

Modèles n phases consistants de type Cahn-Hilliard

Franck Boyer, Aix Marseille Université

Sebastian Minjeaud, Univ. Nice Sophia Antipolis

Dans cette présentation, nous proposons une généralisation du système de Cahn-Hilliard deux phases à la modélisation de mélanges contenant n constituants.

Les modèles de Cahn-Hilliard sont des modèles de type interfaces diffuses; cela signifie que les interfaces entre les constituants sont représentées par des zones d'épaisseur ε faible mais non nulle. La position des phases est alors représentée par les inconnues du problème c_i , $i = 1, \dots, n$, appelées paramètres d'ordre, que l'on peut assimiler aux fractions volumiques des phases. Ils varient brusquement entre 0 et 1 (valeurs correspondant aux phases pures) mais de manière régulière dans les interfaces et vérifient la condition $\sum_{1 \leq i \leq n} c_i = 1$. L'évolution (en temps) des paramètres d'ordre est dictée par la minimisation de l'énergie libre du système qui tient compte des tensions de surface σ_{ij} , $1 \leq i \neq j \leq n$ entre les constituants du système et fait entrer en compétition deux termes: le premier est une combinaison linéaire des carrés des gradients des paramètres d'ordre $|\nabla c_i|^2$, il pénalise la finesse des interfaces; le second est une fonction non linéaire des paramètres d'ordre c_i , appelée potentiel de Cahn-Hilliard qui, à l'inverse du terme précédent, est minimale dans les phases pures.

Dans le cas où le système ne contient que deux constituants, la relation $c_1 = 1 - c_2$ permet de ne considérer qu'une seule inconnue notée c , et le système de Cahn-Hilliard, bien connu depuis [4], s'écrit comme suit

$$\begin{cases} \partial_t c = \operatorname{div}(M \nabla \mu), \\ \mu = \frac{12}{\varepsilon} \sigma f'(c) - \frac{3}{2} \sigma \varepsilon \Delta c, \end{cases}$$

où M est un coefficient de diffusion supposé constant ici; μ , le potentiel chimique, est la dérivée fonctionnelle de l'énergie libre par rapport à c ; et $f(c) = c^2(1 - c)^2$ est le potentiel de Cahn-Hilliard deux phases. Ce modèle a été généralisé au cas des mélanges contenant trois constituants dans plusieurs travaux. Nous nous intéressons ici plus particulièrement aux travaux de [1] où la construction du modèle trois phases proposé repose sur le principe de consistence, c'est-à-dire que le modèle trois phases coïncide exactement avec le modèle deux phases ci-dessus lorsque seulement deux phases sont présentes dans le système. Nous généralisons dans cette présentation cette démarche au cas de mélange contenant n constituants $n \geq 2$ (voir également [3]).

Nous donnons des conditions pour que les modèles obtenus soient bien posés. Nous présenterons également des résultats numériques, incluant en particulier des simulations obtenues lorsque l'on couple le système de Cahn-Hilliard aux équations de Navier-Stokes obtenant ainsi un modèle de type interfaces diffuses pour la simulation d'écoulements multiphasiques (*cf* [2] pour le cas trois phases).

Références

- [1] F. BOYER AND C. LAPUERTA, *Study of a three component Cahn-Hilliard flow model*, M2AN, 40(4):653–687, 2006.
- [2] F. BOYER, C. LAPUERTA, S. MINJEAUD, B. PIAR, AND M. QUINTARD, *Cahn-Hilliard / Navier-Stokes model for the simulation of three-phase flows.*, Transp. Porous Media, 82(3):463–483, 2010.
- [3] F. BOYER AND S. MINJEAUD, *Hierarchy of consistent n -component Cahn-Hilliard systems*, submitted, <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00933674>
- [4] J. W. CAHN AND J. E. HILLIARD, *Free energy of a nonuniform system i. interfacial free energy*, J. Chem. Phys., 2:258–267, 1958.

Franck Boyer, Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, I2M, UMR 7373, 13453 Marseille, France
franck.boyer@univ-amu.fr

Sebastian Minjeaud, Univ. Nice Sophia Antipolis, CNRS, LJAD, UMR 7351, 06100 Nice, France
minjeaud@unice.fr