverse et plus intense. Les mouvements convectifs observés dans ces zones contribuent non seulement au mélange des deux espèces mais aussi à l'homogénéisation de la température. On rappelle ici que ce double processus de mélange est également observé expérimentalement dans le régime dit *turbulent* et est notamment appelé "mélange convectif" dans [59]. Enfin, la quatrième région est principalement constituée de corium.

Dans la continuité de cette première étude, nous avons abordé les effets couplés liés au relâchement des gaz de décomposition du béton et étudié leur impact sur la structure de la couche limite. Ici encore, la température du mélange corium-béton "loin" du front d'ablation a été fixée à une valeur supérieure au liquidus. Une première étude a été menée sur l'influence de la température d'ablation sur la dynamique de l'écoulement et sur la structure de la couche limite pour une distribution de sites donnée. Comme dans le cas purement compositionnel, cette étude nous a permis de mettre en évidence la présence d'une zone pâteuse au voisinage du front dont la structure dépend également du type de béton. En revanche, la structure de la couche limite et le mécanisme de

mélange diffèrent sensiblement de ce que l'on a observé dans le cas purement compositionnel. En effet, la proximité des sites de relâchement contraint le développement de panaches de béton fondu ainsi que la mise en place d'un mouvement de convection compositionnelle intense. A l'échelle de la bulle, entre chaque site de relâchement, il a été mis en évidence la présence de cellules convectives qui cisaillent la couche de béton fondu et l'expulsent en direction des sites d'où il est transporté lors de chaque détachement. Cette structure de la couche limite diffère également de celle proposée par Epstein [53] pour laquelle les sites de relâchement sont supposés suffisamment loin les uns des autres pour que les bulles n'interagissent pas entre elles et qu'il puisse exister une fine couche de béton fondu d'où s'échappe une certaine quantité panaches distants de quelques millimètres. Pour vérifier la persistance de ce comportement, une seconde étude a ensuite été menée pour une distance entre les sites plus grande pour une température d'ablation fixée. Cette étude a également montré que les mouvements convectifs générés par le bullage contraignaient le développement de panaches de matériaux fondus au dessus de la couche de béton fondu.

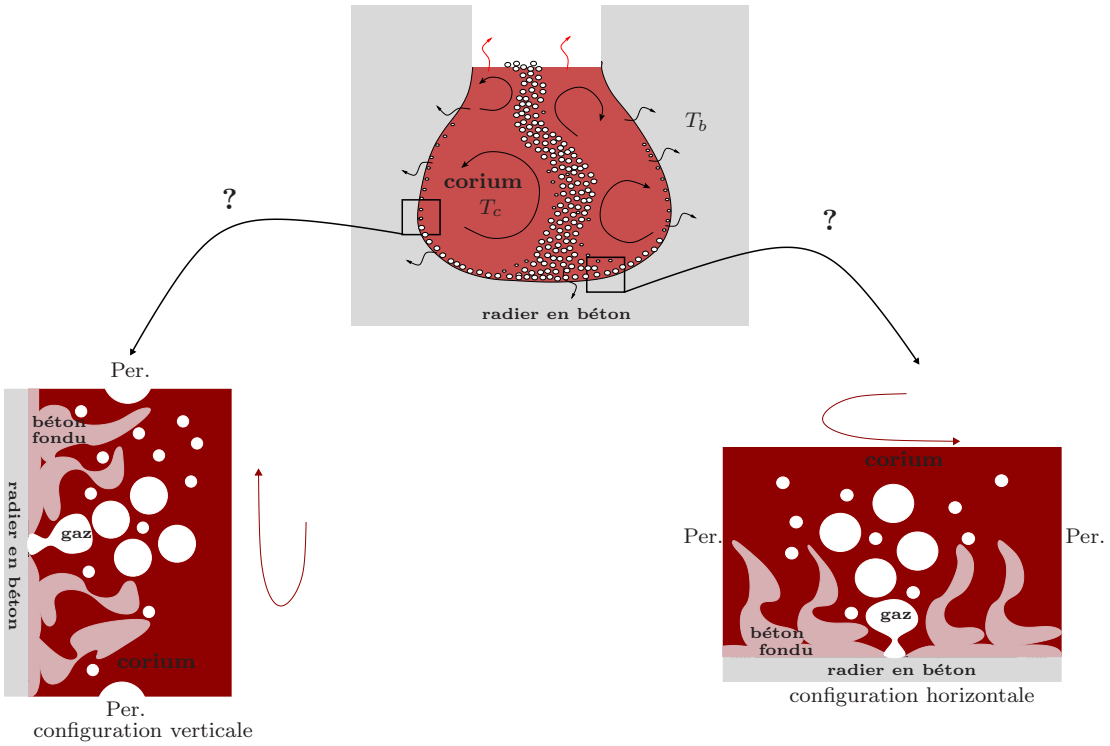


Fig. IV.60: Représentation schématique des configurations horizontale et verticale de la structure de la couche limite

Les résultats présentés dans ce chapitre constituent une première contribution à la description de la structure locale de la couche limite au voisinage du front d'ablation. Les différentes études menées ici n'ont pas révélé la présence de croûte au voisinage du front d'ablation mais plutôt d'une zone pâteuse conductive. Nous rappelons que cette première étude menée dans le cas 2D et pour des parois ablatables horizontales est essentiellement qualitative. Afin de pouvoir confirmer ces résultats, il serait intéressant dans un premier temps de disposer d'une tabulation plus précise de la fraction volumique de solide qui a été déterminée ici pour simplifier en utilisant des interpolations linéaires des pré-calculs thermodynamiques proposés dans [67] pour deux types de béton. Nous rappelons également que les études proposés dans ce chapitre sont essentiellement qualitatives en raison du fait que les maillages utilisés peuvent être sous résolus dans les phases pour capturer toutes les structures de l'écoulement. Même si les diffusivités effectives calculées par la méthode

de stabilisation entropique peuvent être vues, de par leur formulation, comme des diffusivités sous mailles lorsque les échelles dans les phases ne sont pas totalement résolues, il serait intéressant de quantifier leur impact sur les résultats. La présence de croûte au voisinage du front est en effet sensiblement liée à la combinaison des profils de température et de composition du mélange. Comme ces profils dépendent des valeurs des coefficients de diffusion massique et thermique, les valeurs calculées pour les diffusivités effectives peuvent par conséquent influencer sensiblement les résultats. Pour répondre à cette question, une étude de convergence au maillage pourrait être menée. Nous rappelons enfin que l'ensemble des études présentées ici ont été réalisées pour des configurations horizontales 2D périodiques et sans cisaillement moyen ou écoulement moyen. Afin de prendre en compte les structures cohérentes de l'écoulement aux échelles de descriptions supérieures, il serait intéressant d'effectuer des simulations en prenant en compte un gradient de pression moyen issu par exemple de pré-calculs du code TOPASE comme ceux réalisés dans [50].

La question des conditions aux limites se pose également pour des configurations verticales ou inclinées (*cf.* Fig.IV.60). Par exemple, pour des configurations horizontales, si des conditions de périodicité sur les frontières latérales s'avèrent être un choix naturel, celui-ci semble moins évident pour des configurations verticales ou inclinées (prise en compte de couches limites thermique ou massique, ...). Si l'on considère des conditions de périodicité, il s'avère nécessaire dans ce cas d'imposer un gradient de pression moyen pour stabiliser l'écoulement descendant dû à la gravité. Une autre solution possible consisterait à imposer un écoulement de référence pouvant, par exemple, être motivé par des pré-calculs réalisés aux échelles de descriptions supérieures. Nous signalons ici que des calculs préliminaires ont été réalisés dans des configurations verticales et pour des conditions de périodicité. Toutefois, ayant manqué de temps pour les faire aboutir, nous avons choisi de ne pas les présenter dans ce travail. Les résultats préliminaires semblent montrer que, dans le cas purement compositionnel, les forces de gravité stabilisent l'écoulement et qu'il y a pas d'effet visibles liés aux instabilités de Kelvin-Helmholtz associées au cisaillement de la couche de béton fondu. En revanche, dans le cas diphasique compositionnel, le relâchement des gaz de décomposition perturbe la couche de béton fondu et entraîne rapidement le développement d'instabilités.

Chapitre V

Conclusion générale et perspectives

L'objectif de ce travail était de contribuer à la modélisation des échanges de masse et de chaleur dans le cadre de la problématique de l'interaction corium-béton (*cf.* chapitre (I)). Cette étude s'inscrit dans le cadre général d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges, c'est-à-dire de l'échelle locale associée au voisinage du front d'ablation jusqu'à l'échelle du code d'évaluation réacteur, afin de contribuer à l'analyse et l'interprétation des programmes expérimentaux menés sur cette problématique et, à terme, de proposer des modèles d'échanges pour les codes d'évaluation réacteur. Nous avons indiqué dans le chapitre d'introduction générale qu'une telle description multi-échelle des échanges soulevait le problème de la description locale de l'écoulement multiphasique multiconstituant ainsi que le problème bien connu du changement d'échelle et, en particulier, le passage de l'échelle locale à l'échelle de description supérieure dite macroscopique qui correspond ici à une échelle intermédiaire entre l'échelle locale et celle du code d'évaluation réacteur associée aux structures cohérentes dans le bain de corium générées principalement par les gaz de décomposition. Parmi les difficultés associées au changement d'échelle, nous nous sommes particulièrement intéressé ici à la problématique de la construction de conditions aux limites effectives ou de lois de parois pour les modèles macroscopiques.

La démarche suivie dans ce travail apporte trois contributions. La première contribution est associée au problème du changement d'échelle et concerne le développement de conditions aux limites effectives. La deuxième contribution est associée au problème de la description à l'échelle locale et concerne la construction d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation. Enfin, la dernière contribution de cette étude est associée à la description de la couche limite au voisinage du front d'ablation et concerne les premiers résultats obtenus à partir de l'outil de simulation numérique directe proposé.

Ainsi, nous avons abordé dans le chapitre (II) le problème de la construction de conditions aux limites effectives. Devant la complexité du problème multiphasique multiconstituant posé au voisinage du front d'ablation, nous avons abordé un problème plus simple d'écoulement laminaire de convection naturelle avec transferts de chaleur sur parois rugueuses dans le cadre de l'approximation de Boussinesq. Même si le problème traité reste encore éloigné des applications visées, cette contribution doit être vue comme une première étape vers la construction de lois de parois pour un modèle macroscopique d'écoulement compositionnel et, à terme, diphasique compositionnel. Nous avons traité ce problème par une technique de changement d'échelle basée sur le concept de décomposition de domaine (vision qui se prête bien à l'inclusion de résultats de simulations directes locales, comme ceux mis en place par la suite). Cette méthode a permis de construire une solution approchée à l'échelle des rugosités et de développer des conditions aux limites effectives de type Navier pour la quantité de mouvement et de type Robin pour le transfert de chaleur qui sont imposées sur une surface effective lisse homogène. Les propriétés effectives associées, c'est-à-dire un coefficient de frottement et un coefficient de transfert de chaleur effectifs, sont obtenues en

résolvant des problèmes de fermeture locaux sur un motif représentatif des rugosités. Nous avons montré, d'une part, que le coefficient de frottement effectif dépendait uniquement de la structure des rugosités et, d'autre part, que, dans le cas laminaire, l'écoulement a une très faible influence sur le coefficient de transfert de chaleur effectif qui peut être approché par sa valeur dans le cas purement diffusif. Nous avons ensuite testé les conditions effectives sur un problème de convection naturelle dans une cavité rugueuse différentiellement chauffée et la qualité de l'approximation proposée a été estimée en comparant, pour différents nombres de Rayleigh, les calculs effectifs à des calculs directs tenant compte des rugosités. Enfin, une étude numérique a été menée sur le problème générique important du positionnement de la surface effective. Cela a permis de mettre en évidence que les transferts de quantité de mouvement et de chaleur sont fortement altérés par le positionnement de la surface effective dont la position "optimale" semble correspondre à la hauteur effective où la loi de Navier dégénère en une condition d'adhérence.

Dans le cas plus complexe des écoulements multiphasiques, le développement de conditions aux limites effectives pour les outils existants aux échelles de description supérieures nécessite au préalable de disposer d'un outil de simulation numérique directe à la petite échelle. Nous avons vu qu'au voisinage du front d'ablation l'écoulement était principalement caractérisé par la présence d'une phase gazeuse associée aux gaz de décomposition du béton et d'une phase liquide constituée par le mélange issu de la fusion du coeur, le corium, et des produits liquides de décomposition du béton. Dans ce travail, nous n'avons pas décrit les différents phénomènes d'oxydation et nous avons assimilé les gaz de décomposition à une seule et même phase gazeuse. Nous avons en outre adopté une description classique de la phase liquide qui consiste à décrire le mélange multiphasique multiconstituant corium-béton selon un pseudo-binaire. D'un point de vue de la simulation numérique directe, l'objectif a consisté à construire un outil couplant un problème diphasique incompressible sans changement de phase à un problème de mélange de deux fluides totalement miscibles dans l'une des deux phases.

La construction de cet outil a fait l'objet du chapitre (III). L'outil proposé s'inscrit dans le cadre des méthodes à interfaces diffuses et correspond à un modèle de Cahn-Hilliard diphasique compositionnel s'appuyant, d'une part, sur une description du système selon trois paramètres d'ordre associés respectivement aux fractions volumiques du gaz et aux deux espèces miscibles de la phase liquide et, d'autre part, sur une décomposition de l'énergie libre selon une contribution diphasique et une contribution compositionnelle. Les équations de transport du modèle ont été dérivées dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles selon deux contraintes. La première contrainte, commune aux différents modèles multiphasiques proposés, impose que la somme des paramètres d'ordre vaille un à chaque instant et en tout point. La seconde contrainte, spécifique à la classe d'écoulements étudiés, est associée à la définition de la vitesse de mélange. A cet effet, nous avons adopté une définition classique pour la partie compositionnelle correspondant à une moyenne barycentrique de la vitesse du mélange pondérée par les masses volumiques alors que la définition de la vitesse du mélange dans le cas diphasique correspond à une moyenne volumique permettant dans ce cas de conserver une vitesse de mélange à divergence nulle. Le modèle proposé s'appuie également sur une décomposition originale de l'énergie libre selon une contribution diphasique et une contribution compositionnelle lui permettant de dégénérer correctement vers un modèle de Cahn-Hilliard diphasique, lorsque l'un des constituants liquides est absent, et vers un modèle de diffusion massique lorsque la phase non-miscible est absente. En vue des applications traitées dans cette étude, nous avons supposé lors du développement du modèle que les tensions de surface entre les deux constituants miscibles et la phase non miscible étaient identiques. Le formalisme employé dans ce travail permet néanmoins de prendre en compte deux tensions de surface et nous avons dans ce sens présenté une énergie de Cahn-Hilliard pour un mélange diphasique compositionnel à deux tensions de surface. Nous avons ensuite proposé une forme alternative de ce modèle où les équations de Cahn-Hilliard sont reformulées avec une vitesse à divergence nulle et les équa-

tions de Navier-Stokes sont réécrites sous une forme dite potentielle faisant intervenir le gradient du potentiel chimique dit généralisé. Sous cette forme, les équations de Cahn-Hilliard permettent d'assurer naturellement que la somme des paramètres d'ordre vaille un lors de la résolution du problème discret. Une analyse asymptotique, réalisée dans le cadre de la méthode des développements asymptotiques raccordés, a permis de montrer formellement que le modèle converge bien vers un modèle compositionnel couplé aux équations de Navier-Stokes et à une équation pour la température lorsque les interfaces sont assimilées à des surfaces de discontinuité douées de propriétés en excès. Cette analyse dite "sharp" nous a également permis d'exprimer la mobilité diphasique en fonction d'un nombre de Péclet d'interface. Le modèle a ensuite été discrétisé en temps selon une méthode à pas fractionnaire découplant les équations de Cahn-Hilliard, de Navier-Stokes et d'énergie et la discrétisation en espace correspond à une méthode éléments finis dans le cadre de l'approximation de Galerkin. La discrétisation proposée s'appuie essentiellement sur le schéma de discrétisation adopté pour le modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes triphasique développé par Lapuerta *& al.* [25] et permet au problème discret de vérifier en particulier les propriétés de consistance du modèle continu ainsi que la contrainte associée à la somme des paramètres d'ordre. Pour le bilan de quantité de mouvement, nous avons choisi, pour simplifier la résolution et réduire significativement le temps de calcul, une méthode de projection incrémentale. En ce qui concerne les équations de Cahn-Hilliard, nous avons montré que la résolution d'un système à seulement deux équations pouvait conduire dans certains cas diphasiques à l'apparition de la phase absente lorsque celle-ci correspondait à l'équation non résolue. Nous avons alors montré numériquement que la résolution de l'ensemble des équations de Cahn-Hilliard permettait de réduire sensiblement ces instabilités. Nous avons ensuite présenté une méthode de stabilisation par viscosité entropique récemment proposée par Guermond *& al.* (*e.g.* [74, 75]) dont l'intérêt pratique est qu'elle permet un calcul simple de la viscosité artificielle tout en laissant inchangée la formulation variationnelle du problème considéré ainsi que son algorithme de résolution. Nous avons signalé que cette viscosité effective pouvait également être vue, de par sa formulation, comme une viscosité de sous-maille [73, 76] lorsque les échelles ne sont pas suffisamment résolues dans les phases. Dans ce cas, la méthode proposée correspond à une méthode de simulation numérique directe des interfaces avec viscosité de sous-maille [16]. Cette méthode a ensuite été appliquée à la contribution compositionnelle des équations de Cahn-Hilliard, aux équations de Navier-Stokes et à l'équation pour la température. Dans l'optique d'améliorer le comportement des interfaces en sortie du domaine de calcul, nous avons également proposé une approche originale pour le traitement des conditions aux limites artificielles de sortie. Pour les équations de Cahn-Hilliard, il s'agit de remplacer la condition à la limite de sortie *ad-hoc* de type Neumann homogène par une condition à la limite qui permette de translater les interfaces à travers la paroi artificielle tandis que, pour les équations de Navier-Stokes, cela consiste en un algorithme de séparation de pression basé sur un schéma à pas fractionnaire en deux étapes : la première étape permet de prendre en compte le saut de pression induit par les forces capillaires dans une pression capillaire obtenue en résolvant un problème de type Darcy et la seconde étape consiste à résoudre les équations de Navier-Stokes avec une pression dynamique définie comme la différence de la pression et de la pression capillaire. Enfin, plusieurs applications ont été présentées ce qui a permis, d'une part, de vérifier les propriétés de consistance du modèle dans les cas purement diphasique et purement compositionnel et, d'autre part, de montrer les potentialités d'applications de cet outil sur des problèmes diphasiques compositionnels.

Nous avons ensuite abordé dans le chapitre (IV) une étude de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation par simulation numérique directe à partir de l'outil développé dans le chapitre (III). Nous nous sommes intéressé dans un premier temps aux aspects purement compositionnels (*i.e.* sans gaz de décomposition) et, en particulier, à l'impact des modèles de viscosité effective sur la structure locale de la couche limite. Cette étude nous a permis d'obtenir des informations qualitatives sur la structure locale de la couche limite telle que la hauteur de la

couche de béton fondu, la vitesse moyenne d'ablation, la topologie du front d'ablation ou encore la dynamique et la structure des panaches de béton fondu qui sont injectés dans le corium. Cette étude a mis en évidence, d'une part, la présence d'une zone pâteuse conductive au voisinage du front, dont la structure dépend du type de béton et, d'autre part, une structure de la couche limite selon quatre régions. La première région correspond à une fine couche de béton fondu dont l'épaisseur dépend non seulement du type de béton (effets de la silice) mais aussi de la température d'ablation effective utilisée pour la description du front à partir d'une condition de Stefan. La seconde région se situe au dessus de cette couche et consiste en une zone de mélange d'où s'échappent des panaches de matériaux fondu qui sont rapidement balayés dès qu'ils montent dans le bain de corium. La troisième région est le lieu d'un mouvement de convection compositionnelle intense qui contribue non seulement au mélange des deux espèces mais aussi à l'homogénéisation de la température. Nous avons observé que ces mouvements se distinguent selon deux types répartis en deux zones bien distinctes : d'une part, une zone dans laquelle des rouleaux de convection de plus ou moins grande taille prennent place et provoquent un ballotement latéral et aléatoire des panaches et, d'autre part, une zone dans laquelle l'écoulement est principalement transverse et plus intense. Enfin, la quatrième région est principalement constituée de corium.

Nous avons abordé dans la continuité de cette première étude les effets couplés liés au relâchement des gaz de décomposition du béton et étudié leur impact sur la structure de la couche limite. Cette étude a révélé, comme dans le cas purement compositionnel, la présence d'une zone pâteuse conductive au voisinage du front dont la structure dépend également du type de béton. En revanche, la structure de la couche limite et le mécanisme de mélange diffèrent sensiblement de ce que l'on a observé dans le cas purement compositionnel et présentent une faible dépendance vis-à-vis de la distance entre les sites de relâchement de gaz. En effet, nous avons montré qu'une distance réduite ou élevée (comparativement à celle proposée par Epstein [53]) entre les sites de relâchement des bulles contraignait le développement de panaches de béton fondu ainsi que la mise en place d'un mouvement de convection compositionnelle intense. Dans ce cas, il a été mis en évidence, entre chaque site de relâchement, la présence de cellules convectives qui cisaillent la couche de béton fondu et l'expulsent en direction des sites d'où il est transporté lors de chaque détachement. La structure de la couche limite observée dans cette étude diffère également de celle adoptée par Epstein [53] qui correspond à une configuration horizontale dans laquelle les sites de relâchement sont supposés suffisamment loin les uns des autres pour que les bulles n'interagissent pas entre elles et qu'il puisse exister une fine couche de béton fondu d'où s'échappe une certaine quantité de panches distants de quelques millimètres.

Ce travail de thèse apporte une nouvelle contribution dans le cadre d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges de masse et de chaleur sur la problématique de l'interaction corium-béton. La démarche suivie et les résultats proposés dans ce travail ouvrent de multiples perspectives tant d'un point de vue de la construction de conditions aux limites effectives que d'un point de vue de la simulation numérique directe des écoulements diphasiques compositionnels.

Concernant la construction de conditions aux limites effectives, nous avons précisé que notre contribution constituait une première étape vers la construction de lois de parois pour un modèle macroscopique d'écoulement diphasique compositionnel. Toutefois, le problème considéré couplant l'écoulement au transport d'un scalaire non-passif (ici la température) constitue un problème modèle pour l'étude et la modélisation des aspects hétérogènes des bétons des réacteurs à eau sous pression actuels ou de nouvelle génération de type EPR. Par exemple, pour les bétons de type siliceux riches en agrégats de silice à haut point de fusion comparativement au mortier, cette approche pourrait être suivie pour construire des conditions aux limites effectives mettant en jeu, par exemple, une température de fusion effective fonction de la distribution des agrégats et de la structure des rugosités. Il serait également intéressant par la suite d'étendre le concept de modèles de

surface effective à des problèmes plus complexes mettant en jeu, par exemple, des écoulements multiphasiques et/ou un processus d'ablation. Cela permettrait, à terme, de construire des conditions aux limites effectives pour les modèles macroscopiques mis en oeuvre aux échelles de description supérieures.

Pour ce qui concerne l'outil de simulation numérique proposé, il nous semblerait intéressant dans un premier temps d'étudier l'impact des contributions proportionnelles au gradient du potentiel chimique généralisé que nous avons négligées dans les formes alternatives du bilan de masse (III.105d) et du bilan de quantité de mouvement (III.109). Il serait également intéressant d'étudier l'influence des termes triphasiques dans l'expression des mobilités $\mathcal{M}_i$ avec $i = 1, 2, 3$ sur la dynamique des interfaces. Concernant les mobilités, l'analyse "sharp" du modèle nous a permis d'exprimer la mobilité diphasique en fonction d'un nombre de Péclet d'interface. Comme cette analyse correspond à une approximation d'ordre zéro, il serait intéressant par la suite d'étendre cette analyse asymptotique aux ordres supérieurs (*e.g.* analyse dite "thin" [96]) afin d'obtenir par exemple une expression particulière de la mobilité ou de la viscosité du mélange en fonction des paramètres d'ordre. A moyen terme, il serait intéressant d'étendre le modèle aux cas de deux tensions de surface en suivant le même formalisme et en s'appuyant sur l'énergie de Cahn-Hilliard pour un mélange diphasique compositionnel à deux tensions de surface proposée dans ce travail. Une telle étude ne devrait, à priori, pas poser de difficulté. A plus long terme, en s'appuyant sur les travaux de Lapuerta [106], on pourrait également envisager le développement d'un modèle pour trois phases non miscibles où l'une d'entre elles est constituée de deux constituants.

D'un point de vue purement numérique, bien que les résultats obtenus avec l'outil développé soient satisfaisants étant donné les contrastes importants des propriétés physiques et les gammes d'écoulement étudiées, un travail approfondi doit être mené pour améliorer le schéma numérique proposé. En premier lieu, il serait nécessaire d'analyser le modèle discret à seulement deux équations de Cahn-Hilliard afin de comprendre le phénomène de développement des instabilités numériques au voisinage de l'interface liquide-gaz (*cf.* section (III.3.1)). Pour cela, on pourrait par exemple s'appuyer sur l'étude de consistance dynamique réalisée par Lapuerta [106] dans le cadre d'un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes pour trois fluides non miscibles. En terme de performance, l'utilisation d'un modèle discret à seulement deux équations de Cahn-Hilliard permettrait de réduire sensiblement le coût numérique. Un travail doit également être mené sur la stabilisation de la contribution compositionnelle des équations de Cahn-Hilliard dans la phase gazeuse en présence d'un faible coefficient de diffusion massique. Dans ce cas, il serait au préalable nécessaire de comprendre pourquoi la méthode de stabilisation entropique conduit à de très faibles diffusivités effectives dans le gaz. Enfin, il serait intéressant de reprendre les travaux récemment proposés dans [115] dans le cadre d'un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes pour un mélange de trois phases non miscibles afin d'étendre nos études à des géométries tridimensionnelles sans symétrie. On pourrait également envisager de passer à des discrétisations d'ordre moins élevées pour la vitesse (*e.g.* discrétisation stabilisée pour le problème vitesse-pression avec des éléments de même ordre d'approximation) afin de réduire sensiblement le temps de calcul.

Les résultats proposés dans le chapitre (IV) apportent une première contribution à la description de la couche limite au voisinage du front d'ablation. Ces résultats, qui restent néanmoins à confirmer, ouvrent de nombreuses perspectives.

Dans le cadre des différentes études menées dans le chapitre (IV), nous n'avons pas observé la présence de croûte au voisinage du front d'ablation mais plutôt d'une zone pâteuse conductive. Pour confirmer ce résultat, nous avons indiqué qu'il serait intéressant dans un premier temps de disposer d'une tabulation plus précise de la fraction volumique de solide.

Nous avons également insisté sur le caractère qualitatif des études présentées dans le chapitre (IV) en raison des géométries 2D considérées, des effets probables de confinement et d'un maillage potentiellement sous résolu dans la phase liquide. Dans ce contexte, on pourrait, dans un pre-

mier temps, mener une étude de convergence au maillage, pour commencer dans le cas purement compositionnel, afin de quantifier l'impact sur les résultats des valeurs des diffusivités effectives calculées par la méthode de stabilisation entropique. Même si les diffusivités effectives calculées par la méthode de stabilisation entropique peuvent être vues, de par leur formulation, comme des diffusivités sous mailles lorsque les échelles dans les phases ne sont pas totalement résolues, celles-ci peuvent avoir une influence importante sur les profils de température et de composition du mélange au voisinage du front dont dépend la présence éventuelle d'une croûte. Il serait également intéressant de réaliser une étude en l'absence de relâchement de gaz sur l'impact du rapport d'aspect du domaine de calcul sur la structure de la couche limite (dynamique de l'écoulement, structure des rugosités, ...).

Dans la suite de ce travail, on pourrait également effectuer des simulations en prenant en compte un gradient de pression moyen issu par exemple de pré-calculs du code TOPASE comme ceux réalisés dans [50] afin de prendre en compte les structures cohérentes de l'écoulement aux échelles de descriptions supérieures.

Il serait également intéressant d'étudier des configurations verticales et inclinées représentatives par exemple des parois latérales du radier ou du récupérateur selon les concepts. Dans ce cas, l'une des principales difficultés réside dans le choix des conditions aux limites, en particulier celles à imposer sur les parois latérales du domaine de calcul. Parmi les solutions envisageables, on pourrait soit considérer des conditions de périodicité, ce qui nécessiterait d'imposer un gradient de pression moyen pour stabiliser l'écoulement (effets de la gravité), soit imposer un écoulement de référence pouvant par exemple être guidé par des pré-calculs réalisés aux échelles de descriptions supérieures.

Dans le cadre de ce travail, une technique de viscosité effective dans le cadre rhéologique simple des fluides newtoniens a permis de prendre en compte la présence de zones *pâteuses*. Par la suite, il serait intéressant de modéliser le comportement non-Newtonien du bain de corium comme le suggère Epstein [54]. Pour cela, on pourrait s'appuyer sur les travaux de Vola *& al.* [151] pour la simulation numérique des écoulements de fluides de Bingham ainsi que sur ceux de Chupin [41] pour le couplage des méthodes d'interface diffuse à des rhéologies non-Newtoniennes.

Dans la suite de ce travail, il serait également intéressant de pouvoir effectuer des comparaisons avec des résultats expérimentaux dans le cas diphasique compositionnel. En effet, nous avons illustré dans le chapitre (III) la capacité et les potentialités d'application de l'outil de simulation numérique directe développé sur des problèmes bien connus. Nous avons en outre proposé une illustration sur un problème diphasique compositionnel et réalisé une étude dans le cadre de la problématique de l'interaction corium-béton. Néanmoins, comme nous l'avons précisé, il n'existe pas à notre connaissance de résultats expérimentaux sur cette classe d'écoulement. Il serait intéressant de mettre en place des programmes expérimentaux visant à étudier cette classe d'écoulements et ainsi contribuer à la validation de l'outil proposé.

Enfin, à plus long terme, on pourrait proposer sur la base de ces résultats une solution approchée du problème de l'écoulement au voisinage du front d'ablation (*i.e.* filtrage en temps et en espace des résultats de DNS) et ainsi construire des conditions aux limites effectives pour les modèles aux échelles de description supérieures.

Annexes

Annexe A

Limite “sharp” du modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel

Les modèles de Cahn-Hilliard et plus généralement les modèles à interface diffuse s'appuient sur une modélisation diffuse des interfaces. En raison de cet épaississement artificiel des interfaces, il s'avère nécessaire de s'assurer que le modèle converge bien asymptotiquement vers le modèle “sharp” correspondant à une description classique des interfaces, c'est-à-dire lorsqu'elles sont décrites comme des surfaces de discontinuité douées de grandeur en excès telle que la tension de surface.

On se propose ici de montrer formellement dans le cadre de la méthode des développements asymptotiques raccordés (*e.g.* [80, 105, 148]) que le modèle Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel converge bien vers le modèle “sharp” qui correspond ici à un modèle compositionnel couplé aux équations de Navier-Stokes et à une équation pour la température.

La première partie (*cf.* (A.1)) est consacrée à l'adimensionnement du modèle. Cette étape préliminaire permettra de mettre en évidence un petit paramètre ou paramètre de perturbation qui sera ensuite choisi pour réaliser l'analyse asymptotique du modèle qui fait l'objet de la seconde partie (*cf.* (A.2)).

A.1 Adimensionnement des équations

Cette partie est consacrée à l'adimensionnement des équations du modèle. Cette étape préliminaire permet de mettre en évidence le petit paramètre ou paramètre de perturbation qui sera utilisé par la suite pour les développements asymptotiques. Cela nous permettra également d'exprimer la mobilité diphasique en fonction d'un nombre de Péclet d'interface.

On commence par distinguer les grandeurs caractéristiques du système diphasique compositionnel :

- une viscosité de référence : $\eta^\star$
- une densité de référence : $\rho^\star$
- une conductivité thermique de référence : $k^\star$
- une chaleur spécifique de référence : $C_p^\star$
- un coefficient de diffusion massique : D
- une longueur caractéristique : $L^\star$ (*e.g.* le rayon de bulle)
- une vitesse de référence : $U^\star$ (*e.g.* la vitesse terminale d'une bulle)
- un temps de référence : $t^\star = L^\star/U^\star$
- une pression de référence : $p^\star = \sigma/L^\star$

- une température de référence : $T^\star$
- la norme de l'accélération de la pesanteur : g
- la tension de surface : σ

On distingue ensuite les grandeurs caractéristiques associées au modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel :

- un paramètre d'ordre de référence : $\varphi^\star$; On adopte ici $\varphi^\star = 1$
- l'épaisseur d'interface : ϵ
- une mobilité de référence : $M_d^\star = M$
- un coefficient de capillarité de référence : $\lambda^\star = \sigma\epsilon$
- un potentiel chimique généralisé de référence : $\tilde{\mu}^\star = \sigma/\epsilon$

On définit ensuite à partir des grandeurs caractéristiques les grandeurs adimensionnées suivantes :

- $x^+ = x/L^\star$; $t^+ = tU^\star/L^\star$
- $\rho^+ = \rho/\rho^\star$; $\eta^+ = \eta/\eta^\star$
- $k^+ = k/k^\star$; $C_p^+ = C_p/{C_p}^\star$
- $\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}/U^\star$; $p^+ = \tilde{\tilde{p}}/p^\star$; $T^+ = T/T^\star$; $\mathbf{g}^+ = \mathbf{g}/g$
- $\lambda^+ = \lambda/\lambda^\star$; $\tilde{\mu}^+ = \tilde{\mu}_1/\tilde{\mu}^\star$
- ${M_i}^+ = M_i/M_d^\star$ $(i = 1, 2, 3)$; $D_i^+ = D_i/D$ $(i = 2, 3, w)$

Les opérateurs de dérivée en temps et en espace s'écrivent sous forme adimensionnée

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{U^\star}{L^\star}\frac{\partial}{\partial t}^+ \quad ; \quad \nabla = \frac{1}{L^\star}\nabla^+ \tag{A.1}$$

Pour l'analyse asymptotique du modèle, on préfère utiliser la forme standard des équations de Navier-Stokes où les effets capillaires sont modélisés par le tenseur de Korteweg que l'on notera par la suite $\boldsymbol{\tau}_{cap} = \lambda\nabla\varphi_1 \otimes \nabla\varphi_1$ pour alléger les développements. Le système d'équations écrit sous sa forme adimensionnée est donné par

$$\frac{\partial\varphi_1}{\partial t} + \mathbf{w}\cdot\nabla\varphi_1 = \frac{C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\nabla\cdot[\mathcal{M}_1\nabla\tilde{\mu}_1] + \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot[(D_3 - D_2)(\varphi_3\nabla\varphi_2 - \varphi_2\nabla\varphi_3)] \tag{A.2a}$$

$$\frac{\partial\varphi_2}{\partial t} + \mathbf{w}\cdot\nabla\varphi_2 = \frac{C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\nabla\cdot[\mathcal{M}_2\nabla\tilde{\mu}_1] + \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot[D_2(\varphi_3\nabla\varphi_2 - \varphi_2\nabla\varphi_3)] \tag{A.2b}$$

$$\frac{\partial\varphi_3}{\partial t} + \mathbf{w}\cdot\nabla\varphi_3 = \frac{C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\nabla\cdot[\mathcal{M}_3\nabla\tilde{\mu}_1] - \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot[D_3(\varphi_3\nabla\varphi_2 - \varphi_2\nabla\varphi_3)] \tag{A.2c}$$

$$\tilde{\mu}_1 = W_i'(\varphi_1) - C^2\lambda\nabla^2\varphi_1 \tag{A.2d}$$

$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \rho\mathbf{u}\cdot\nabla\mathbf{u} + \mathbf{u}\nabla\cdot(\rho\mathbf{u}) = -\frac{1}{\mathrm{We}}\nabla p + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla\cdot\boldsymbol{\tau} + \frac{C}{\mathrm{We}}\nabla\cdot\boldsymbol{\tau}_{cap} + \frac{1}{\mathrm{Fr}^2}\rho\mathbf{g} \tag{A.2e}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\nabla\cdot[D_w(\varphi_3\nabla\varphi_2 - \varphi_2\nabla\varphi_3)] \tag{A.2f}$$

$$\rho C_p\frac{dT}{dt} = \frac{1}{\mathrm{Pe}}\nabla\cdot(k\nabla T) \tag{A.2g}$$

où, pour simplifier, les développements nous avons omis l'exposant $^+$. Dans le système d'équations (A.2), les nombres sans dimension suivants ont été utilisés :

- nombre de Péclet d'interface : $\mathrm{Pe}_\epsilon = U^\star\epsilon^2/M\sigma$
- le nombre de Cahn : $C = \epsilon/L^\star$
- le nombre Schmidt : $\mathrm{Sc} = \eta^\star/\rho^\star D$
- le nombre de Reynolds : $\mathrm{Re} = \rho^\star U^\star L^\star/\eta^\star$
- le nombre de Froude : $\mathrm{Fr} = U^\star/\sqrt{gL^\star}$
- le nombre de Weber : $\mathrm{We} = \rho^\star {U^\star}^2 L^\star/\sigma$

On remarque que le nombre de Cahn C joue ici le rôle de petit paramètre. Il sera utilisé par la suite dans le cadre de l'analyse asymptotique du modèle. Dans le cadre de ce travail, on adopte

l'estimation $\mathrm{Pe}_\epsilon \sim \mathcal{O}(1)$ qui implique que le transfert convectif s'équilibre avec le transfert diffusif dans la zone interfaciale. A partir de cette estimation, l'ordre de grandeur de la mobilité de référence s'écrit

$$M \sim \frac{U^\star \epsilon^2}{\sigma} \tag{A.3}$$

Soit encore,

$$M = M^\star \frac{U^\star \epsilon^2}{\sigma} \tag{A.4}$$

où $M^\star$ désigne une constante de proportionnalité. La relation (A.4) est utilisée dans le cadre de nos applications numériques. Signalons, enfin, que le choix des nombres sans dimension n'est pas unique. On peut en effet remplacer le nombre de Weber par le produit du nombre de Reynolds avec le nombre de capillarité défini par $\mathrm{Ca} = U^\star \eta^\star / \sigma$ ou encore le carré du nombre de Froude par le rapport du nombre de Weber (ou équivalent) sur le nombre de Bond définie par $\mathrm{Bo} = g\rho^\star L^{\star 2}/\sigma$.

A.2 Analyse asymptotique du modèle

Nous venons d'écrire le système d'équations sous sa forme adimensionnée dans lequel le nombre de Cahn $C = \epsilon / L^\star$ joue le rôle de petit paramètre. On réalise ici une analyse asymptotique dite "sharp" en fonction du nombre de Cahn dans le cadre de la méthode des développements asymptotiques raccordés (*e.g.* [80, 105, 148]). Cette méthode permet de résoudre un système d'équations aux dérivées partielles mettant en jeu un petit paramètre. Elle consiste, dans un premier temps, à décomposer le domaine d'étude Ω en différentes régions (*cf.* Fig.A.1) : deux régions dites *extérieures* $\Omega^\pm$ (loin de l'interface) au sein desquelles les grandeurs varient significativement suivant l'échelle $L^\star$ et une région dite *intérieure* Ω^i (proche de l'interface) où les grandeurs varient fortement suivant l'échelle ϵ. Dans le cadre de nos applications diphasiques compositionnelles, les régions extérieures correspondent aux phases liquide et gaz tandis que la région intérieure désigne la zone interfaciale. Il s'agit ensuite de résoudre dans les régions intérieure et extérieure le système d'équations (A.2). Pour cela, les solutions des problèmes dits extérieurs et intérieurs sont recherchées sous la forme d'un développement asymptotique effectué en fonction du nombre de Cahn $C = \epsilon / L^\star$. Enfin, après avoir identifié dans chaque région les systèmes d'équations aux différents ordres en C, les solutions des problèmes intérieurs sont raccordées aux solutions des problèmes extérieurs à l'aide des conditions de raccord proposées en annexe (C). Ceci a pour but de déterminer les conditions aux limites à appliquer à l'interface qui permettront de fermer complètement le modèle "sharp".

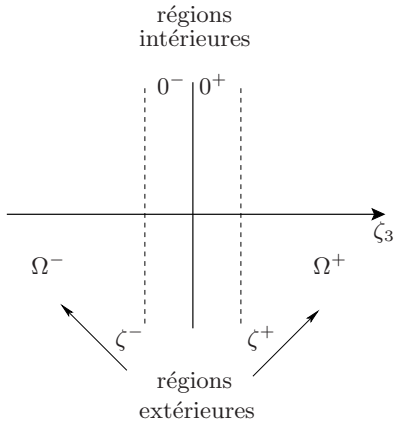


Fig. A.1: Décomposition de domaine au voisinage de l'interface

Pour étudier les variations au voisinage de l'interface, on se place dans un système de coordonnées généralisé, c'est-à-dire lié à l'interface, (ζ_1,ζ_2, ζ_3) où (ζ_1, ζ_2) mesurent la distance selon les directions principales et ζ_3 suivant la direction normale à l'interface. La définition complète de ce système de coordonnées ainsi que l'expression des opérateurs de dérivée spatiale et temporelle dans ce nouveau système sont données dans l'annexe (B).

A.2.1 Développements extérieurs

Dans les régions extérieures $\Omega^{\pm}$, chaque variable Ψ du système d'équations (A.2) est recherchée sous la forme d'un développement asymptotique (ici à l'ordre un en C)

$$\breve{\Psi}\left(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3\right) = \breve{\Psi}^0 + C\breve{\Psi}^1 + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.5}$$

Les développements extérieurs associées au système (A.2) s'écrivent

- pour les équations de Cahn-Hilliard :

$$\breve{\varphi}_i = \breve{\varphi}_i^{(0)} + C\breve{\varphi}_i^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \quad , \forall i = 1,2,3 \tag{A.6a}$$
$$\breve{\tilde{\mu}} = \breve{\tilde{\mu}}_1^{(0)} + C\breve{\tilde{\mu}}_1^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.6b}$$
$$\breve{\mathbf{w}} = \breve{\mathbf{w}}^{(0)} + C\breve{\mathbf{w}}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.6c}$$
$$\breve{\mathcal{M}}_i = \breve{\mathcal{M}}_i^{(0)} + C\breve{\mathcal{M}}_i^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \quad , \forall i = 1,2,3 \tag{A.6d}$$
$$\breve{D}_i = \breve{D}_i^{(0)} + C\breve{D}_i^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \quad , \forall i = 1,2 \tag{A.6e}$$

- pour l'équation d'énergie :

$$\breve{T} = \breve{T}^{(0)} + C\breve{T}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.7a}$$
$$\breve{\rho} = \breve{\rho}^{(0)} + C\breve{\rho}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.7b}$$
$$\breve{C}_p = \breve{C}_p^{(0)} + C\breve{C}_p^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.7c}$$
$$\breve{k} = \breve{k}^{(0)} + C\breve{k}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.7d}$$

- pour les équations de Navier-Stokes :

$$\breve{\mathbf{u}} = \breve{\mathbf{u}}^{(0)} + C\breve{\mathbf{u}}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.8a}$$
$$\breve{p} = \breve{p}^{(0)} + C\breve{p}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.8b}$$
$$\breve{\boldsymbol{\tau}} = \breve{\boldsymbol{\tau}}^{(0)} + C\breve{\boldsymbol{\tau}}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.8c}$$
$$\breve{\boldsymbol{\tau}}_{cap} = \breve{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(0)} + C\breve{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.8d}$$
$$\breve{\eta} = \breve{\eta}^{(0)} + C\breve{\eta}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.8e}$$
$$\breve{D}_w = \breve{D}_w^{(0)} + C\breve{D}_w^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.8f}$$

La substitution des développements extérieurs (A.6)-(A.8) donne à l'ordre zéro en C le système d'équations suivant

$$\frac{\partial \breve{\varphi}_1^{(0)}}{\partial t} + \breve{\mathbf{w}}^{(0)} \cdot \nabla \breve{\varphi}_1^{(0)} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot \left[\left(\breve{D}_3{}^{(0)} - \breve{D}_2{}^{(0)} \right) \left(\breve{\varphi}_3^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_2^{(0)} - \breve{\varphi}_2^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_3^{(0)} \right) \right] \tag{A.9a}$$

$$\frac{\partial \breve{\varphi}_2^{(0)}}{\partial t} + \breve{\mathbf{w}}^{(0)} \cdot \nabla \breve{\varphi}_2^{(0)} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot \left[\breve{D}_2{}^{(0)} \left(\breve{\varphi}_3^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_2^{(0)} - \breve{\varphi}_2^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_3^{(0)} \right) \right] \tag{A.9b}$$

$$\frac{\partial \breve{\varphi}_3^{(0)}}{\partial t} + \breve{\mathbf{w}}^{(0)} \cdot \nabla \breve{\varphi}_3^{(0)} = -\frac{1}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot \left[\breve{D}_3{}^{(0)} \left(\breve{\varphi}_3^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_2^{(0)} - \breve{\varphi}_2^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_3^{(0)} \right) \right] \tag{A.9c}$$

$$W_i'(\breve{\varphi}_1^{(0)}) = 0 \tag{A.9d}$$

$$\frac{\partial \left(\breve{\rho}^{(0)} \breve{\mathbf{u}}^{(0)} \right)}{\partial t} + \breve{\rho}^{(0)} \breve{\mathbf{u}}^{(0)} \cdot \nabla \breve{\mathbf{u}}^{(0)} = -\breve{\mathbf{u}}^{(0)} \nabla \cdot \left(\breve{\rho}^{(0)} \breve{\mathbf{u}}^{(0)} \right) - \frac{1}{\mathrm{We}} \nabla \breve{p}^{(0)} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \nabla \cdot \breve{\boldsymbol{\tau}}^{(0)} + \frac{1}{\mathrm{Fr}^2} \breve{\rho}^{(0)} \mathbf{g} \tag{A.9e}$$

$$\nabla \cdot \breve{\mathbf{u}}^{(0)} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot \left[\breve{D}_w{}^{(0)} \left(\breve{\varphi}_3^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_2^{(0)} - \breve{\varphi}_2^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_3^{(0)} \right) \right] \tag{A.9f}$$

$$\breve{\rho}^{(0)} \breve{C}_p{}^{(0)} \frac{d\breve{T}^{(0)}}{dt} = \frac{1}{\mathrm{Pe}} \nabla \cdot \left(\breve{k}^{(0)} \nabla \breve{T}^{(0)} \right) \tag{A.9g}$$

La fermeture proposée pour W_i (*cf.* (III.42)) permet de montrer que $\breve{\varphi}_1^{(0)} = 0$, $\breve{\varphi}_1^{(0)} = 0.5$ et $\breve{\varphi}_1^{(0)} = 1$ sont solutions de l'équation (A.8e) indépendamment des valeurs de $\breve{\varphi}_2^{(0)}$ et $\breve{\varphi}_3^{(0)}$. Néanmoins, comme la solution $\breve{\varphi}_1^{(0)} = 0.5$ correspond à la position de l'interface, celle-ci n'est pas définie dans les régions extérieures (*e.g.* [139]) ce qui implique que $\breve{\varphi}_1^{(0)} = 0$ et $\breve{\varphi}_1^{(0)} = 1$ sont les deux solutions extérieures admissibles. Sans perte de généralités, on supposera par la suite que les régions extérieures Ω^+ et Ω^- désignent respectivement le gaz (*i.e.* $\breve{\varphi}^{(0)} = 1$) et le liquide (*i.e.* $\breve{\varphi}^{(0)} = 0$). Dans chacune de ces régions, le système d'équations (A.9) s'écrit

- Région extérieure Ω^+ (*i.e.* $\breve{\varphi}^{(0)} = 1$) :

$$\frac{\partial \left(\varrho_1 \breve{\mathbf{u}}_1^{(0)} \right)}{\partial t} + \varrho_1 \breve{\mathbf{u}}_1^{(0)} \cdot \nabla \breve{\mathbf{u}}_1^{(0)} = -\breve{\mathbf{u}}_1^{(0)} \nabla \cdot \left(\varrho_1 \breve{\mathbf{u}}^{(0)} \right) - \frac{1}{\mathrm{We}} \nabla \breve{p}^{(0)} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \nabla \cdot \breve{\boldsymbol{\tau}}^{(0)}(\breve{\mathbf{u}}_1^{(0)}) + \frac{1}{\mathrm{Fr}^2} \varrho_1 \mathbf{g} \tag{A.10a}$$

$$\nabla \cdot \breve{\mathbf{u}}_1^{(0)} = 0 \tag{A.10b}$$

$$\varrho_1 C_{p_1} \frac{d\breve{T}^{(0)}}{dt} = \frac{1}{\mathrm{Pe}} \nabla \cdot \left(k_1 \nabla \breve{T}^{(0)} \right) \tag{A.10c}$$

- Région extérieure Ω^- (*i.e.* $\breve{\varphi}^{(0)} = 0$) :

$$\frac{\partial \breve{\varphi}_2^{(0)}}{\partial t} + \breve{\mathbf{w}}^{(0)} \cdot \nabla \breve{\varphi}_2^{(0)} = \frac{D}{\mathrm{ReSc}} \nabla^2 \breve{\varphi}_2^{(0)} \tag{A.11a}$$

$$\frac{\partial \breve{\varphi}_3^{(0)}}{\partial t} + \breve{\mathbf{w}}^{(0)} \cdot \nabla \breve{\varphi}_3^{(0)} = -\frac{D}{\mathrm{ReSc}} \nabla^2 \breve{\varphi}_3^{(0)} \tag{A.11b}$$

$$\frac{\partial \left(\breve{\rho}_{2,3}^{(0)} \breve{\mathbf{u}}_{2,3}^{(0)} \right)}{\partial t} + \breve{\rho}_{2,3}^{(0)} \breve{\mathbf{u}}_{2,3}^{(0)} \cdot \nabla \breve{\mathbf{u}}_{2,3}^{(0)} = -\breve{\mathbf{u}}_{2,3}^{(0)} \nabla \cdot \left(\breve{\rho}_{2,3}^{(0)} \breve{\mathbf{u}}_{2,3}^{(0)} \right) - \frac{1}{\mathrm{We}} \nabla \breve{p}^{(0)} + \frac{1}{\mathrm{Re}} \nabla \cdot \breve{\boldsymbol{\tau}}^{(0)}(\breve{\mathbf{u}}_{2,3}^{(0)}) + \frac{1}{\mathrm{Fr}^2} \breve{\rho}_{2,3}^{(0)} \mathbf{g} \tag{A.11c}$$

$$\nabla \cdot \breve{\mathbf{u}}_{2,3}^{(0)} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}} \nabla \cdot \left[\breve{D}_w{}^{(0)} \nabla \breve{\varphi}_2^{(0)} \right] \tag{A.11d}$$

$$\breve{\rho}_{2,3}^{(0)} \breve{C}_{p2,3}{}^{(0)} \frac{d\breve{T}^{(0)}}{dt} = \frac{1}{\mathrm{Pe}} \nabla \cdot \left(\breve{k}_{2,3}^{(0)} \nabla \breve{T}^{(0)} \right) \tag{A.11e}$$

Dans le gaz, le système correspond bien aux équations de Navier-Stokes monophasiques incompressibles couplées à une équation pour la température. Dans le liquide, on retrouve un modèle compositionnel couplé aux équations de Navier-Stokes dilatables ainsi qu'à une équation pour la température.

Il reste désormais à déterminer les relations de saut aux interfaces (*i.e.* les conditions aux limites) permettant de coupler ces deux systèmes d'équations.

A.2.2 Développements intérieurs

On s'intéresse ici aux problèmes intérieurs. Pour mettre en évidence les fortes variations dans la région interfaciale, on définit une coordonnée intérieure $\zeta := \zeta_3/C$ comme la dilatation de la coordonnée extérieure ζ_3 par le nombre de Cahn C. Ceci a pour conséquence d'introduire le facteur $1/C$ devant chaque dérivée partielle effectuée suivant la direction normale à l'interface. Dans la région intérieure, les variables sont recherchées sous la forme générale suivante

$$\hat{\Psi}\left(\zeta_1,\zeta_2,\zeta\right) = C^{\alpha}\hat{\Psi}^0 + C^{\alpha+1}\hat{\Psi}^1 + \mathcal{O}\left(C^{\alpha+2}\right) \tag{A.12}$$

où α est l'ordre de grandeur de la variable Ψ dans les régions intérieures (*e.g.* [6]).

A.2.2..1 Equations de Cahn-Hilliard : Les équations de Cahn-Hilliard s'écrivent à partir des relations (B.15),(B.22) et (B.27)

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial t} + \frac{1}{{h_1}^2}(\hat{\mathbf{w}}(1)-\mathbf{u}_i(1))\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta_1} + \frac{1}{{h_2}^2}(\hat{\mathbf{w}}(2)-\mathbf{u}_i(2))\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}(\hat{\mathbf{w}}(3)-\mathbf{u}_i(3))\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta}\\
&= -\frac{\hat{\mathcal{M}}_1 C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}+\frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2h_2}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_1}+\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}+\frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2h_1}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_2}\right]+\frac{1}{C}\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta}\right\}\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left\{\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left[\frac{(\hat{D}_3-\hat{D}_2)}{{h_1}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left[\frac{(\hat{D}_3-\hat{D}_2)}{{h_2}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&-\frac{(\hat{D}_3-\hat{D}_2)}{\mathrm{ReSc}}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}+\frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)+\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}+\frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2h_1}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}C^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\left(\hat{D}_3-\hat{D}_2\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right)\right]-\frac{(\hat{D}_3-\hat{D}_2)}{C\mathrm{ReSc}}\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right)\\
&+\frac{C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\left[\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left(\frac{\hat{\mathcal{M}}_1}{{h_1}^2}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_1}\right)+\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left(\frac{\hat{\mathcal{M}}_1}{{h_2}^2}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_2}\right)+\frac{1}{C^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\mathcal{M}}_1\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta}\right)\right]
\end{aligned} \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial t} + \frac{1}{{h_1}^2}(\hat{\mathbf{w}}(1)-\mathbf{u}_i(1))\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1} + \frac{1}{{h_2}^2}(\hat{\mathbf{w}}(2)-\mathbf{u}_i(2))\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}(\hat{\mathbf{w}}(3)-\mathbf{u}_i(3))\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\\
&= -\frac{\hat{\mathcal{M}}_2 C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}+\frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2h_2}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_1}+\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}+\frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2h_1}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_2}\right]+\frac{1}{C}\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta}\right\}\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left\{\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left[\frac{\hat{D}_2}{{h_1}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left[\frac{\hat{D}_2}{{h_2}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&-\frac{D_2}{\mathrm{ReSc}}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}+\frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)+\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}+\frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2h_1}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{1}{C^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_2\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right)\right]-\frac{\hat{D}_2}{C\mathrm{ReSc}}\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right)\\
&+\frac{C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\left[\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left(\frac{\hat{\mathcal{M}}_2}{{h_1}^2}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_1}\right)+\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left(\frac{\hat{\mathcal{M}}_2}{{h_2}^2}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_2}\right)+\frac{1}{C^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\mathcal{M}}_2\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta}\right)\right]
\end{aligned} \tag{A.14}$$

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial t}+\frac{1}{h_1^2}(\hat{\mathbf{w}}(1)-\mathbf{u}_i(1))\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}+\frac{1}{h_2^2}(\hat{\mathbf{w}}(2)-\mathbf{u}_i(2))\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}+\frac{1}{C}(\hat{\mathbf{w}}(3)-\mathbf{u}_i(3))\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}\\
&=-\frac{\hat{\mathcal{M}}_3 C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}+\frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2h_2}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_1}+\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}+\frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2h_1}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_2}\right]+\frac{1}{C}\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta}\right\}\\
&-\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left\{\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left[\frac{\hat{D}_3}{{h_1}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left[\frac{\hat{D}_3}{{h_2}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&+\frac{\hat{D}_3}{\mathrm{ReSc}}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}+\frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)+\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}+\frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2h_1}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&-\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{1}{C^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_3\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right)\right]-\frac{\hat{D}_3}{C\mathrm{ReSc}}\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right)\\
&+\frac{C}{\mathrm{Pe}_\epsilon}\left[\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left(\frac{\hat{\mathcal{M}}_3}{{h_1}^2}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_1}\right)+\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left(\frac{\hat{\mathcal{M}}_3}{{h_2}^2}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta_2}\right)+\frac{1}{C^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\mathcal{M}}_3\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1}{\partial\zeta}\right)\right]
\end{aligned}
\tag{A.15}
$$

$$
\begin{aligned}
\hat{\tilde{\mu}}_1 &= \hat{W}'_i(\hat{\varphi}_1)-\lambda\left[\frac{\partial^2\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta^2}+\frac{C^2}{h_1^2}\frac{\partial^2\hat{\varphi}_1}{\partial{\zeta_1}^2}+\frac{C^2}{h_2^2}\frac{\partial^2\hat{\varphi}_1}{\partial{\zeta_2}^2}+C^3\zeta\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta_1}+\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta_2}\right)\right]\\
&+ \lambda C\left(\frac{\gamma_1}{{h_1}^2}+\frac{\gamma_2}{{h_2}^2}\right)\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta}+\lambda C^3\zeta\left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1{h_2}^2}\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta_2}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2{h_1}^2}\frac{\partial\hat{\varphi}_1}{\partial\zeta_{21}}\right)
\end{aligned}
\tag{A.16}
$$

où $h_i=1+\gamma_i C\zeta+\mathcal{O}\left(C^2\right)$ pour $i=1,2$. Les développements intérieurs associées aux équations de Cahn-Hilliard s'écrivent à l'ordre un en C

$$
\begin{aligned}
\hat{\varphi}_i &= \hat{\varphi}_i^{(0)}+C\hat{\varphi}_i^{(1)}+\mathcal{O}\left(C^2\right) \quad ,\forall i=1,2,3 && \text{(A.17a)}\\
\hat{\tilde{\mu}}_1 &= \hat{\tilde{\mu}}_1^{(0)}+C\hat{\tilde{\mu}}_1^{(1)}+\mathcal{O}\left(C^2\right) && \text{(A.17b)}\\
\hat{\mathbf{w}} &= \hat{\mathbf{w}}^{(0)}+C\hat{\mathbf{w}}^{(1)}+\mathcal{O}\left(C^2\right) && \text{(A.17c)}\\
\hat{\mathbf{u}}_i &= \hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}+C\hat{\mathbf{u}}_i^{(1)}+\mathcal{O}\left(C^2\right) && \text{(A.17d)}\\
\hat{W}_i' &= \hat{W}_i'^{(0)}+C\hat{W}_i''^{(1)}+\mathcal{O}\left(C^2\right) && \text{(A.17e)}\\
\hat{\mathcal{M}}_i &= \hat{\mathcal{M}}_i^{(0)}+C\hat{\mathcal{M}}_i^{(1)}+\mathcal{O}\left(C^2\right) \quad ,\forall i=1,2,3 && \text{(A.17f)}\\
\hat{D}_i &= \hat{D}_i^{(0)}+C\hat{D}_i^{(1)}+\mathcal{O}\left(C^2\right) \quad ,\forall i=1,2 && \text{(A.17g)}
\end{aligned}
$$

En rappelant que $\mathrm{Pe}_\epsilon\sim\mathcal{O}(1)$, la substitution des développements asymptotiques (A.17) dans le système d'équations (A.12) donne

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\left(\hat{D}_3^{(0)}-\hat{D}_2^{(0)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] &= 0 && \text{(A.18a)}\\
\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_2^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] &= 0 && \text{(A.18b)}\\
\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_3^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] &= 0 && \text{(A.18c)}
\end{aligned}
$$

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$

$$\begin{aligned}
\left(\hat{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta} &= \frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\mathcal{M}}_1^{(0)}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)-\frac{\gamma}{\mathrm{ReSc}}\left(\hat{D}_3^{(0)}-\hat{D}_2^{(0)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\left(\hat{D}_3^{(0)}-\hat{D}_2^{(0)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta}\right)\right]\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\left(\hat{D}_3^{(0)}-\hat{D}_2^{(0)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right]\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\left(\hat{D}_3^{(1)}-\hat{D}_2^{(1)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] \qquad \text{(A.19a)}\\
\left(\hat{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta} &= \frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\mathcal{M}}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)-\frac{\gamma}{\mathrm{ReSc}}\hat{D}_2^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_2^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta}\right)\right]\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_2^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right]\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_2^{(1)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] \qquad \text{(A.19b)}\\
\left(\hat{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta} &= \frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\mathcal{M}}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)-\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_3^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta}\right)\right]\\
&-\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_3^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right]\\
&-\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_3^{(1)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right]\\
&+\frac{\gamma}{\mathrm{ReSc}}\hat{D}_3^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right) \qquad \text{(A.19c)}
\end{aligned}$$

où $\gamma=\gamma_1+\gamma_2$ désigne la courbure moyenne.

A.2.2..2 Equation de continuité : D'après les relations (B.9) et (B.21), l'équation de continuité (A.2f) s'écrit

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(1)}{\partial\zeta_1}+\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(2)}{\partial\zeta_2}+\frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(3)}{\partial\zeta}-C\zeta\left[\hat{\mathbf{u}}(1)\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right)+\hat{\mathbf{u}}(2)\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}+\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}\right)\right]-\hat{\mathbf{u}}(3)\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\\
&=\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left\{\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left[\frac{\hat{D}_w}{{h_1}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)\right]+\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left[\frac{\hat{D}_w}{{h_2}^2}\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&-\frac{\hat{D}_w}{\mathrm{ReSc}}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3}+\frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_1}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_1}\right)+\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3}+\frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2h_1}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta_2}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta_2}\right)\right]\right\}\\
&+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{1}{C^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_w\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right)\right]-\frac{\hat{D}_w}{C\mathrm{Sc}}\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\left(\hat{\varphi}_2\frac{\partial\hat{\varphi}_3}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3\frac{\partial\hat{\varphi}_2}{\partial\zeta}\right) \qquad \text{(A.20)}
\end{aligned}$$

Le développement intérieur de la vitesse $\mathbf{u}$ à l'ordre un en C s'écrit

$$\hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}}^{(0)} + C\hat{\mathbf{u}}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.21}$$

Si on insère les développements intérieurs (A.17a), (A.17g) et (A.21) dans l'équation (A.19d) alors on obtient

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$

$$\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_w^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta} - \hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] = 0 \tag{A.22}$$

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta} &= \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_w^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta} - \hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta} + \hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta} - \hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] \\
&+ \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{D}_w^{(1)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta} - \hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] \\
&- \frac{\gamma}{\mathrm{ReSc}}\hat{D}_w^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta} - \hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)
\end{aligned} \tag{A.23}$$

A.2.2..3 Equations de Navier-Stokes : L'équation de quantité de mouvement (A.2e) projetée sur $\mathbf{g}^1$ s'écrit

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{\mathbf{u}}(1))}{\partial t} + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1) - \mathbf{u}_i(1)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(1)}{\partial\zeta_1} + \rho\left(\hat{\mathbf{u}}(2) - \mathbf{u}_i(2)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(1)}{\partial\zeta_2} + \frac{\hat{\rho}}{C}\left(\hat{\mathbf{u}}(3) - \mathbf{u}_i(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(1)}{\partial\zeta} \\
&+ \hat{\mathbf{u}}(1)\left(\frac{\partial\rho\left(\hat{\mathbf{u}}(1) - \mathbf{u}_i(1)\right)}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2) - \mathbf{u}_i(2)\right)}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(3) - \mathbf{u}_i(3)\right)}{\partial\zeta} - \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(3) - \mathbf{u}_i(3)\right)\left(\frac{\gamma_1}{h_1} + \frac{\gamma_2}{h_2}\right)\right) \\
&- C\zeta\hat{\mathbf{u}}(1)\left[\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1) - \mathbf{u}_i(1)\right)\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1} + \frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right) + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2) - \mathbf{u}_i(2)\right)\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2} + \frac{\gamma_{1,2}}{h_1}\right)\right] \\
&- \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1) - \mathbf{u}_i(1)\right)\left(C\frac{\zeta\gamma_{1,1}}{h_1}\hat{\mathbf{u}}(1) + C\frac{\zeta\gamma_{1,2}}{h_2}\hat{\mathbf{u}}(2) + \frac{\gamma_1}{h_1}\hat{\mathbf{u}}(3)\right) \\
&- \hat{\rho}C\zeta\left(\hat{\mathbf{u}}(2) - \mathbf{u}_i(2)\right)\left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}\hat{\mathbf{u}}(1) - \frac{h_2\gamma_{2,1}}{{h_1}^2}\hat{\mathbf{u}}(2)\right) - \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(3) - \mathbf{u}_i(3)\right)\frac{\gamma_1}{h_1}\hat{\mathbf{u}}(1) \\
&= -\frac{1}{{h_1}^2}\frac{\partial\hat{p}}{\partial\zeta_1} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{11}}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{12}}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{13}}{\partial\zeta} - \left(\frac{\gamma_1}{h_1} + \frac{\gamma_2}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{13} - \frac{\gamma_1}{h_1}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{13} + \hat{\boldsymbol{\tau}}^{31}\right)\right] \\
&- \frac{C}{\mathrm{Re}}\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{2,1}}{h_2} + 2\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{11} + \frac{\gamma_{1,2}}{h_1}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{12} + \hat{\boldsymbol{\tau}}^{21}\right) - \frac{h_2}{h_1^2}\gamma_{2,1}\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22} + \left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1} + \frac{\gamma_{2,2}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{12}\right] \\
&+ \frac{C}{\mathrm{We}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{11}}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{12}}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{13}}{\partial\zeta} - \left(\frac{\gamma_1}{h_1} + \frac{\gamma_2}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{13} - \frac{\gamma_1}{h_1}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{13} + \hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{31}\right)\right] \\
&- \frac{C^2}{\mathrm{We}}\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{2,1}}{h_2} + 2\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{11} + \frac{\gamma_{1,2}}{h_1}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{12} + \hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{21}\right) - \frac{h_2}{h_1^2}\gamma_{2,1}\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{22} + \left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1} + \frac{\gamma_{2,2}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{12}\right]
\end{aligned} \tag{A.24}$$

L'équation de quantité de mouvement (A.2e) projetée sur $\mathbf{g}^2$ s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{\mathbf{u}}(2))}{\partial t} + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(2)}{\partial\zeta_1} + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(2)}{\partial\zeta_2} + \frac{\hat{\rho}}{C}\left(\hat{\mathbf{u}}(3)-\mathbf{u}_i(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(2)}{\partial\zeta} \\
&+ \hat{\mathbf{u}}(2)\left(\frac{\partial\rho\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(3)-\mathbf{u}_i(3)\right)}{\partial\zeta} - \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(3)-\mathbf{u}_i(3)\right)\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\right) \\
&- C\zeta\hat{\mathbf{u}}(2)\left[\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right) + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}+\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}\right)\right] \\
&- \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)C\zeta\left(\frac{\gamma_{1,2}h_1}{{h_2}^2}\hat{\mathbf{u}}(1) + \frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\hat{\mathbf{u}}(2)\right) \\
&- \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)\left(C\zeta\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\hat{\mathbf{u}}(1) + C\zeta\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}\hat{\mathbf{u}}(2) + \frac{\gamma_2}{h_2}\hat{\mathbf{u}}(3)\right) - \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(3)-\mathbf{u}_i(3)\right)\frac{\gamma_2}{h_2}\hat{\mathbf{u}}(2) \\
&= -\frac{1}{{h_2}^2}\frac{\partial\hat{p}}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{21}}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22}}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23}}{\partial\zeta} - \left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23} - \frac{\gamma_1}{h_1}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23}+\hat{\boldsymbol{\tau}}^{32}\right)\right] \\
&- \frac{C}{\mathrm{Re}}\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}+2\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22} + \frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{12}+\hat{\boldsymbol{\tau}}^{21}\right) - \frac{h_1}{h_2^2}\gamma_{1,2}\hat{\boldsymbol{\tau}}^{11} + \left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{21}\right] \\
&+ \frac{C}{\mathrm{We}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{21}_{cap}}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22}_{cap}}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23}_{cap}}{\partial\zeta} - \left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23}_{cap} - \frac{\gamma_1}{h_1}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23}_{cap}+\hat{\boldsymbol{\tau}}^{32}_{cap}\right)\right] \\
&- \frac{C^2}{\mathrm{We}}\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}+2\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22}_{cap} + \frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{12}_{cap}+\hat{\boldsymbol{\tau}}^{21}_{cap}\right) - \frac{h_1}{h_2^2}\gamma_{1,2}\hat{\boldsymbol{\tau}}^{11}_{cap} + \left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{21}_{cap}\right]
\end{aligned}
\tag{A.25}
$$

L'équation de quantité de mouvement (A.2e) projetée sur $\mathbf{g}^3$ s'écrit

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial(\hat{\rho}\hat{\mathbf{u}}(3))}{\partial t} + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(3)}{\partial\zeta_1} + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(3)}{\partial\zeta_2} + \frac{\hat{\rho}}{C}\left(\hat{\mathbf{u}}(3)-\mathbf{u}_i(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}(3)}{\partial\zeta} \\
&+ \hat{\mathbf{u}}(3)\left(\frac{\partial\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(3)-\mathbf{u}_i(3)\right)}{\partial\zeta} - \rho\left(\hat{\mathbf{u}}(3)-\mathbf{u}_i(3)\right)\left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\right) \\
&- C\zeta\hat{\mathbf{u}}(3)\left[\hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right) + \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)\left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}+\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}\right)\right] \\
&- \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(1)-\mathbf{u}_i(1)\right)\gamma_1 h_1\hat{\mathbf{u}}(1) - \hat{\rho}\left(\hat{\mathbf{u}}(2)-\mathbf{u}_i(2)\right)\gamma_2 h_2\hat{\mathbf{u}}(2) \\
&= -\frac{1}{C}\frac{\partial\hat{p}}{\partial\zeta} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{31}}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{32}}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{33}}{\partial\zeta} + \gamma_1 h_1\hat{\boldsymbol{\tau}}^{11} + \gamma_2 h_2\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22} - \left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{33}\right] \\
&- \frac{C}{\mathrm{Re}}\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{31} + \left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{32}\right] - \frac{1}{\mathrm{Fr}^2}\rho g \\
&+ \frac{C}{\mathrm{We}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{31}_{cap}}{\partial\zeta_1} + \frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{32}_{cap}}{\partial\zeta_2} + \frac{1}{C}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{33}_{cap}}{\partial\zeta} + \gamma_1 h_1\hat{\boldsymbol{\tau}}^{11}_{cap} + \gamma_2 h_2\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22}_{cap} - \left(\frac{\gamma_1}{h_1}+\frac{\gamma_2}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{33}_{cap}\right] \\
&- \frac{C^2}{\mathrm{We}}\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,1}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{31}_{cap} + \left(\frac{\gamma_{1,2}}{h_1}+\frac{\gamma_{2,2}}{h_2}\right)\hat{\boldsymbol{\tau}}^{32}_{cap}\right]
\end{aligned}
\tag{A.26}
$$

A partir d'une étude diphasique à l'équilibre d'une interface plane en dimension un (*e.g.* [106]), on peut montrer que la pression est caractérisée par σ/ϵ dans la zone interfaciale (*e.g.* [6]). Puisque $p^\star = \sigma/L^\star$, la pression est également d'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$ dans la région intérieure et son développement intérieur s'écrit

$$
\hat{p} = \frac{1}{C}\left(\hat{p}^{(0)} + C\hat{p}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right)\right) \tag{A.27}
$$

Les développements intérieurs de la densité et de la viscosité s'écrivent

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^{(0)} + C\hat{\rho}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.28}$$

$$\hat{\eta} = \hat{\eta}^{(0)} + C\hat{\eta}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.29}$$

Enfin, les développements intérieurs du tenseur des contraintes visqueuses $\boldsymbol{\tau}$ et du tenseur de Korteweg $\boldsymbol{\tau}_{cap}$ s'écrivent

$$\hat{\boldsymbol{\tau}} = \frac{1}{C}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(0)} + C\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right)\right) \tag{A.30}$$

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap} = \frac{1}{C^2}\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(0)} + C\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right)\right) \tag{A.31}$$

où les tenseurs $\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(0)}$, $\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(1)}$, $\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(0)}$ et $\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(1)}$ sont définis par

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(0)} = \hat{\eta}^{(0)} \begin{pmatrix} -\frac{2}{3}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta} & 0 & \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta} \\ 0 & -\frac{2}{3}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta} & \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta} \\ \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta} & \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta} & \frac{1}{3}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta} \end{pmatrix} \tag{A.32}$$

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\tau}}^{(1)} = \hat{\eta}^{(0)} & \begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta_1} - \gamma_1 \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) & \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta_2} + \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta_1} & \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(1)}(1)}{\partial \zeta} + \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta_1} \\ \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta_2} + \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta_1} & \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta_2} - \gamma_2 \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) & \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(1)}(2)}{\partial \zeta} + \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta_2} \\ \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(1)}(1)}{\partial \zeta} + \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta_1} & \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(1)}(2)}{\partial \zeta} + \frac{1}{2}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta_2} & \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(1)}(3)}{\partial \zeta} \end{pmatrix} \\ & -\frac{2}{3}\hat{\eta}^{(0)}\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta_1} + \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta_2} - \gamma \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\right)\mathbf{I} + \hat{\eta}^{(1)}\hat{\boldsymbol{\tau}}^{(0)} \end{aligned} \tag{A.33}$$

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda\left(\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta}\right)^2 \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \lambda\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta_1}\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta} \\ 0 & 0 & \lambda\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta_2}\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta} \\ \lambda\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta_1}\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta} & \lambda\frac{\partial \hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial \zeta_1}\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta} & 2\lambda\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta}\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(1)}}{\partial \zeta} \end{pmatrix} \tag{A.34}$$

La substitution des développements intérieurs (A.27)-(A.31) dans le bilan de quantité de mouvement projeté sur $\mathbf{g}^1$ (*i.e.* (A.24)) donne

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$

$$\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\tau}}^{13(0)}}{\partial \zeta} = 0 \tag{A.35}$$

Soit, à partir de (A.32)

$$\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta}\right) = 0 \tag{A.36}$$

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$

$$\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta}+\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)\frac{\partial\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial\zeta}=-\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial\hat{p}^{(0)}}{\partial\zeta_1}$$
$$+\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{13(0)}}{\partial\zeta}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{11(0)}}{\partial\zeta_1}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{12(0)}}{\partial\zeta_2}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{13(1)}}{\partial\zeta}-\gamma\hat{\boldsymbol{\tau}}^{13(0)}-\gamma_1\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{13(0)}+\hat{\boldsymbol{\tau}}^{31(0)}\right)\right] \quad (A.37)$$

Soit, à partir de (A.32)-(A.33)

$$\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta}+\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)\frac{\partial\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial\zeta}=-\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial\hat{p}^{(0)}}{\partial\zeta_1}$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[-\frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(1)}(1)}{\partial\zeta}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta_1}\right)\right]$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(1)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta}\right)-\hat{\eta}^{(0)}\left(\frac{\gamma}{2}+\gamma_1\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta}\right] \quad (A.38)$$

La substitution des développements intérieurs (A.27)-(A.31) dans le bilan de quantité de mouvement projeté sur $\mathbf{g}^2$ (*i.e.* (A.25)) donne

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$

$$\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23(0)}}{\partial\zeta} = 0 \quad (A.39)$$

Soit, à partir de (A.32)

$$\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta}\right) = 0 \quad (A.40)$$

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$

$$\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta}+\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)\frac{\partial\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial\zeta}=-\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial\hat{p}^{(0)}}{\partial\zeta_2}$$
$$+\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}_{cap}^{23(0)}}{\partial\zeta}+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{21(0)}}{\partial\zeta_1}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{22(0)}}{\partial\zeta_2}+\frac{\partial\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23(1)}}{\partial\zeta}-\gamma\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23(0)}-\gamma_1\left(\hat{\boldsymbol{\tau}}^{23(0)}+\hat{\boldsymbol{\tau}}^{32(0)}\right)\right] \quad (A.41)$$

Soit, à partir de (A.32)-(A.33)

$$\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta}+\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)\frac{\partial\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial\zeta}=-\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial\hat{p}^{(0)}}{\partial\zeta_2}$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[-\frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(1)}(2)}{\partial\zeta}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta_2}\right)\right]$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(1)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta}\right)-\hat{\eta}^{(0)}\left(\frac{\gamma}{2}+\gamma_1\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta}\right] \quad (A.42)$$

La substitution des développements intérieurs (A.27)-(A.31) dans le bilan de quantité de mouvement projeté sur $\mathbf{g}^3$ (*i.e.* (A.26)) donne

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$

$$\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial \hat{p}^{(0)}}{\partial \zeta} = \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\tau}}^{33(0)}}{\partial \zeta} + \frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\tau}}^{33(0)}_{cap}}{\partial \zeta} \tag{A.43}$$

Soit, à partir de (A.32) et (A.34)

$$\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial \hat{p}^{(0)}}{\partial \zeta} = \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta}\right) + \frac{2\lambda}{\mathrm{We}}\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta}\frac{\partial^2 \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta^2} \tag{A.44}$$

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$

$$\begin{aligned}
&\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta} + \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\frac{\partial \hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial \zeta} + \frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial \hat{p}^{(1)}}{\partial \zeta} = \\
&+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\tau}}^{31(0)}}{\partial \zeta_1} + \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\tau}}^{32(0)}}{\partial \zeta_2} + \frac{\partial \hat{\boldsymbol{\tau}}^{33(1)}}{\partial \zeta} + \gamma_1 \hat{\boldsymbol{\tau}}^{11(0)} + \gamma_2 \hat{\boldsymbol{\tau}}^{22(0)} - \gamma \hat{\boldsymbol{\tau}}^{33(0)}\right] \\
&+\frac{1}{\mathrm{We}}\left[\frac{\partial \hat{\boldsymbol{\tau}}^{33(1)}_{cap}}{\partial \zeta} - \gamma \hat{\boldsymbol{\tau}}^{33(0)}_{cap}\right]
\end{aligned} \tag{A.45}$$

Soit, à partir de (A.32)-(A.34)

$$\begin{aligned}
&\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta} + \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\frac{\partial \hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial \zeta} + \frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial \hat{p}^{(1)}}{\partial \zeta} = \\
&+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \zeta_1}\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta}\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \zeta_2}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta}\right) + \frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(1)}(3)}{\partial \zeta}\right) + \frac{\hat{\eta}^{(1)}}{3}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta}\right] \\
&-\frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial \zeta}\left[\hat{\eta}^{(0)}\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial \zeta_1} + \frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial \zeta_2} - \gamma \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\right)\right] - \frac{\gamma}{\mathrm{Re}}\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial \zeta} \\
&+\frac{1}{\mathrm{We}}\left[2\lambda\left(\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta}\frac{\partial^2 \hat{\varphi}_1^{(1)}}{\partial \zeta^2} + \frac{\partial^2 \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta^2}\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(1)}}{\partial \zeta}\right) - \gamma\lambda\left(\frac{\partial \hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial \zeta}\right)^2\right]
\end{aligned} \tag{A.46}$$

A.2.2..4 Equation pour la température : L'équation pour la température (A.2g) s'écrit à partir des relations (B.15),(B.22a) et (B.27) sous la forme suivante

$$\begin{aligned}
&\hat{\rho}\hat{C}_p\left[\frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + \frac{1}{h_1^2}(\hat{\mathbf{u}}(1) - \mathbf{u}_i(1))\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta_1} + \frac{1}{h_2^2}(\hat{\mathbf{u}}(2) - \mathbf{u}_i(2))\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta_2} + \frac{1}{C}(\hat{\mathbf{u}}(3) - \mathbf{u}_i(3))\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta}\right] \\
&= \frac{1}{\mathrm{Pe}}\left[\frac{\partial}{\partial \zeta_1}\left(\frac{\hat{k}}{{h_1}^2}\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta_1}\right) + \frac{\partial}{\partial \zeta_2}\left(\frac{\hat{k}}{{h_2}^2}\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta_2}\right) + \frac{1}{C^2}\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\hat{k}\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta}\right)\right] \\
&-\frac{\hat{k}}{\mathrm{Pe}}\left\{C\zeta\left[\left(\frac{\gamma_{1,1}}{h_1^3} + \frac{\gamma_{2,1}}{{h_1}^2 h_2}\right)\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta_1} + \left(\frac{\gamma_{2,2}}{h_2^3} + \frac{\gamma_{1,2}}{{h_2}^2 h_1}\right)\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta_2}\right] + \frac{1}{C}\left(\frac{\gamma_1}{h_1} + \frac{\gamma_2}{h_2}\right)\frac{\partial \hat{T}}{\partial \zeta}\right\}
\end{aligned} \tag{A.47}$$

Les développements intérieurs associés à l'équation pour la température s'écrivent

$$\hat{T} = \hat{T}^{(0)} + C\hat{T}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.48a}$$

$$\hat{C}_p = \hat{C}_p^{(0)} + C\hat{C}_p^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.48b}$$

$$\hat{k} = \hat{k}^{(0)} + C\hat{k}^{(1)} + \mathcal{O}\left(C^2\right) \tag{A.48c}$$

La substitution des relations (A.48) dans l'équation (A.47) donne

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$

$$\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{k}^{(0)}\frac{\partial\hat{T}^{(0)}}{\partial\zeta}\right) = 0 \tag{A.49}$$

- à l'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{(0)}\hat{C}_p^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{T}^{(0)}}{\partial\zeta} &= \frac{1}{\mathrm{Pe}}\left[\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{k}^{(0)}\frac{\partial\hat{T}^{(1)}}{\partial\zeta}\right)+\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{k}^{(1)}\frac{\partial\hat{T}^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] \\ &- \hat{k}^{(0)}\gamma\frac{1}{\mathrm{Pe}}\frac{\partial\hat{T}^{(0)}}{\partial\zeta}\end{aligned} \tag{A.50}$$

A.2.3 Conditions de saut à l'interface

On se propose ici de raccorder les solutions intérieures aux solutions extérieures pour déterminer les conditions de saut et fermer complètement les deux systèmes d'équations (A.10) et (A.11). Pour cela, on utilise les conditions de raccord asymptotique présentées en annexe (C). On notera par la suite le saut de la variable extérieure $\breve{\Psi}$ à travers l'interface sous la forme

$$\left[\breve{\Psi}\right]_{0^-}^{0^+} := \lim_{\zeta_3\to 0^+}\breve{\Psi} - \lim_{\zeta_3\to 0^-}\breve{\Psi} \tag{A.51}$$

A.2.3..5 relations de saut pour la vitesse : L'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$ de l'équation de continuité dans les régions intérieures (*cf.* (A.22)) implique

$$\hat{D}_w^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right) = C_1(\zeta_1,\zeta_2) \tag{A.52}$$

où $C_1(\zeta_1,\zeta_2)$ est une fonction indépendante de ζ. Les conditions de raccord (C.3a) et (C.4a) impliquent $C_1(\zeta_1,\zeta_2)=0$. Il vient alors

$$\hat{D}_w^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right) = 0 \tag{A.53}$$

La substitution de l'équation (A.53) dans (A.23) donne

$$\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) = \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left[\hat{D}_w^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta}+\hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right] \tag{A.54}$$

$$+ \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left[\hat{D}_w^{(1)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)\right]+C_2(\zeta_1,\zeta_2) \tag{A.55}$$

où $C_2(\zeta_1,\zeta_2)$ est une fonction indépendante de ζ. A partir des conditions de raccord (C.3a), (C.4a) et (C.4b), on peut écrire

$$\mathbf{n}\cdot\left[\breve{\mathbf{u}}^{(0)}\right]_{0^-}^{0^+} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left[\lim_{\zeta_3\to 0^+}\breve{D}_w^{(0)}\left(\breve{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\breve{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta_3}-\breve{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\breve{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta_3}\right)-\lim_{\zeta_3\to 0^-}\breve{D}_w^{(0)}\left(\breve{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\breve{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta_3}-\breve{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\breve{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta_3}\right)\right] \tag{A.56}$$

Soit, encore

$$\mathbf{n}\cdot\left[\breve{\mathbf{u}}^{(0)}\right]_{0^-}^{0^+} = \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\lim_{\zeta_3\to 0^-}\mathbf{n}\cdot\breve{D}_w^{(0)}\nabla\breve{\varphi}_2^{(0)} \tag{A.57}$$

Nous reviendrons ultérieurement sur la relation (A.57). L'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$ de l'équation de quantité de mouvement projetée sur les vecteurs tangents à l'interface (*cf.* (A.36) et (A.40)) dans les régions intérieures implique

$$\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(i)}{\partial\zeta} = C_i(\zeta_1,\zeta_2) \quad \forall i=1,2 \tag{A.58}$$

où $C_i(\zeta_1,\zeta_2)$ pour $i=1,2$ est une fonction indépendante de ζ. La condition de raccord (C.4a) conduit à $C_i=0$ pour $i=1,2$. Ainsi, à partir de la condition de raccord (C.3a), on peut conclure que **les composantes tangentielles de la vitesse $\breve{\mathbf{u}}^{(0)}$ sont continues à travers l'interface**

$$\mathbf{t}_i\cdot\left[\breve{\mathbf{u}}^{(0)}\right]_{0^-}^{0^+} = 0 \quad \forall i=1,2 \tag{A.59}$$

A.2.3..6 relations de saut pour les paramètres d'ordre : L'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$ des équations pour les paramètres d'ordre dans les régions intérieures (*cf.* (A.18)) implique

$$\left(\hat{D}_3^{(0)}-\hat{D}_2^{(0)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right) = C_1(\zeta_1,\zeta_2) \tag{A.60a}$$

$$\hat{D}_2^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right) = C_2(\zeta_1,\zeta_2) \tag{A.60b}$$

$$\hat{D}_3^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right) = C_3(\zeta_1,\zeta_2) \tag{A.60c}$$

où $C_i(\zeta_1,\zeta_2)$ pour $i=1,2,3$ est une fonction indépendante de ζ. Les conditions de raccord (C.3a) et (C.4a) conduisent à $C_i=0$ pour $i=1,2,3$. L'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$ des équations de Cahn-Hilliard dans les régions intérieures (*cf.* (A.19)) implique

$$\begin{aligned}\left(\hat{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\hat{\varphi}_1^{(0)} &= \hat{\mathcal{M}}_1^{(0)}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1^{(0)}}{\partial\zeta}+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left(\hat{D}_3^{(0)}-\hat{D}_2^{(0)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta}\right)\\ &+ \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\left(\hat{D}_3^{(0)}-\hat{D}_2^{(0)}\right)\left(\hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)+C_4(\zeta_1,\zeta_2)\end{aligned} \tag{A.61a}$$

$$\begin{aligned}\left(\hat{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\hat{\varphi}_2^{(0)} &= \hat{\mathcal{M}}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1^{(0)}}{\partial\zeta}+\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\hat{D}_2^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta}\right)\\ &+ \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\hat{D}_2^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)+C_5(\zeta_1,\zeta_2)\end{aligned} \tag{A.61b}$$

$$\begin{aligned}\left(\hat{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\hat{\varphi}_3^{(0)} &= \hat{\mathcal{M}}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\tilde{\mu}}_1^{(0)}}{\partial\zeta}-\frac{1}{\mathrm{ReSc}}\hat{D}_3^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(1)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(0)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(1)}}{\partial\zeta}\right)\\ &- \frac{1}{\mathrm{ReSc}}\hat{D}_3^{(0)}\left(\hat{\varphi}_2^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_3^{(0)}}{\partial\zeta}-\hat{\varphi}_3^{(1)}\frac{\partial\hat{\varphi}_2^{(0)}}{\partial\zeta}\right)+C_6(\zeta_1,\zeta_2)\end{aligned} \tag{A.61c}$$

où $C_i(\zeta_1,\zeta_2)$ pour $i=4,5,6$ est une fonction indépendante de ζ. Ici, nous avons utilisé la continuité de la composante normale de vitesse $\breve{\mathbf{w}}^{(0)}$ que l'on obtient à partir de la relation (A.55) ainsi que des conditions de raccord (C.3a), (C.4a) et (C.4b). Ces mêmes conditions de raccord, appliquées aux équations (A.61), permettent d'écrire, d'une part,

$$\lim_{\zeta_3\to0^-}\breve{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\breve{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)=\lim_{\zeta_3\to0^+}\breve{\mathbf{w}}^{(0)}(3)-\breve{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)=0 \tag{A.62}$$

et, d'autre part,

$$\lim_{\zeta_3\to 0^-} \mathbf{n}\cdot\breve{D}_2^{(0)}\nabla\breve{\varphi}_2^{(0)} = 0 \tag{A.63a}$$

$$\lim_{\zeta_3\to 0^-} \mathbf{n}\cdot\breve{D}_3^{(0)}\nabla\breve{\varphi}_3^{(0)} = 0 \tag{A.63b}$$

Par ailleurs, on peut écrire la relation suivante

$$\lim_{\zeta_3\to 0^-} \breve{D}_i^{(0)} = D \quad \forall i = 2,3 \tag{A.64}$$

où D désigne un coefficient de diffusion uniforme. A partir de la relation (A.64), (A.63) devient

$$\lim_{\zeta_3\to 0^-} \mathbf{n}\cdot\nabla\breve{\varphi}_2^{(0)} = 0 \tag{A.65a}$$

$$\lim_{\zeta_3\to 0^-} \mathbf{n}\cdot\nabla\breve{\varphi}_3^{(0)} = 0 \tag{A.65b}$$

A ce niveau, il est intéressant de remarquer, dans un premier temps, que la substitution des relations (A.65) dans (A.57) permet d'obtenir **la continuité de la composante normale de la vitesse** $\breve{\mathbf{u}}^{(0)}$ et, par conséquent, **la continuité de la vitesse** $\breve{\mathbf{u}}^{(0)}$ **à travers l'interface**, à savoir

$$\left[\breve{\mathbf{u}}^{(0)}\right]_{0^-}^{0^+} = 0 \tag{A.66}$$

On peut montrer que les relations (A.65) permettent également d'écrire, à partir de la définition de la vitesse solénoïdale $\mathbf{w}$, les égalités suivantes

$$\lim_{\zeta_3\to 0^-} \breve{\mathbf{w}}^{(0)}(3) - \breve{\mathbf{u}}^{(0)}(3) = \lim_{\zeta_3\to 0^+} \breve{\mathbf{w}}^{(0)}(3) - \breve{\mathbf{u}}^{(0)}(3) = 0 \tag{A.67}$$

Cela implique

$$\lim_{\zeta_3\to 0^-} \breve{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \breve{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3) = \lim_{\zeta_3\to 0^+} \breve{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \breve{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3) = 0 \tag{A.68}$$

Ces relations seront utilisés ultérieurement dans la détermination des relations de saut pour le tenseur des contraintes visqueuses.

A.2.3..7 relations de saut pour le tenseur des contraintes visqueuses : Nous venons de montrer que la vitesse est uniforme en ζ. Par conséquent, l'ordre $\mathcal{O}\left(C^2\right)$ du bilan de quantité de mouvement projeté sur le vecteur normal à l'interface (*cf.* (A.44)) permet d'écrire

$$\hat{p}^{(0)} = \lambda\left(\frac{\partial\hat{\varphi}^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2 \tag{A.69}$$

L'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-1}\right)$ du bilan de quantité de mouvement projeté sur $\mathbf{g}_i$ pour $i = 1,2,3$ se simplifie à partir des relations (A.68)-(A.69) sous la forme

- projection sur $\mathbf{g}_1$

$$\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta} + \hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)\frac{\partial\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3) - \hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial\zeta} =$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(1)}(1)}{\partial\zeta}\right) + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta_1}\right)\right] - \frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\left[\lambda\left(\frac{\partial\hat{\varphi}^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2\right] \tag{A.70}$$

- projection sur $\mathbf{g}_2$

$$\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta}+\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)\frac{\partial\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial\zeta}=$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(1)}(2)}{\partial\zeta}\right)+\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta_2}\right)\right]-\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\left[\lambda\left(\frac{\partial\hat{\varphi}^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2\right] \quad (A.71)$$

- projection sur $\mathbf{g}_3$

$$\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta}+\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)\frac{\partial\hat{\rho}^{(0)}\left(\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(3)-\hat{\mathbf{u}}_i^{(0)}(3)\right)}{\partial\zeta}+\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial\hat{p}^{(1)}}{\partial\zeta}=$$
$$+\frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left(\hat{\eta}^{(0)}\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(1)}(3)}{\partial\zeta}\right)-\frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[\hat{\eta}^{(0)}\left(\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta_1}+\frac{\partial\hat{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta_2}\right)\right]$$
$$+\frac{1}{\mathrm{We}}\left[2\lambda\left(\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\frac{\partial^2\hat{\varphi}_1^{(1)}}{\partial\zeta^2}+\frac{\partial^2\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta^2}\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(1)}}{\partial\zeta}\right)-\gamma\lambda\left(\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2\right] \quad (A.72)$$

En intégrant désormais les relations (A.70)-(A.72) sur l'épaisseur de la région intérieure (*i.e.* sur $[-\infty;+\infty]$) puis en appliquant au résultat les conditions de raccord (C.3a),(C.4a) et (C.4b), il vient

- projection sur $\mathbf{g}_1$

$$\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial}{\partial\zeta_1}\int_{-\infty}^{+\infty}\lambda\left(\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{2}\breve{\eta}^{(0)}\left(\frac{\partial\breve{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta_3}+\frac{\partial\breve{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta_1}\right)\right]_{0^-}^{0^+} \quad (A.73)$$

- projection sur $\mathbf{g}_2$

$$\frac{1}{\mathrm{We}}\frac{\partial}{\partial\zeta_2}\int_{-\infty}^{+\infty}\lambda\left(\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\frac{1}{2}\breve{\eta}^{(0)}\left(\frac{\partial\breve{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta_3}+\frac{\partial\breve{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta_2}\right)\right]_{0^-}^{0^+} \quad (A.74)$$

- projection sur $\mathbf{g}_3$

$$\frac{1}{\mathrm{We}}\left[\breve{p}^{(0)}\right]_{0^-}^{0^+}=\frac{1}{\mathrm{Re}}\left[\breve{\eta}^{(0)}\frac{\partial\breve{\mathbf{u}}^{(0)}(3)}{\partial\zeta_3}-\frac{2}{3}\breve{\eta}^{(0)}\left(\frac{\partial\breve{\mathbf{u}}^{(0)}(1)}{\partial\zeta_1}+\frac{\partial\breve{\mathbf{u}}^{(0)}(2)}{\partial\zeta_2}\right)\right]_{0^-}^{0^+}$$
$$-\frac{\gamma\lambda}{\mathrm{We}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2 \quad (A.75)$$

On rappelle ici que la tension de surface est définie par (*cf.* (III.11))

$$\sigma=\lambda\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\partial\hat{\varphi}_1^{(0)}}{\partial\zeta}\right)^2d\zeta \quad (A.76)$$

Or, comme dans ce travail σ est supposée constante, on obtient à partir des relations (A.73)-(A.75) la condition de saut suivante

$$\mathbf{n}\cdot\left[-\breve{p}^{(0)}+\frac{\mathrm{We}}{\mathrm{Re}}\nabla\breve{\mathbf{u}}^{(0)}\right]_{0^-}^{0^+}=\gamma\sigma\mathbf{n} \quad (A.77)$$

Ici, il est intéressant de remarquer que la relation de Laplace est retrouvée lorsque le système est à l'équilibre.

A.2.3..8 relation de saut pour la température : L'ordre $\mathcal{O}\left(C^{-2}\right)$ de l'équation pour la température dans les régions intérieures (*cf.* (A.49)) implique

$$\hat{k}^{(0)}\frac{\partial \hat{T}^{(0)}}{\partial \zeta} = C_1(\zeta_1,\zeta_2) \tag{A.78}$$

où $C_1(\zeta_1,\zeta_2)$ est une fonction indépendante de ζ. La condition de raccord (C.4a) conduit à $C_1(\zeta_1,\zeta_2)=0$. Il vient alors

$$\hat{k}^{(0)}\frac{\partial \hat{T}^{(0)}}{\partial \zeta} = 0 \tag{A.79}$$

La substitution de l'équation (A.79) dans (A.50) nous permet d'écrire

$$\hat{k}^{(0)}\frac{\partial \hat{T}^{(1)}}{\partial \zeta} + \hat{k}^{(1)}\frac{\partial \hat{T}^{(0)}}{\partial \zeta} = C_2(\zeta_1,\zeta_2) \tag{A.80}$$

où $C_2(\zeta_1,\zeta_2)$ est une fonction indépendante de ζ. On obtient finalement à partir des conditions de raccord (C.3a) et (C.4b)

$$\mathbf{n}\cdot\left[\breve{k}^{(0)}\nabla\breve{T}^{(0)}\right]_{0^-}^{0^+} = 0 \tag{A.81}$$

A partir de la relation (A.81), on peut conclure que **le gradient de température est continu à travers l'interface**.

En résumé, le modèle "sharp" associé au modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes compositionnel est défini par les deux systèmes d'équations aux dérivées partielles (A.10) et (A.11) couplés par les relations (A.63), (A.66), (A.77) et (A.81).

Annexe B

Système de coordonnées généralisé

B.1 Définition d'un système de coordonnées lié à l'interface

Sur la base des développements proposés dans [65], on se propose ici de définir un système de coordonnées lié à l'interface $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$ où ζ_1 et ζ_2 mesurent la distance selon les directions principales de l'interface et ζ_3 la distance selon la direction normale. Si on note $\mathbf{r}$ l'abscisse curviligne et $\mathbf{n}$ le vecteur unitaire normal à l'interface alors tout point M s'exprime dans le système $(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)$ comme

$$\mathbf{OM} = \mathbf{r}(\zeta_1, \zeta_2) + \zeta_3 \mathbf{n} \tag{B.1}$$

On adopte ici pour l'ensemble des développements la notation indicielle d'Einstein. La base naturelle associée à ce système de coordonnées curvilignes est définie par

$$\{\mathbf{g_i}\} = \left\{ \frac{\partial \mathbf{OM}}{\partial \zeta_\mathbf{i}} \right\} \tag{B.2}$$

Soit, à partir de la relation (B.1)

$$\mathbf{g}_1 = (1 - \gamma_1 \zeta_3)\mathbf{t_1} \tag{B.3a}$$
$$\mathbf{g}_2 = (1 - \gamma_2 \zeta_3)\mathbf{t_2} \tag{B.3b}$$
$$\mathbf{g}_3 = \mathbf{n} \tag{B.3c}$$

où $\mathbf{t_1}$ et $\mathbf{t_2}$ sont les vecteurs unitaires tangents à l'interface et les coefficients γ_1 et γ_2 désignent les courbures principales de l'interface. La base duale de la base naturelle, notée $\{\mathbf{g}^j\}$, est définie par

$$\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}^j = \delta_{ij} \tag{B.4}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker. On définit maintenant les facteurs d'échelles h_1,h_2 et h_3 par

$$h_i = \sqrt{\mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_i} \tag{B.5}$$

Soit, à partir des relations (B.3)

$$h_1 = 1 - \gamma_1 \zeta_3 \tag{B.6a}$$
$$h_2 = 1 - \gamma_2 \zeta_3 \tag{B.6b}$$
$$h_3 = 1 \tag{B.6c}$$

Comme la base naturelle n'est pas orthonormée, on définit une base physique orthonormée comme suit

$$\{\tilde{\mathbf{g}}_i\} := \left\{ \frac{\mathbf{g}_i}{h_i} \right\} = \{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{n}\} \tag{B.7}$$

B.2 Développement des opérateurs de dérivées spatiale et temporelle

On exprime dans cette partie les opérateurs de dérivée spatiale et temporelle dans le système de coordonnées curvilignes précédemment défini. Pour cela, il est nécessaire d'introduire les symboles de Christoffel Γ_{ij}^k définis par

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2}\mathbf{g}^{\mu k}\left(\mathbf{g}_{j\mu,i} + \mathbf{g}_{i\mu,j} - \mathbf{g}_{ij,\mu}\right) \tag{B.8a}$$

$$\Gamma_{ij}^k = \Gamma_{ji}^k \tag{B.8b}$$

Soit, en développant

$$\left[\Gamma_{i,j}^1\right] = \begin{bmatrix} -\frac{\zeta_3}{h_1}\gamma_{1,1} & -\frac{\zeta_3}{h_1}\gamma_{1,2} & -\frac{\gamma_1}{h_1} \\ -\frac{\zeta_3}{h_1}\gamma_{1,2} & \zeta_3\frac{h_2}{{h_1}^2}\gamma_{2,1} & 0 \\ -\frac{\gamma_1}{h_1} & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad ; \quad \left[\Gamma_{i,j}^2\right] = \begin{bmatrix} \zeta_3\frac{h_1}{{h_2}^2}\gamma_{1,2} & -\frac{\zeta_3}{h_2}\gamma_{2,1} & 0 \\ -\frac{\zeta_3}{h_2}\gamma_{2,1} & -\frac{\zeta_3}{h_2}\gamma_{2,2} & -\frac{\gamma_2}{h_2} \\ 0 & -\frac{\gamma_2}{h_2} & 0 \end{bmatrix} \tag{B.9a}$$

$$\Gamma_{1,1}^3 = \gamma_1 h_1 \quad ; \quad \Gamma_{2,2}^3 = \gamma_2 h_2 \tag{B.9b}$$

où $\gamma_{i,j}$ désigne la dérivée partielle de la courbure principale i par rapport à la variable ζ_j. Les dérivées des vecteurs de la base naturelle et de la base physique s'écrivent à partir des coefficients de Christoffel sous la forme

$$\frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \zeta_j} = \Gamma_{ij}^k \mathbf{g}_k \tag{B.10}$$

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{g}}_i}{\partial \zeta_j} = \frac{h_k}{h_i}\Gamma_{ij}^k \tilde{\mathbf{g}}_k - \frac{h_{i,j}}{h_i}\tilde{\mathbf{g}}_i \tag{B.11}$$

où $h_{i,j}$ désigne la dérivée partielle du facteur d'échelle i par rapport à la variable ζ_j. Ces coefficients s'écrivent

$$h_{i,j} = -\zeta_3\gamma_{i,j} \quad (i,j=1,2) \tag{B.12}$$

$$h_{i,3} = -\gamma_i \quad (i=1,2) \tag{B.13}$$

$$h_{3,i} = 0 \quad (i=1,2,3) \tag{B.14}$$

Par simplicité, la base naturelle est choisie ici comme base de référence pour exprimer les différents opérateurs de dérivée spatiale et temporelle dans le système de coordonnées curvilignes.

B.2.1 Gradient d'un scalaire

Soit Φ un scalaire (*e.g.* φ_i, $\tilde{\mu}_1$, T, $\tilde{\tilde{p}}$). Le gradient de Φ exprimé dans la base naturelle s'écrit

$$\nabla\Phi = \frac{1}{h_1^2}\frac{\partial\Phi}{\partial\zeta_1}\mathbf{g}_1 + \frac{1}{h_2^2}\frac{\partial\Phi}{\partial\zeta_2}\mathbf{g}_2 + \frac{1}{h_3^2}\frac{\partial\Phi}{\partial\zeta_3}\mathbf{g}_3 \tag{B.15}$$

B.2.2 Gradient d'un vecteur

Soit $\mathbf{\Phi}$ un vecteur (*e.g.* $\mathbf{u}$). on peut écrire la relation ci-dessous :

$$d\mathbf{\Phi} = \frac{\partial\mathbf{\Phi}}{\partial\zeta_i}d\zeta^i = \frac{\partial\Phi^j\mathbf{g}_j}{\partial\zeta_i}d\zeta^i \tag{B.16}$$

Soit, en développant

$$d\mathbf{\Phi} = \left(\frac{\partial \Phi^j}{\partial \zeta_i} \mathbf{g}_j + \Phi^j \frac{\partial \mathbf{g}_j}{\partial \zeta_i} \right) d\zeta^i \tag{B.17}$$

Soit, à partir de (B.10)

$$d\mathbf{\Phi} = \left(\frac{\partial \Phi^j}{\partial \zeta_i} \mathbf{g}_j + \Phi^k \Gamma^j_{ik} \mathbf{g}_j \right) d\zeta^i \tag{B.18}$$

Le gradient d'un vecteur s'écrit alors

$$\nabla \mathbf{\Phi} = \left(\frac{\partial \Phi^j}{\partial \zeta_i} + \Phi^k \Gamma^j_{ik} \right) \mathbf{g}_j \otimes \mathbf{g}^i \tag{B.19}$$

Ainsi les composantes du gradient d'un vecteur Φ dans la base naturelle sont données par

$$(\nabla \mathbf{\Phi})^j_i = \frac{\partial \Phi^j}{\partial \zeta_i} + \Phi^k \Gamma^j_{ik} \tag{B.20}$$

B.2.3 Divergence d'un vecteur

Soit $\mathbf{\Phi}$ un vecteur (*e.g.* $\mathbf{u}$). Puisque la divergence d'un vecteur est définie comme la trace du gradient de ce vecteur, la divergence de $\mathbf{\Phi}$ s'écrit dans la base naturelle

$$\nabla \cdot \mathbf{\Phi} = \frac{\partial \Phi^i}{\partial \zeta_i} + \Phi^k \Gamma^i_{ik} \tag{B.21}$$

B.2.4 Divergence du gradient d'un champ scalaire

La divergence du gradient d'un champ scalaire $a\nabla\Phi$ (*e.g.* $M_i \nabla \tilde{\mu}_1$, $\mathbf{j}$, $\lambda \nabla \varphi_1$) s'écrit à partir des relations (B.15) et (B.21)

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (a \nabla \Phi) &= \frac{\partial}{\partial \zeta_i} \frac{a}{h_i^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \zeta_i} + \frac{a}{h_k^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \zeta_k} \Gamma^i_{ik} && \text{(B.22a)} \\ &= a \left(\frac{1}{h_i^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial {\zeta_i}^2} - 2 \frac{h_{i,i}}{h_i^3} \frac{\partial \Phi}{\partial \zeta_i} + \frac{1}{h_k^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \zeta_k} \Gamma^i_{ik} \right) \quad \text{si } a \text{ est constant} && \text{(B.22b)} \end{aligned}$$

B.2.5 Divergence d'un tenseur d'ordre deux

Soit $\mathbf{\Pi}$ un tenseur d'ordre deux (*e.g.* $\boldsymbol{\tau}$). Comme pour un champ vectoriel, la divergence d'un tenseur peut être obtenue à partir du gradient. Le gradient de $\mathbf{\Pi}$ s'écrit dans la base naturelle

$$\begin{aligned} d\mathbf{\Pi} &= d\mathbf{\Pi}^{i,j} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j + \mathbf{\Pi}^{i,j} d\mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j + \mathbf{\Pi}^{i,j} \mathbf{g}_i \otimes d\mathbf{g}_j \\ &= \frac{\partial \mathbf{\Pi}^{i,j}}{\partial \zeta_k} d\zeta^k \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j + \mathbf{\Pi}^{i,j} \frac{\partial \mathbf{g}_i}{\partial \zeta_k} \otimes \mathbf{g}_j d\zeta^k + \mathbf{\Pi}^{i,j} \mathbf{g}_i \otimes \frac{\partial \mathbf{g}_j}{\partial \zeta_k} d\zeta^k \\ &= \frac{\partial \mathbf{\Pi}^{i,j}}{\partial \zeta_k} d\zeta^k \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j + \mathbf{\Pi}^{i,j} \Gamma^l_{ik} \mathbf{g}_l \otimes \mathbf{g}_j d\zeta^k + \mathbf{\Pi}^{i,j} \Gamma^l_{jk} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_l d\zeta^k \\ &= \frac{\partial \mathbf{\Pi}^{i,j}}{\partial \zeta_k} d\zeta^k \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j + \mathbf{\Pi}^{l,j} \Gamma^i_{lk} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j d\zeta^k + \mathbf{\Pi}^{i,l} \Gamma^j_{lk} \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j d\zeta^k \\ &= \left(\frac{\partial \mathbf{\Pi}^{i,j}}{\partial \zeta_k} + \mathbf{\Pi}^{l,j} \Gamma^i_{lk} + \mathbf{\Pi}^{i,l} \Gamma^j_{lk} \right) \mathbf{g}_i \otimes \mathbf{g}_j d\zeta^k \end{aligned} \tag{B.23}$$

La composante (i, j, k) du gradient d'un tenseur d'ordre deux s'écrit alors dans la base naturelle

$$(\nabla \mathbf{\Pi})^{i,j}_k = \frac{\partial \mathbf{\Pi}^{i,j}}{\partial \zeta_k} + \mathbf{\Pi}^{l,j} \Gamma^i_{lk} + \mathbf{\Pi}^{i,l} \Gamma^j_{lk} \tag{B.24}$$

A partir de la relation , on obtient composante i de la divergence d'un tenseur d'ordre deux sous la forme

$$(\nabla \cdot \mathbf{\Pi})^i = \frac{\partial \mathbf{\Pi}^{i,k}}{\partial \zeta_k} + \mathbf{\Pi}^{l,k}\Gamma^i_{lk} + \mathbf{\Pi}^{i,l}\Gamma^k_{lk} \tag{B.25}$$

B.2.6 Dérivée temporelle

On introduit ici la vitesse de déplacement de l'interface $\mathbf{u}_i$ défini par

$$\mathbf{u}_i = \left(\frac{\partial \zeta_1}{\partial t}, \frac{\partial \zeta_2}{\partial t}, \frac{\partial \zeta_3}{\partial t}\right)^T \tag{B.26}$$

Comme dans [98], on suppose ici que la vitesse d'interface est uniforme en ζ. La dérivée en temps d'un champ Φ (*e.g.* φ_i, T, $\mathbf{u}$) s'écrit dans le repère lié à l'interface sous la forme

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} - \mathbf{u}_i \cdot \nabla \Phi \tag{B.27}$$

L'opérateur gradient dans la relation (B.27) est également défini dans le repère lié à l'interface.

Annexe C

Raccord asymptotique

On présente ici brièvement les conditions de raccord asymptotique (*e.g.* [61, 105, 148, 154]) nécessaire à la dérivation des relations de saut à l'interface. On suppose ici que l'interface est positionnée en $\zeta_3 = 0$ (ou $\varphi_1 = 0.5$) et qu'il existe une zone dite de recouvrement au sein de laquelle les solutions intérieure et extérieure peuvent être raccordées.

Les conditions de raccord asymptotique s'applique aux fonctions, aux fonctions composées ainsi qu'aux dérivées. Elles s'écrivent formellement

$$\lim_{\zeta\to\infty} \hat{\Phi}(\zeta) = \lim_{\zeta_3\to 0} \breve{\Phi}(\zeta_3) \tag{C.1a}$$

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial\hat{\Phi}(\zeta)}{\partial\zeta} = C \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial\breve{\Phi}(\zeta_3)}{\partial\zeta_3} \tag{C.1b}$$

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial^2\hat{\Phi}(\zeta)}{\partial\zeta^2} = C^2 \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial^2\breve{\Phi}(\zeta_3)}{\partial{\zeta_3}^2} \tag{C.1c}$$

Si on prolonge chaque fonction extérieure au voisinage de l'interface à partir d'un développement de Taylor alors on peut écrire

$$\breve{\Phi}^{(k)}(\zeta_3) = \breve{\Phi}^{(k)}(0) + C\zeta\frac{\partial\breve{\Phi}^{(k)}(0)}{\partial\zeta_3} + C^2\zeta\frac{\partial^2\breve{\Phi}^{(k)}(0)}{\partial{\zeta_3}^2} + \ldots \quad ,\forall\, k \tag{C.2}$$

A partir de cette relation et des conditions de raccords (C.1), on peut écrire

$$\lim_{\zeta\to\infty} \hat{\Phi}^{(0)}(\zeta) = \lim_{\zeta_3\to 0} \breve{\Phi}^{(0)}(\zeta_3) \text{ à l'ordre 0} \tag{C.3a}$$

$$\lim_{\zeta\to\infty} \hat{\Phi}^{(1)}(\zeta) = \zeta \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial\breve{\Phi}^{(0)}(\zeta_3)}{\partial\zeta_3} + \lim_{\zeta_3\to 0} \breve{\Phi}^{(1)}(\zeta_3) \text{ à l'ordre 1} \tag{C.3b}$$

$$\lim_{\zeta\to\infty} \hat{\Phi}^{(2)}(\zeta) = \zeta^2 \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial^2\breve{\Phi}^{(0)}(\zeta_3)}{\partial{\zeta_3}^2} + \zeta \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial\breve{\Phi}^{(1)}(\zeta_3)}{\partial\zeta_3} + \lim_{\zeta_3\to 0} \breve{\Phi}^{(2)}(\zeta_3) \text{ à l'ordre 2} \tag{C.3c}$$

Les conditions de raccord pour les dérivées d'ordre un sont données par

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial\hat{\Phi}^{(0)}(\zeta)}{\partial\zeta} = 0 \text{ à l'ordre 0} \tag{C.4a}$$

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial\hat{\Phi}^{(1)}(\zeta)}{\partial\zeta} = \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial\breve{\Phi}^{(0)}(\zeta_3)}{\partial\zeta_3} \text{ à l'ordre 1} \tag{C.4b}$$

(C.4c)

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial\hat{\Phi}^{(2)}(\zeta)}{\partial\zeta} = \zeta \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial^2\breve{\Phi}^{(0)}(\zeta_3)}{\partial{\zeta_3}^2} + \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial^2\breve{\Phi}^{(1)}(\zeta_3)}{\partial{\zeta_3}^2} \text{ à l'ordre 2} \tag{C.4d}$$

Soit encore pour les dérivées d'ordre deux

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial^2 \hat{\Phi}^{(0)}(\zeta)}{\partial \zeta^2} = 0 \text{ à l'ordre 0} \tag{C.5a}$$

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial^2 \hat{\Phi}^{(1)}(\zeta)}{\partial \zeta^2} = 0 \text{ à l'ordre 1} \tag{C.5b}$$

$$\lim_{\zeta\to\infty} \frac{\partial^2 \hat{\Phi}^{(2)}(\zeta)}{\partial \zeta^2} = \lim_{\zeta_3\to 0} \frac{\partial^2 \breve{\Phi}^{(0)}(\zeta_3)}{\partial {\zeta_3}^2} \text{ à l'ordre 2} \tag{C.5c}$$

On s'intéresse désormais aux fonctions composées comme par exemple le potentiel $W_i(\varphi_1)$. Le développement asymptotique d'une fonction composée $\Phi(\phi)$ s'écrit

$$\Phi(\phi) = \Phi^{(0)}(\phi) + C\Phi^{(1)}(\phi) + C^2\Phi^{(2)}(\phi) + \mathcal{O}\left(C^3\right) \tag{C.6}$$

où la fonction ϕ peut également être développée sous la forme suivante

$$\phi = \phi^{(0)} + C\phi^{(1)} + C^2\phi^{(2)} + \mathcal{O}\left(C^3\right) \tag{C.7}$$

La fonction composée $\Phi(\phi)$ s'écrit encore à partir d'un développement de Taylor en $\phi^{(0)}$

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi^{(0)})) + \left(\phi - \phi^{(0)}\right) \frac{d\Phi(\phi^{(0)})}{d\phi} + \frac{1}{2}\left(\phi - \phi^{(0)}\right)^2 \frac{d^2\Phi(\phi^{(0)})}{d\phi^2} + O\left(\left(\phi - \phi^{(0)}\right)^3\right) \tag{C.8}$$

Soit encore à partir de (C.7)

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi^{(0)})) + C\frac{d\Phi(\phi^{(0)})}{d\phi}\phi^{(1)} + C^2\frac{d^2\Phi(\phi^{(0)})}{d\phi^2}{\phi^{(1)}}^2 + O\left(\left(\phi - \phi^{(0)}\right)^3\right) \tag{C.9}$$

On peut ainsi écrire en comparant les relations (C.6) et (C.9)

$$\Phi^{(0)}(\phi) = \Phi(\phi^{(0)})) \tag{C.10a}$$

$$\Phi^{(1)}(\phi) = \frac{d\Phi(\phi^{(0)})}{d\phi}\phi^{(1)} \tag{C.10b}$$

$$\Phi^{(2)}(\phi) = \frac{d^2\Phi(\phi^{(0)})}{d\phi^2}{\phi^{(1)}}^2 + \frac{d\Phi(\phi^{(0)})}{d\phi}\phi^{(2)} \tag{C.10c}$$

Enfin, les conditions de raccords pour les fonctions composées s'obtiennent en appliquant les relations (C.3) aux équations (C.10).

Bibliographie

[1] `https://gforge.irsn.fr/gf/project/pelicans/`.

[2] Y. Achdou, P. Le Tallec, F. Valentin, and O. Pironneau. Constructing Wall Laws with Domain Decomposition or Asymptotic Expansion Techniques. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 151 :215–232, 1998.

[3] Y. Achdou, O. Pironneau, and F. Valentin. Effective boundary conditions for laminar flows over periodic rough boundaries. *Journal of Computational Physics*, 147 :187–218, 1998.

[4] L. Adjlout, O. Imine, A. Azzi, and M. Belkadi. Laminar natural convection in an inclined cavity with a wavy wall. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(10) :2141–2152, may 2002.

[5] D. M. Anderson, G. B. McFadden, and A. A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanic*, 30 :139–165, 1998.

[6] D. M. Anderson, G. B. McFadden, and A. A. Wheeler. A phase-field model with convection : sharp-interface asymptotics. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 151(2-4) :305–331, may 2001.

[7] L. K. Antanovskii. A phase field model of capillary. *Phys. Fluids*, 1995.

[8] Y. Aspa. *Modélisation de l'ablation des composites C/C dans les tuyères*. Energétique et transferts, Ecole doctorale Tyfep. Institut National Polytechnique de Toulouse (INPT), 2006.

[9] J.-L. Auriault. About the Beavers and Joseph Boundary Condition. *Transport in Porous Media*, 83(2) :257–266, jun 2010.

[10] M. Barrachin. Methodology of calculation for the corium-concrete mixture properties. Technical report SEMIC-2006-246, IRSN/DPAM/SEMIC/LETR, 2006.

[11] G. B. Barrenechea, P. Le Tallec, and F. Valentin. New wall laws for the unsteady incompressible Navier-Stokes equations on rough domains. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 36(2) :177–203, 2002.

[12] A. Basson and D. Gérard-Varet. Wall laws for fluid flows at a boundary with random roughness. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, LXI :941–987, 2008.

[13] Z. P. Bazant and M. F. Kaplan. *Concrete at High Temperatures : Material Properties and Mathematical Models*. London : Longman (Addison-Wesley), 1996.

[14] G. S. Beavers and Joseph D D. Boundary conditions at a naturally permeable wall. *Journal of Fluid Mechanics*, 30(1) :197–207, 1967.

[15] R. Becker and M. Braack. Solution of a stationary benchmark problem for natural convection with large temperature difference. *International Journal of Thermal Sciences*, 41(5) :428–439, 2002.

[16] A. Benkenida and J. Magnaudet. Une méthode de simulation d'écoulements diphasiques sans reconstruction d'interfaces. *C. R. Acad. Sci. Paris, t. 328, Série II b*, 2000.

[17] L. Benkheira, J.F. Haquet, and C. Journeau. Etude des relations vitesse superficielle - taux de vide dans les fluides complexes : application au bullage des gaz dans un bain de corium. Note technique NT-STH/LMA-03/026, CEA/DEN, 2003.

[18] L. Bo, J. Lowengrub, A. Rätz, and A. Voigt. Geometric Evolution Laws for Thin Crystalline Films. *Communications in Computational Physics*, 6, 2009.

[19] J. M. Bonnet. Thermal hydraulic phenomena in corium pools for ex-vessel situations : the Bali experiment. *Proceedings of the Eighth International Conference on Nuclear Engineering, Baltimore*, 2000.

[20] T. Bonometti and J. Magnaudet. An interface-capturing method for incompressible two-phase flows. Validation and application to bubble dynamics. *International Journal of Multiphase Flow*, 33, 2007.

[21] F. Boyer. Mathematical study of multi-phase flow under shear through order parameter formulation. *Asymptotic Analysis*, 20, 1999.

[22] F. Boyer. A theoretical and numerical model for the study of incompressible mixture flows. *Computers & Fluids*, 2000.

[23] F. Boyer, F. Duval, C. Introïni, J.C. Latché, and B. Piar. Extracting a bubble from the computational domain in Cahn-Hilliard/Navier-Stokes simulations. Poster : CIRM, 2009.

[24] F. Boyer and P. Fabrie. Outflow boundary conditions for the incompressible non-homogeneous navier-stokes equations. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, 2007.

[25] F. Boyer and C. Lapuerta. Study of a three component Cahn-Hilliard flow model. *M2AN Modélisation Mathématique et Analyse Numérique*, 40(4) :653–687, 2006.

[26] F. Boyer, C. Lapuerta, S. Minjeaud, B. Piar, and M. Quintard. Cahn-Hilliard/Navier-Stokes Model for the Simulation of Three-Phase Flows. *Transport In Porous Media*, 82, 2009.

[27] D. R. Bradley. Modelling of heat transfer between core debris and concrete. *ANS Proc. Natl. Heat Transfer Conf. 3. Houston, TX.*, pages 37–49, 1988.

[28] W. A. Brinsfield. *Heat transfer from a heated pool to a melting miscible substrate.* PhD thesis, UCLA, 1979.

[29] A. Brooks and T. J. R. Hughes. Streamline Upwind/Petrov-Galerkin Formulations for Convection Dominated Flows with Particular Emphasis on the Incompressible Navier-Stokes Equations. *IComput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 32 :199–259, 1982.

[30] E. Burman and P. Hansbo. Edge stabilization for Galerkin approximations of convection-diffusion-reaction problems. *IComput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193 :1437–1453, 2004.

[31] L. Carenini, J. F. Haquet, and C. Journeau. Etude de l'interaction entre un bain de corium et le béton d'un puits de cuve de réacteur : application aux essais VBU4 à VBU6. Note technique DTN/STRI/LMA/2006-024, CEA/DEN, 2006.

[32] L. Carenini, J.F. Haquet, and C. Journeau. Crust formation and dissolution during corium concrete interaction. *Proceedings of ICAPP*, 2007.

[33] A. Carrau. *Modélisation numérique d'un écoulement sur paroi rugueuse.* Mathématiques appliquées, Université de Bordeaux I, 1992.

[34] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger. *Conduction of Heat in Solids.* Oxford University Press, second edition, 1959.

[35] I. Catton, W. A. Brinsfield, and Ghiaasiaan S. M. Heat transfer from a heated pool to a melting miscible substrate. *Journal Heat Transfer*, 105 :447–453, 1983.

[36] G. Cenerino. Interaction corium-béton. Etude bibliographique. Note technique SAER/84/397, IRSN, 1983.

[37] M. Chandesris and D. Jamet. Boundary conditions at a planar fluid-porous interface for a Poiseuille flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49 :2137–2150, 2006.

[38] M. Chandesris and D. Jamet. Jump conditions and surface-excess quantities at a fluid/porous interface : A multi-scale approach. *Transport in Porous Media*, 78(3) :419–438, jul 2009.

[39] F. B Cheung. Free convection heat and mass transfer during pool penetration into a melting miscible substrate. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 30 :1061–1075, 1987.

[40] B. Cheynet, P. Chaud, P.-Y. Chevalier, P. Mason, and M. Mignanelli. NUCLEA propriétés thermodynamiques et équilibre de phases dans les systèmes d'intéret nucléaire. *Journal de Physique IV*, 113 :61–64, 2004.

[41] L. Chupin. *Contribution à l'étude des mélanges de fluides visco-élastiques.* PhD thesis, Université de Bordeaux I, 2003.

[42] M. Cranga, R. Fabianelli, F. Jacq, M. Barrachin, and F. Duval. The MEDICIS code, a versatile tool for MCCI modelling. *Proceedings of ICAPP' 05. Korea*, 2005.

[43] I. F. Davenport and C. J. King. A note on Howard's model for turbulent natural convection. *Journal Heat Transfer*, 97 :476–478, 1975.

[44] T. A. Davis. Algorithm 832 : Umfpack-an unsymmetric-pattern multifrontal method. ACM. *Transactions on Mathematical Software*, pages 196–199, 2004.

[45] G. De Vahl Davis. Natural Convection of Air in a Square Cavity : a Benchmark Numerical Solution. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 3 :249–264, 1983.

[46] A. Debussche and L. Dettori. On the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy. *Nonlinear Analysis, Theory, Methods & Applications*, 24, 1995.

[47] W. D. Deckwer. On the mechanism of heat transfer in bubble column reactors. *Chemical Engineering Science*, 35 :1341–1346, 1980.

[48] L. Demajančuková. *Simulation numérique de l'écoulement sanguin dans les artères souples de grandes dimensions.* Mécanique, Université de la Méditerranée Aix-Marseille II, 2007.

[49] M. R. Duignan, G. A. Greene, and T. F. Irvine Jr. Heat transfer from a horizontal bubbling surface to an overlying water pool. *Chem. Eng. Comm.*, 87 :185–194, 1990.

[50] F. Duval. Impact de l'épaisseur de tranche du dispositif CLARA sur l'hydrodynamique du bain : pré-calculs TOPASE. Rapport technique DPAM-SEMIC-2008-360, IRSN/DPAM/SEMIC, 2008.

[51] D. Einzel, P. Panzer, and M. Liu. Boundary condition for fluid flow : curved or rough surfaces. *Physical Review Letters*, 64(19), 1990.

[52] C. M. Elliott and S. Luckhaus. A generalised diffusion equation for phase separation of a multi-component mixture with interfacial free energy. IMA Preprint Series 887, oct 1991.

[53] M. Epstein. A natural convection model of molten pool penetration into a melting miscible substrate. *Nuclear Engineering and Design*, 152 :319–330, 1994.

[54] M. Epstein. *Thermal Hydraulics of Molten Core-Concrete Interactions : A review and comparison of Heat Transfer Models with Data, Interpretation of Rheological Data,and A Theory for the Onset of Concrete Spallation.* 1998.

[55] M. Epstein. A model of heat and mass transfer beneath an ablating concrete surface. *Journal of Heat Transfer*, 126 :290–294, 2004.

[56] M. Epstein and M. A. Grolmes. Natural convection characteristics of pool penetration into a melting miscible substrate. *Transactions of the ASME*, 108 :190–197, 1986.

[57] M. Epstein, M. A. Grolmes, and H. K. Fauske. Melt fingers and pool penetration into a miscible substrate. Technical report DOE/NE/37253–T2, Fauske & Associates, Inc., 1982.

[58] L. J. Fang, F. B. Cheung, J. H. Linehan, and D. R. Pedersen. An experimental study of natural convection melting of ice in salt solutions. Technical report CONF-841201–10, Reactor Analysis and Safety Division. Argonne National Laboratory, 1984.

[59] R. Farhadieh and L. Jr. Baker. Heat transfer phenomenology of a hydrodynamically unstable melting system. *Journal Heat Transfer*, 100 :305–310, 1978.

[60] L. Ferry, M. Breton, J. Monerris, Y. Bullado, F. Compagnon, G. Fritz, P. Correggio, and N. Cassiaut-Louis. Interaction corium-béton en bain tout oxyde sur l'installation VULCANO : essai VB-U7 - Béton FeSiCo (EPR). Note technique NT/2010/002/0, CEA/DEN/DTN/STRI/LMA, 2010.

[61] C. Fouillet. *Généralisation à des mélanges binaires de la méthode du second gradient et application à la simulation numérique directe de l'ébullition nuclée.* PhD thesis, Université de Paris 6, 2003.

[62] Y. Fraigneau, J. L. Guermond, and L. Quartapelle. Approximation of variable density incompressible flows by means of finite elements and finite volumes. *Commun. Numer. Meth. Engng*, 17, 2001.

[63] C. Gabillet, C. Colin, and J. Fabre. Experimental study of bubble injection in a turbulent boundary layer. *International Journal of Multiphase Flow*, 28 :553–578, 2002.

[64] C. Galusinski and P. Vigneaux. On stability condition for bifluid flows with surface tension : application to microfluidics. *Journal of Computational Physics*, 227 :6140–6164, 2008.

[65] J. Garrigues. Eléments d'algèbre et d'analyse tensorielle à l'usage des mécaniciens. 2001.

[66] B. Georgali and P. E. Tsakiridis. Microstructure of fire-damaged concrete. a case study. *Cement and Concrete Composites*, 27(2) :255–259, feb 2005.

[67] E. Georgieva, J. F. Haquet, and C. Journeau. SARNET 2 Project : Definition of the benchmark recalculations of VULCANO VB-U5 and VB-U6. Progress report DEN/DTN/STRI/LMA/NT/2009/028/0, CEA, 2009.

[68] D. Gerlach, N. Alleborn, V. Buwa, and F. Durst. Numerical simulation of periodic bubble formation at a submerged orifice with constant gas flow rate. *Chemical Engineering Science*, 62, 2007.

[69] A. E. Gill. The Boundary-Layer Regime for Convection in a Rectangular Cavity. *Journal of Fluid Mechanics*, 26(3) :515–536, 1966.

[70] B. Goyeau, D. Lhuillier, D. Gobin, and M. G. Verlade. Momentum Transport at a Fluid-Porous Interface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(21) :4071–4081, oct 2003.

[71] B. Goyeau, J.-P. Songbe, and D. Gobin. Numerical study of double-diffusive natural convection in a porous cavity using the Darcy-Brinkman formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 39(7) :1363–1378, may 1996.

[72] De Groot and Mazur. *Non-equilibrium thermodynamics*. Dover publications, 1983.

[73] J. L. Guermond. On the use of the notion of suitable weak solutions in CFD. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 57 :1153–1170, 2008.

[74] J. L. Guermond and Pasquetti. Entropy-based nonlinear viscosity for fourier approximations of conservation laws. *C. R. Acad. Sci., Ser. I,*, 346 :801–806, 2008.

[75] J. L. Guermond and B. Pasquetti, R. Popov. Entropy viscosity method for nonlinear conservation laws. *J. Comput. Phys.*, 2010.

[76] J. L. Guermond and B. Pasquetti, R. Popov. From suitable weak solutions to entropy viscosity. *Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations II, ERCOFTAC Series, Springer*, 2010.

[77] J. L. Guermond and L Quartapelle. Calculation of Incompressible Viscous Flows by an Unconditionnally Stable Projection FEM. *Journal of Computational Physics*, 132 :12–33, 1997.

[78] J. L. Guermond and L. Quartapelle. A projection FEM for variable density incompressible flows. *Journal Computational Physics*, 165, 2000.

[79] N.F. Harman, P. Winter, and M.A. Mignanelli. MCCI Chemistry and Properties : Task PROP.A. Data Base of Critically Assessed Thermophysical Properties for MCCI and Melt Coolability. Technical report ACEX TR-C-16, EPRI, 2009.

[80] Hinch. *Perturbation Methods*. Cambridge University Press, 1991.

[81] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39 :201–205, 1981.

[82] C. Introïni. *Interaction entre un fluide à haute température et un béton : contribution à la modélisation des échanges de masse et de chaleur*. Mécanique énergétique, IMFT-INP Toulouse, 2010.

[83] C. Introïni, M. Quintard, and F. Duval. Cahn-hilliard modelling for a two-phase compositional system. *Progress in Computational Heat and Mass Transfers*, 2009.

[84] C. Introïni, M. Quintard, and F. Duval. Effective surface modeling for momentum and heat transfers over rough surfaces : application to a natural convection problem. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2010, (accepted).

[85] D. Jacqmin. Calculation of Two-Phase Navier-Stokes Flows Using Phase-Field Modeling. *Journal of Computational Physics*, 1999.

[86] W. Jäger and A. Mikelic. Modeling Effective Interface Laws for Transport Phenomena Between an Unconfined Fluid and a Porous Medium Using Homogenization. *Transport in Porous Media*, 78(3) :489–508, jul 2009.

[87] D. Jamet. *Etude des potentialités de la théorie du second gradient pour la simulation numérique directe des écoulements liquide-vapeur avec changement de phase*. Energétique, Ecole Centrale Paris, 1998.

[88] D. Jamet and L. Chupin. Proposition d'un modèle à interface diffuse incompressible et à masse volumique variable. unpublished, mars 2004.

[89] D. Jamet, O. Lebaigue, C. Morel, and B. Arcen. Toward a multi-scale approach of two-phase flow modeling in the context of DNB modeling. *Nuclear Engineering and Design*, 240(9) :2131–2138, 2010.

[90] Jer-Huan Jang, Wei-Mon Yan, and Hui-Chung Liu. Natural convection heat and mass transfer along a vertical wavy surface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(6) :1075–1083, mar 2003.

[91] M. Jobelin. *Méthodes de projection pour le calcul d'écoulements incompressibles ou dilatables*. Mathématiques, Ecole doctorale Mathématiques et Informatique de Marseille, 2006.

[92] M. Jobelin, C. Lapuerta, J.-C. Latché, Ph. Angot, and B. Piar. A finite element penalty-projection method for incompressible flows. *Journal of Computational Physics*, 217(2) :502–518, sep 2006.

[93] D.D. Joseph, A. Huang, and H. Hu. Non-solenoidal velocity effects and korteweg stresses in simple mixtures of incompressible liquids. *Physica D*, 97 :104–125, 1996.

[94] C. Journeau, P. Piluso, J.-F. Haquet, E. Boccaccio, V. Saldo, J.-M. Bonnet, S. Malaval, L. Carenini, and L. Brissonneau. Two-dimensional interaction of oxidic corium with concretes : the VULCANO VB test series. *Annals of Nuclear Energy*, 36 :1597–1613, 2009.

[95] L. S. Kao and M. S. Kazimi. A heat transfer model for core/concrete interaction. *AIChE Journal*, 83 :382–390, 1987.

[96] A. Karma and W.-J. Rappel. Quantitative Phase-Field Modeling of Dendritic Growth in Two and Three Dimensions. *Physical Review E*, 57(4) :4323–4349, apr 1998.

[97] R. C. Kerr. Melting driven by vigorous compositional convection. *J. Fluid Mech.*, 280 :255–285, 1994.

[98] D. Kessler. *Modelling, mathematical and numerical study of a solutal phase-field model*. Mathématiques, EPFL, 2001.

[99] J. Kim. *Modeling and simulation of multi-component, multi-phase fluid flows*. PhD thesis, University of California, 2002.

[100] J. Kim and J. Lowengrub. Phase field modeling and simulation of three-phase flows. *Interfaces and Free Boundaries*, 7(4) :435–466, 2005.

[101] J. Kim and J. Lowengrub. Interfaces and multicomponent fluids. *Encyclopedia of Mathematical Physics*, 2006.

[102] G. D. C. Kuiken. *Thermodynamics of irreversible processes. Applications to Diffusion and Rheology.* Wiley, 1994.

[103] S. S. Kutateladze. Boiling and bubbling heat transfer under free convection of liquid. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 22 :281–299, 1979.

[104] S. S. Kutateladze and I. G. Malenkov. Hydrodynamic analogy between heat transfer and nucleate boiling crisis in boiling and bubbling. *Heat Transfer Soviet Res.*, 16 :1–46, 1984.

[105] Lagerstrom, P. A. *Matched Asymptotic Expansions : ideas and techniques.* Springer-Verlag, 1988.

[106] C. Lapuerta. *Echanges de masse et de chaleur entre deux phases liquides stratifiées dans un écoulement à bulles.* Mathématiques Appliquées, Université de Provence, 2006.

[107] P. Le Quéré. Accurate solutions to the square thermally driven cavity at high Rayleigh number. *Computers Fluids*, 20(1) :29–41, 1991.

[108] P. Le Quéré and T. A. De Roquefort. Computation of natural convection in two-dimensional cavities with Chebyshev Polynomials. *Journal of Computational Physics*, 57 :210–228, 1985.

[109] M Lee, M. S. Kazimi, and G. Brown. A heat transfer model for the corium/concrete interface. *Proceedings ANS/ENS Int. Meet. on Severe Accident Evaluation, Cambrigde, MA*, pages 12.6–1–12.6–7, 1983.

[110] J. Lowengrub and L. Truskinovsky. Quasi-incompressible Cahn-Hilliard fluids and topological transitions. *Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 454 :2617–2654, 1998.

[111] S. Magdeleine. *Démonstration de la potentialité des méthodes SND diphasique à renseigner les modèles moyennés : Application à la colonne à bulles.* Mécanique des fluides, Energétique, Procédés, Ecole doctorale Ingénierie - Matériaux Mécanique Energétique Environnement Procédés Production. INP Grenoble, 2009.

[112] J.L. Marié, E. Moursali, and S. Tran-Cong. Similarity law and turbulence intensity profiles in a bubbly boundary at low void fractions. *International Journal of Multiphase Flow*, 23 :227–247, 1997.

[113] B. Michel and M. Cranga. Interpretation and calculation for the first series of tests for the ARTEMIS program (Corium-Concrete Iinteraction with simulating materials). *Nuclear Engineering and Design*, 239 :600–610, 2009.

[114] A. Mikelic and V. Devigne. Ecoulement tangentiel sur une surface rugueuse et loi de Navier. Annales Mathématiques Blaise Pascal, 2001.

[115] S. Minjeaud. *Raffinement local adaptatif et méthodes multiniveaux pour la simulation d'écoulements multiphasiques.* Mathématiques Appliquées, Université de Provence, 2010.

[116] S. Minjeaud and F. Boyer. Numerical schemes for a three component Cahn-Hilliard model. $http : //hal.archives - ouvertes.fr/hal - 00390065_v2/$, 2009.

[117] J. E. Mungall. Interfacial tension in miscible two-fluid systems with linear viscoelastic rheology. *Physical Review Letters*, 1993.

[118] J. E. Mungall. Empirical models relating viscosity and tracer diffusion in magmatic silicate melts. *Geochimica et Cosmochimica, Acta*, 66 :125–143, 2002.

[119] J. A. Ochoa-Tapia and S. Whitaker. Momentum Transfer at the Boundary Between a Porous Medium and a Homogeneous Fluid–I. Theoretical Development. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(14) :2635–2646, 1995.

[120] L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes I. *Physical Review*, 37, 1931.

[121] J. Park, Y. Kim, D. Wi, and N. Kang. A unified handling of immiscible and miscible fluids. unpublished, 2008.

[122] J. Patterson and J. Imberger. Unsteady Natural Convection in a Rectangular Cavity. *Journal of Fluid Mechanics*, 100(1) :66–86, 1980.

[123] A. Petroff. *Etude mécanistique du dépôt sec d'aérosols sur les couverts végétaux*. PhD thesis, IRPHE - Aix-Marseille II, 2005.

[124] I. V. Ponomarev and A. E. Meyerovich. Surface roughness and effective stick-slip motion, feb 2008.

[125] I. Prigogine and Nicolis G. *Self-organisation in nonequilibrium systems*. Wiley-Interscience, 1977.

[126] A. Quarteroni and A. Valli. *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*. Numerical Mathematics and Scientific Computation. Oxford University Press, 1999.

[127] 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. Review Article Number 40.

[128] M. Ramacciotti, C. Journeau, F. Sudreau, and G. Cognet. Viscosity models for corium melts. *Nuclear Engineering and Design*, 204 :377–389, 2001.

[129] M. F. Roche, L. Leibowitz, J.K. Fink, and L. Baker Jr. Solidus and liquidus temperatures of core-concrete mixtures. U. S. Nuclear Regulatory Commission Report NUREG/CR- 6032, Report ANL-93/9, Argonne National Laboratory, 1993.

[130] J.S. Rowlinson and B. Widom. *Molecular theory of capillarity*. 1989.

[131] P. Ruyer. *Modèle de champ de phase pour l'étude de l'ébullition*. Mécanique, Ecole Centrale de Lyon, 2006.

[132] M. Samaille and B. Duret. Compte rendu des essais technologiques CLARA. Note technique SE2T/LITA/NT/2009-019, CEA-DEN-DTN, 2009.

[133] M. Samaille and M. Raffin. ARTEMIS Mise à jour du descriptif de l'installation. Note technique SE2T/LPTM/2007-217, CEA-DEN-DTR, 2007.

[134] G. Sashikumaar and J. Volker. Pressure separation—a technique for improving the velocity error in finite element discretisations of the Navier-Stokes equations. *Applied. Mathematics and Computation*, 165(2) :275–290, 2005.

[135] H. Schlichting and K. Gersten. *Boundary layer theory.* Eighth Revised and Enlarged Edition, Springer, 2000.

[136] J. M. Seiler. Phase segregation model and molten pool thermal- hydraulics during molten core-concrete interaction. *Nuclear Engineering and Design*, 166 :259 ?267, 1996.

[137] O. Simonin, E. Deutsch, and J. P. Minier. Eulerian Prediction of the Fluid/Particle Correlated Motion in Turbulent Two-Phase Flows. *Applied Scientific Research*, 51 :275–283, 1993.

[138] A. Skokan, H. Holleck, and M. Peehs. Chemical reactions between light water reactor core melt and concrete. *Nuclear technology*, 46 :255–262, 1979.

[139] V. N. Starovoitov. Model of the motion of a two-component liquid with allowance of capillary forces. *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*, 35, 1994.

[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] K. Taghavi-Tafreshi and V. K. Dhir. Taylor instability in boiling, melting and condensation or evaporation. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 23 :1433–1445, 1980.

[142] B. Tourniaire. A heat transfer correlation based on a surface renewal model for molten core concrete interaction study. *Nuclear Engineering and Design*, 236(1) :10–18, 2006.

[143] A.A. Troshko and Y. A. Hassan. Law of the wall for two-phase turbulent boundary layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44 :871–875, 2001.

[144] G. Tryggvason. Numerical simulations of the Rayleigh-Taylor instability. *Journal of Computational Physics*, 75 :253–282, 1988.

[145] G. Tryggvason, B. Brunner, A. Esmaeeli, D. Juric, N. Al-Rawahi, N. 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.

[146] S. O. Unverdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100 :25–37, 1992.

[147] J.-P. Van Dorsselaere, P. Giordano, M. Kissane, T. Montanelli, B. Schwinges, and S. Ganju. The european source-term evaluation code ASTEC : status and applications, including candu plant applications. In *Sixth International Conference on Simulation Methods in Nuclear Engineering*, Canada, 2004.

[148] M. Van Dyke. *Perturbation Methods in fluid mechanics.* Academic Press, 1964.

[149] S. Veran, Y. Aspa, and M. Quintard. Effective boundary conditions for rough reactive walls in laminar boundary layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(15-16) :3712–3725, 2009.

[150] J.-M. Veteau, M. Samaille, and M. Raffin. Programme experimental CLARA dimensionnement de l'installation. Note technique SE2T/LPTM/2008-275, CEA-DEN-DTN, 2008.

[151] D. Vola, L. Boscardin, and J.C. Latché. Laminar unsteady flows of bingham fluids : a numerical strategy and some benchmark results. *Journal of Computational Physics*, 187 :441–446, 2003.

[152] S. Whitaker. *The Method of Volume Averaging*, volume 13 of *Theory and Applications of Transport in Porous Media*. Kluwer Academic Publishers, 1998.

[153] Lun-Shin Yao. Natural convection along a vertical complex wavy surface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 49(1-2) :281–286, jan 2006.

[154] Zwillinger. *Handbook of Differential Equations*. 1997.

Résumé

Lors d'un hypothétique accident grave de réacteur à eau sous pression, un mélange de matériaux fondus, appelé corium, issu de la fusion du cœur peut se relocaliser dans le puits de cuve constitué par un radier en béton. Les codes d'évaluation réacteur pour simuler la phénoménologie de l'interaction corium-béton sont basés sur une description à grande échelle des échanges qui soulève de nombreuses questions, tant sur la prise en compte des phénomènes multi-échelles mis en jeu que sur la structure adoptée de la couche limite au voisinage du front d'ablation. Dans ce contexte, l'objectif principal de ce travail consiste à aborder le problème de la structure de la couche limite par simulation numérique directe. Ce travail s'inscrit dans le cadre plus général d'une description et d'une modélisation multi-échelle des échanges, c'est-à-dire de l'échelle locale associée au voisinage du front d'ablation jusqu'à l'échelle du code d'évaluation réacteur. Une telle description multi-échelle des échanges soulève le problème de la description locale de l'écoulement multiphasique multiconstituant mais aussi le problème du changement d'échelle et en particulier le passage de l'échelle locale à l'échelle de description supérieure dite macroscopique associée aux mouvements convectifs dans le bain de corium. Parmi les difficultés associées au changement d'échelle, nous nous intéressons à la problématique de la construction de conditions aux limites effectives ou lois de parois pour les modèles macroscopiques. Devant la complexité du problème multiphasique multiconstituant posé au voisinage du front, cette contribution a été abordée sur un problème modèle. Des conditions aux limites dites effectives ont été construites dans le cadre d'une méthode de décomposition de domaine puis testées pour un problème d'écoulement laminaire de convection naturelle sur parois rugueuses. Même si le problème traité reste encore éloigné des applications visées, cette contribution offre de nombreuses perspectives et constitue une première étape d'une modélisation multi-échelle des échanges pour la problématique de l'interaction corium-béton. Dans le cas plus complexe des écoulements multiphasiques multiconstituants et devant les difficultés expérimentales associées, le développement de lois de parois pour les outils existants aux échelles de description supérieures nécessite, au préalable, de disposer d'un outil de simulation numérique directe de l'écoulement au voisinage du front d'ablation. L'outil développé dans ce travail correspond à un modèle de Cahn-Hilliard/Navier-Stokes pour un mélange diphasique (liquide-gaz) compositionnel (corium-béton fondu) s'appuyant sur une description du système selon trois paramètres d'ordre associés respectivement aux fractions volumiques du gaz et aux deux espèces miscibles de la phase liquide ainsi que sur une décomposition de l'énergie libre selon une contribution diphasique et compositionnelle. Les équations de transport sont dérivées dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles et résolues sur la base d'une application éléments finis de la plate-forme PELICANS. Plusieurs expériences numériques illustrent la validité et les potentialités d'application de cet outil sur des problèmes diphasiques et/ou compositionnels. Enfin, à partir de l'outil développé, nous abordons par simulation numérique directe une étude de la structure de la couche limite au voisinage du front d'ablation pour des bétons siliceux et silico-calcaire.

Mots-clefs : interaction corium-béton, méthode de décomposition de domaine, conditions aux limites effectives, surfaces rugueuses, simulation numérique directe, modèle de Cahn-Hilliard, écoulements diphasiques compositionnels.

Abstract

In the late phases of some scenario of hypothetical severe accident in Pressurized Water Reactors, a molten mixture of core and vessel structures, called corium, comes to interact with the concrete basemat. The safety numerical tools are lumped parameter codes. They are based on a large averaged description of heat and mass transfers which raises some uncertainties about the multi-scale description of the exchanges but also about the adopted boundary layer structure in the vicinity of the ablation front. In this context, the aim of this work is to tackle the problem of the boundary layer structure by means of direct numerical simulation. This work joins within the more general framework of a multi-scale description and a multi-scale modeling, namely from the local scale associated with the vicinity of the ablation front to the scale associated with the lumped parameter codes. Such a multi-scale description raises not only the problem of the local description of the multiphase multicomponent flow but also the problem of the upscaling between the local- and the macro-scale which is associated with the convective structures within the pool of corium. Here, we are particularly interested in the building of effective boundary conditions or wall laws for macro-scale models. The difficulty of the multiphase multicomponent problem at the local scale leads us to consider a relatively simplified problem. Effective boundary conditions are built in the frame of a domain decomposition method and numerical experiments are performed for a natural convection problem in a stamp shaped cavity to assess the validity of the proposed wall laws. Even if the treated problem is still far from the target applications, this contribution can be viewed as a first step of a multi-scale modeling of the exchanges for the molten core concrete issue. In the more complicated case of multiphase multicomponent flows, it is necessary to have a direct numerical simulation tool of the flow at the local scale to build wall laws for macro-scale models. Here, the developed tool corresponds to a Cahn-Hilliard/Navier-Stokes model for a two-phase compositional system. It relies on a description of the system by three volume fractions and on a free energy composed by a two-phase part and a compositional part. The governing equations are derived in the frame of the thermodynamic of irreversible processes. They are solved on the basis of a finite element application of the object-oriented software component library PELICANS. Several numerical experiments illustrate the validity and the potentialities of application of this tool on two-phase compositional problems. Finally, using the developed tool, we tackle by means of direct numerical simulation the problem boundary layer structure in the vicinity of the ablation front for limestone-sand and siliceous concretes.

Keywords : molten core concrete interaction, domain decomposition method, effective boundary conditions, rough surfaces, direct numerical simulation, Cahn-Hilliard models, two-phase compositional flows.