

MODÉLISATION MATHÉMATIQUE DE FLUIDES
MONO-ESPÈCE AVEC INTERFACES DIFFUSES ET
SIMULATIONS NUMÉRIQUES DE FLUIDES
MULTIESPÈCES

Y. Le Calvez¹

V. Giovangigli¹ F. Nabet¹ G. Ribert²

¹CMAP, École Polytechnique

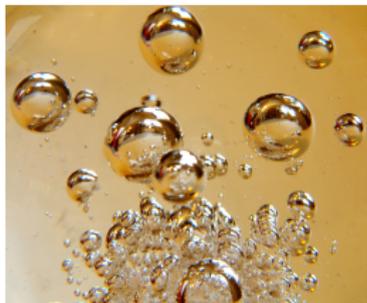
²CORIA, Insa Rouen



UMR 6614
coRia
COMPLEXE DE RECHERCHE
INTERPROFESSIONNEL EN AÉROTHERMOCHIMIE

AGENCE NATIONALE DE LA RECHERCHE
ANR
ANR-19-CE05-0037-02

CONTEXTE ET OBJECTIFS



Bulles de champagne

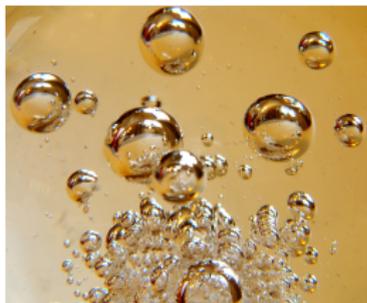


Mélange eau-huile

CONTEXTE

- I- Mélange des fluides multispèces.
- II- Plusieurs phases.
- III- Interfaces diffuses.

CONTEXTE ET OBJECTIFS

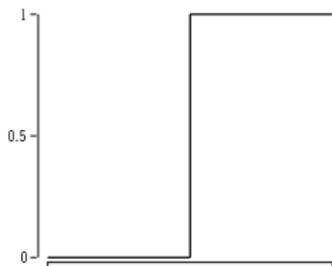


Bulles de champagne

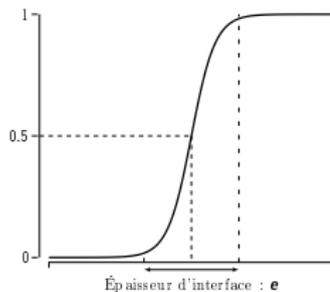


Mélange eau-huile

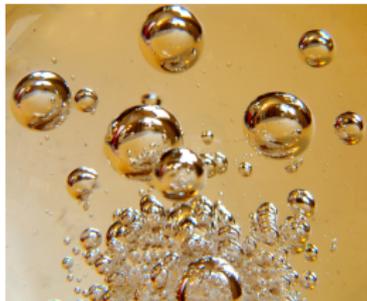
INTERFACE DE DISCONTINUITÉ VS INTERFACE DIFFUSE



Interface de discontinuité



Interface diffuse



Bulles de champagne



Mélange eau-huile

OBJECTIFS

- I- Construction d'une thermodynamique.
- II- Simulation des mélanges d'éthane (C_2H_6) et d'azote (N_2).
- III- Un théorème d'existence et d'unicité.

Définition d'une thermodynamique

La connaissance de e , p et s fonctions C^2 de $\zeta = (T, \nu, \mathbf{y})$ sur \mathcal{O}_ζ vérifiant (T₁)-(T₄) est une thermodynamique où $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)$ et n le nombre d'espèces.

(T₁) e et s 1-homogène et p 0-homogène pour (ν, \mathbf{y}) .

(T₂) Relation de Gibbs où $\mathbf{g}_k := \partial_{y_k} e - T \partial_{y_k} s$,

$$T ds = \partial_T e dT + (p + \partial_\nu e) d\nu + \sum_{k=1}^n (\partial_{y_k} e - g_k) dy_k.$$

(T₃) $\partial_T e(\zeta) > 0$ et croissance en température de \mathcal{O}_ζ .

(T₄) Croissance en ν de \mathcal{O}_ζ

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} (e - e^{\text{gp}}) = 0, \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} (s - s^{\text{gp}}) = 0 \quad \text{et} \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} \nu (p - p^{\text{gp}}) = 0.$$

Les fonctions e^{gp} , s^{gp} et p^{gp} sont connues.

CONSTRUCTION D'UNE THERMODYNAMIQUE

FONCTIONS ISSUES D'UNE LOI D'ÉTAT

$$\phi := p - p^{\text{gp}}$$

$$e(T, \nu, \mathbf{y}) := e^{\text{gp}}(T, \mathbf{y}) - \int_{\nu}^{\infty} T^2 \partial_T \left(\frac{\phi}{T} \right) (T, \nu^{\#}, \mathbf{y}) d\nu^{\#}, \quad (1)$$

$$s(T, \nu, \mathbf{y}) := s^{\text{gp}}(T, \nu, \mathbf{y}) - \int_{\nu}^{\infty} \partial_T \phi (T, \nu^{\#}, \mathbf{y}) d\nu^{\#}. \quad (2)$$

CONSTRUCTION D'UNE THERMODYNAMIQUE

FONCTIONS ISSUES D'UNE LOI D'ÉTAT

$$\phi := p - p^{\text{gp}}$$

$$e(T, \nu, \mathbf{y}) := e^{\text{gp}}(T, \mathbf{y}) - \int_{\nu}^{\infty} T^2 \partial_T \left(\frac{\phi}{T} \right) (T, \nu^{\#}, \mathbf{y}) d\nu^{\#}, \quad (1)$$

$$s(T, \nu, \mathbf{y}) := s^{\text{gp}}(T, \nu, \mathbf{y}) - \int_{\nu}^{\infty} \partial_T \phi (T, \nu^{\#}, \mathbf{y}) d\nu^{\#}. \quad (2)$$

HYPOTHÈSES (P₀)-(P₂)

(P₀) ϕ est C^3 sur \mathcal{O}_{ζ} , $\phi \sim \frac{c(T, \mathbf{y})}{\nu^2}$ et il existe $\bar{\nu}$ tel que $(T, \nu, \mathbf{y}) \in \mathcal{O}_{\zeta}$ avec $(T, \mathbf{y}) \in (0, \infty)^{n+1}$ et $\nu \geq \bar{\nu}$.

(P₁) ϕ est 0-homogène pour la variable (ν, \mathbf{y}) .

(P₂) $T \int_{\nu}^{\infty} \partial_T^2 \phi d\nu' < \sum_{i=1}^n y_i c_{\nu, i}^{\text{gp}}$.

CONSTRUCTION D'UNE THERMODYNAMIQUE

FONCTIONS ISSUES D'UNE LOI D'ÉTAT

$$\phi := p - p^{\text{gp}}$$

$$e(T, \nu, \mathbf{y}) := e^{\text{gp}}(T, \mathbf{y}) - \int_{\nu}^{\infty} T^2 \partial_T \left(\frac{\phi}{T} \right) (T, \nu^{\#}, \mathbf{y}) d\nu^{\#}, \quad (1)$$

$$s(T, \nu, \mathbf{y}) := s^{\text{gp}}(T, \nu, \mathbf{y}) - \int_{\nu}^{\infty} \partial_T \phi (T, \nu^{\#}, \mathbf{y}) d\nu^{\#}. \quad (2)$$

HYPOTHÈSES (P₀)-(P₂)

(P₀) ϕ est C^3 sur \mathcal{O}_{ζ} , $\phi \sim \frac{c(T, \mathbf{y})}{\nu^2}$ et il existe $\bar{\nu}$ tel que $(T, \nu, \mathbf{y}) \in \mathcal{O}_{\zeta}$ avec $(T, \mathbf{y}) \in (0, \infty)^{n+1}$ et $\nu \geq \bar{\nu}$.

(P₁) ϕ est 0-homogène pour la variable (ν, \mathbf{y}) .

(P₂) $T \int_{\nu}^{\infty} \partial_T^2 \phi d\nu' < \sum_{i=1}^n y_i c_{\nu, i}^{\text{gp}}$.

THÉORÈME

Connaissant une thermodynamique gaz parfait, une loi d'état p vérifiant (P₀)-(P₂) et en définissant e et s par (1) et (2), on a que le triplet (e, p, s) est une thermodynamique et vérifie (T₁)-(T₄).

APPLICATION À LA LOI D'ÉTAT SRK

Loi d'état SRK (Soave-Redlich-Kwong)

$$p(\zeta) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{M_i} \right) \frac{RT}{\nu - b(\mathbf{y})} - \frac{a(T, \mathbf{y})}{\nu(\nu + b(\mathbf{y}))},$$

$$a(T, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \alpha_i(T) \alpha_j(T), \quad b(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n y_i b_i,$$

et les α_i et b_i sont construits à partir des états critiques et des facteurs acentriques des espèces.

APPLICATION À LA LOI D'ÉTAT SRK

Loi d'état SRK (Soave-Redlich-Kwong)

$$p(\zeta) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{M_i} \right) \frac{RT}{\nu - b(\mathbf{y})} - \frac{a(T, \mathbf{y})}{\nu(\nu + b(\mathbf{y}))},$$

$$a(T, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \alpha_i(T) \alpha_j(T), \quad b(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n y_i b_i,$$

et les α_i et b_i sont construits à partir des états critiques et des facteurs acentriques des espèces.

(SRK) On a pour tout $i \in \llbracket 1, n \rrbracket$,

$\alpha_i \in \mathcal{C}^3$, $\alpha_i(0) > 0$, $\alpha_i(T) \geq 0$, $\lim_{T \rightarrow \infty} \alpha_i(T) = 0$, α_i est décroissant et convexe et les réels $b_i \geq 0$.

APPLICATION À LA LOI D'ÉTAT SRK

Loi d'état SRK (Soave-Redlich-Kwong)

$$p(\zeta) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{M_i} \right) \frac{RT}{\nu - b(\mathbf{y})} - \frac{a(T, \mathbf{y})}{\nu(\nu + b(\mathbf{y}))},$$

$$a(T, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n y_i y_j \alpha_i(T) \alpha_j(T), \quad b(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n y_i b_i,$$

et les α_i et b_i sont construits à partir des états critiques et des facteurs acentriques des espèces.

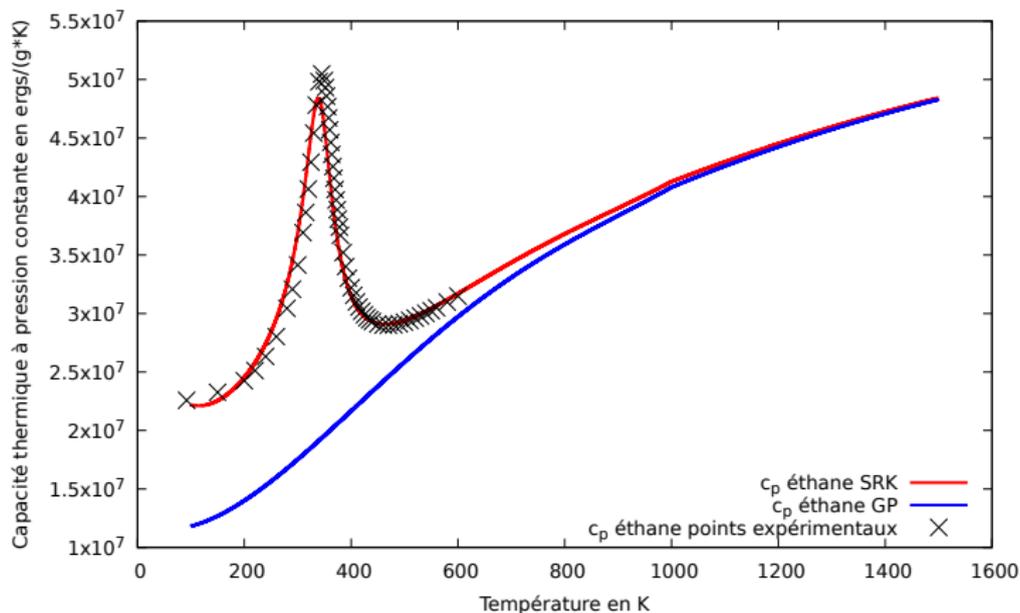
(SRK) On a pour tout $i \in \llbracket 1, n \rrbracket$,

$\alpha_i \in C^3$, $\alpha_i(0) > 0$, $\alpha_i(T) \geq 0$, $\lim_{T \rightarrow \infty} \alpha_i(T) = 0$, α_i est décroissant et convexe et les réels $b_i \geq 0$.

PROPOSITION

En supposant (SRK) ϕ vérifie (P₀)-(P₂) et donc génère une thermodynamique qui vérifie (T₁)-(T₄).

CAPACITÉ THERMIQUE À PRESSION CONSTANTE DE L'ÉTHANE (C_2H_6) POUR $p = 100$ ATM



$$c_p := \partial_T(e + p\nu)_{p,y}$$

$\zeta = (T, \nu, \mathbf{y}) \mapsto \xi = (e, \nu, \mathbf{y})$ est un C^2 difféomorphisme.

DÉFINITION DES MATRICES Λ ET $\widehat{\Lambda}$

$$\Lambda_{kl} := \frac{\partial_{y_k} g_l}{T} = \frac{\partial_{y_k} (\partial_{y_l} e - T \partial_{y_l} s)}{T} = \frac{\partial_{y_l} g_k}{T} = \Lambda_{lk}, \quad k, l \in \llbracket 1, n \rrbracket,$$

$$\widehat{\Lambda} := \Lambda - \frac{\Lambda \mathbf{y} \otimes \Lambda \mathbf{y}}{\langle \Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle}.$$

DÉFINITION D'UN ÉTAT THERMODYNAMIQUE STABLE

PROPOSITION

On suppose que les hypothèses (T_1) - (T_3) sont vérifiées. Alors, pour tout $\zeta \in \mathcal{O}_\zeta$, les assertions suivantes sont équivalentes

- (i) $\partial_{\xi\xi}^2 s$ est négative, semi-définie et telle que $N(\partial_{\xi\xi}^2 s) = \mathbb{R}\xi$.
- (ii) $\partial_T e > 0$, $\partial_\nu p < 0$ et $\widehat{\Lambda}$ est semi-définie positive de noyau $\mathbb{R}\mathbf{y}$.
- (iii) $\partial_T e > 0$ et la matrice Λ est définie positive.

$\zeta = (T, \nu, \mathbf{y}) \mapsto \xi = (e, \nu, \mathbf{y})$ est un C^2 difféomorphisme.

DÉFINITION DES MATRICES Λ ET $\hat{\Lambda}$

$$\Lambda_{kl} := \frac{\partial_{y_k} g_l}{T} = \frac{\partial_{y_k} (\partial_{y_l} e - T \partial_{y_l} s)}{T} = \frac{\partial_{y_l} g_k}{T} = \Lambda_{lk}, \quad k, l \in \llbracket 1, n \rrbracket,$$

$$\hat{\Lambda} := \Lambda - \frac{\Lambda \mathbf{y} \otimes \Lambda \mathbf{y}}{\langle \Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle}.$$

DÉFINITION D'UN ÉTAT THERMODYNAMIQUE STABLE

PROPOSITION

On suppose que les hypothèses (T₁)-(T₃) sont vérifiées. Alors, pour tout $\zeta \in \mathcal{O}_\zeta$, les assertions suivantes sont équivalentes

- (i) $\partial_{\xi\xi}^2 s$ est négative, semi-définie et telle que $N(\partial_{\xi\xi}^2 s) = \mathbb{R}\xi$.
- (ii) $\underbrace{\partial_T e > 0}_{\text{stabilité thermique}}$, $\underbrace{\partial_\nu p < 0}_{\text{stabilité mécanique}}$ et $\underbrace{\hat{\Lambda} \text{ est semi-définie de noyau } \mathbb{R}\mathbf{y}}_{\text{stabilité chimique}}$.
- (iii) $\partial_T e > 0$ et la matrice Λ est définie positive.

NOUVELLE VARIABLE THERMODYNAMIQUE

$\zeta = (T, \nu, \mathbf{y}) \mapsto \xi = (e, \nu, \mathbf{y})$ est un C^2 difféomorphisme.

DÉFINITION DES MATRICES Λ ET $\hat{\Lambda}$

$$\Lambda_{kl} := \frac{\partial_{y_k} g_l}{T} = \frac{\partial_{y_k} (\partial_{y_l} e - T \partial_{y_l} s)}{T} = \frac{\partial_{y_l} g_k}{T} = \Lambda_{lk}, \quad k, l \in \llbracket 1, n \rrbracket,$$
$$\hat{\Lambda} := \Lambda - \frac{\Lambda \mathbf{y} \otimes \Lambda \mathbf{y}}{\langle \Lambda \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle}.$$

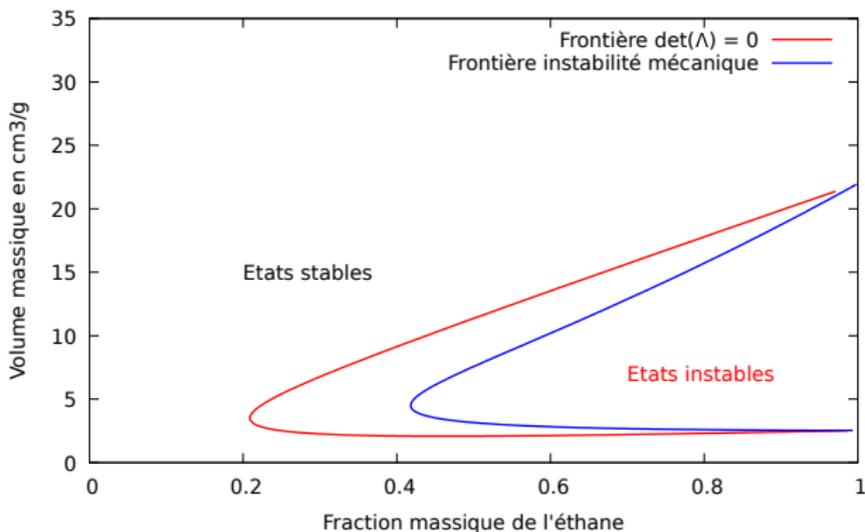
DÉFINITION D'UN ÉTAT THERMODYNAMIQUE STABLE

PROPOSITION

On suppose que les hypothèses (T_1) - (T_3) sont vérifiées. Alors, pour tout $\zeta \in \mathcal{O}_\zeta$, les assertions suivantes sont équivalentes

- (i) $\partial_{\xi\xi}^2 s$ est négative, semi-définie et telle que $N(\partial_{\xi\xi}^2 s) = \mathbb{R}\xi$.
- (ii) $\underbrace{\partial_T e > 0}_{\text{stabilité thermique}}$, $\underbrace{\partial_\nu p < 0}_{\text{stabilité mécanique}}$ et $\underbrace{\hat{\Lambda} \text{ est semi-définie de noyau } \mathbb{R}\mathbf{y}}_{\text{stabilité chimique}}$.
- (iii) $\underbrace{\partial_T e > 0}_{\text{stabilité thermique}}$ et $\underbrace{\text{la matrice } \Lambda \text{ est définie positive}}_{\text{stabilité mécanique et chimique}}$.

FRONTIÈRE ENTRE ÉTATS STABLES ET INSTABLES À $T = 200$ K POUR LES MÉLANGES D'ÉTHANE (C_2H_6) ET D'AZOTE (N_2)



- $\partial_T e > 0$: toujours vérifiée,
- Λ définie positive : à vérifier.

DÉFINITION DES POINTS D'ÉQUILIBRE

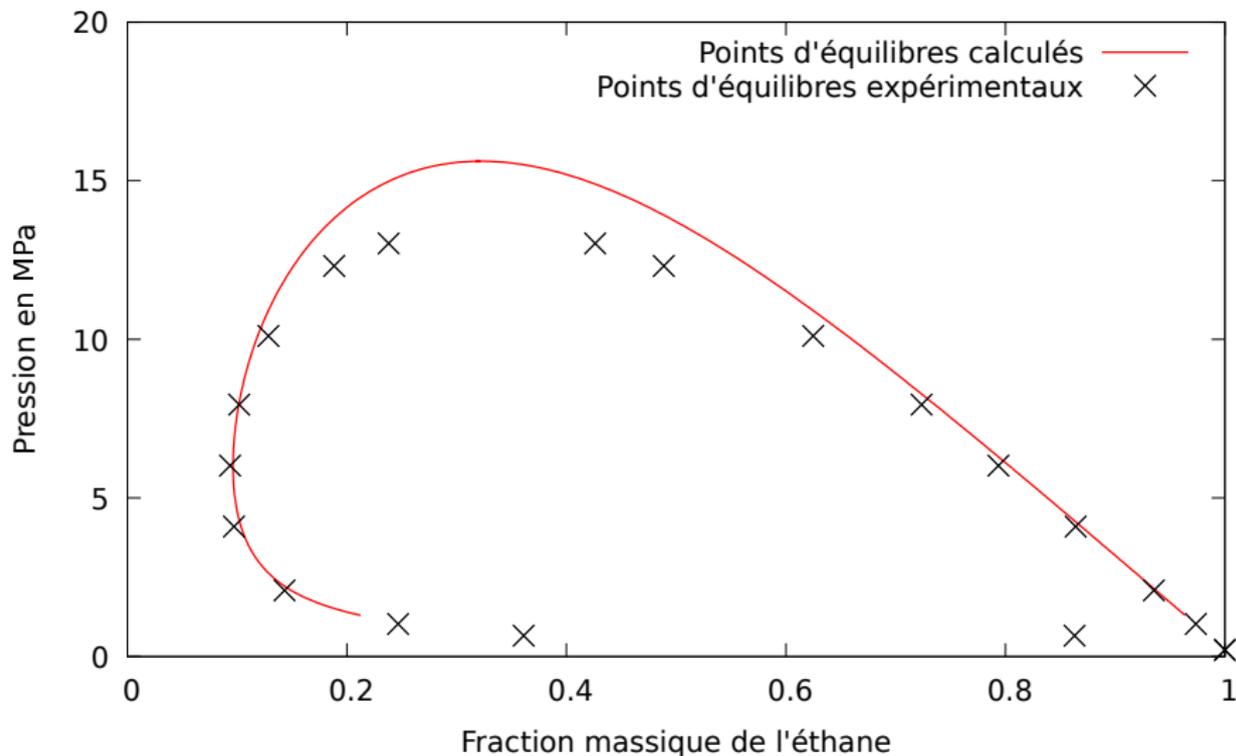
Le mélange fluide soumis à des **instabilités chimiques** va se scinder en **plusieurs phases**. Les points d'équilibre sont les états thermodynamiques associés à ces phases.

CARACTÉRISATION DES POINTS D'ÉQUILIBRE

$$\mu_i = \frac{M_i g_i}{RT}.$$

$$\begin{cases} T^a = T^b, \\ p^a = p^b, \\ \mu_1^a = \mu_1^b, \\ \mu_2^a = \mu_2^b. \end{cases}$$

POINTS D'ÉQUILIBRES À $T = 200$ K POUR LES MÉLANGES D'ÉTHANE (C_2H_6) ET D'AZOTE (N_2)



CONTEXTE ET OBJECTIFS

CONTEXTE PHYSIQUE

- I- Fluide mono-espèce.
- II- Équilibre liquide-vapeur.
- III- Interface diffuse.
- IV - Non isotherme et diffusif.

CONTEXTE MATHÉMATIQUE

- I- Système hyperbolique-parabolique.
- II- Cadre hilbertien.

Objectifs

Étude de la structure mathématique du système capillaire et démonstration d'un théorème d'existence et d'unicité.

État de l'art

I- Non isotherme et diffusif :

- Haspot, B., Annales M. Blaise Pascal, 2009,
- Kotschote, M., S. Journal on M. Analysis, 2012.

II- Isotherme et diffusif :

- Danchin, R. and Desjardins, B., Annales de l'Institut H. P. Non Linear Analysis, 2001.
- Bresch, D. and all, A. for Rational M. and A., 2019.
- ...

III- Isotherme et non diffusif :

- Benzoni-Gavage, S., and all Indiana University mathematics journal, 2007.
- ...

MODÈLE DE VAN DER WAALS

On note f l'énergie libre et le modèle de van Der Waals évalue f par

$$f(\rho, T, \nabla \rho) = \underbrace{f^0(\rho, T)}_{\text{terme classique}} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\kappa(\rho, T)}{\rho} |\nabla \rho|^2}_{\text{terme non classique}} .$$

MODÈLE DE VAN DER WAALS

On note f l'énergie libre et le modèle de van Der Waals évalue f par

$$f(\rho, T, \nabla\rho) = \underbrace{f^0(\rho, T)}_{\text{terme classique}} + \underbrace{\frac{1}{2} \frac{\kappa(\rho, T)}{\rho} |\nabla\rho|^2}_{\text{terme non classique}}.$$

En conservant la relation de Gibbs et les différentes relations entre (e, s, p) et f on a

$$\begin{cases} e &= e^0 + \frac{1}{2} \frac{\kappa - T \partial_T \kappa}{\rho} |\nabla\rho|^2, \\ s &= s^0 - \frac{1}{2} \frac{\partial_T \kappa}{\rho} |\nabla\rho|^2, \\ p &= p^0 + \frac{1}{2} (\rho \partial_\rho \kappa - \kappa) |\nabla\rho|^2. \end{cases}$$

(e, s, p) est une thermodynamique.

SYSTÈME CAPILLAIRE

SYSTÈME FLUIDE AUGMENTÉ¹

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \\ \\ \\ \end{array} \right.$$

LES INCONNUES DU SYSTÈME

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \end{array} \right. \rightarrow \text{conservation de la masse,}$$

1. Gavriljuk, S. and Gouin, H. , Trends in applications of M. to M., 1998.
Bresch, D. and Couderc, F. and Noble, P. and Vila, J.-P., Comptes Rendus M., 2016.

SYSTÈME FLUIDE AUGMENTÉ¹

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{P}, \end{array} \right.$$

LES INCONNUES DU SYSTÈME

$$\left\{ \begin{array}{ll} \rho & \rightarrow \text{conservation de la masse,} \\ \mathbf{v} & \rightarrow \text{conservation de la quantité de mouvement,} \end{array} \right.$$

1. Gavriljuk, S. and Gouin, H. , Trends in applications of M. to M., 1998.
Bresch, D. and Couderc, F. and Noble, P. and Vila, J.-P., Comptes Rendus M., 2016.

SYSTÈME FLUIDE AUGMENTÉ¹

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{P}, \\ \partial_t (\rho e^{\text{tot}}) + \nabla \cdot (\rho e^{\text{tot}} \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{Q} - \nabla \cdot (\mathcal{P} \cdot \mathbf{v}), \end{cases}$$

LES INCONNUES DU SYSTÈME

$$\begin{cases} \rho & \rightarrow \text{conservation de la masse,} \\ \mathbf{v} & \rightarrow \text{conservation de la quantité de mouvement,} \\ T & \rightarrow \text{conservation de l'énergie,} \end{cases}$$

1. Gavriljuk, S. and Gouin, H., Trends in applications of M. to M., 1998.
Bresch, D. and Couderc, F. and Noble, P. and Vila, J.-P., Comptes Rendus M., 2016.

SYSTÈME FLUIDE AUGMENTÉ¹

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{P}, \\ \partial_t (\rho e^{\text{tot}}) + \nabla \cdot (\rho e^{\text{tot}} \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{Q} - \nabla \cdot (\mathcal{P} \cdot \mathbf{v}), \\ \partial_t \mathbf{w} + \nabla \cdot (\mathbf{w} \otimes \mathbf{v} + \rho (\nabla \mathbf{v})^t) = 0. \end{cases}$$

LES INCONNUES DU SYSTÈME

$$\begin{cases} \rho & \rightarrow \text{conservation de la masse,} \\ \mathbf{v} & \rightarrow \text{conservation de la quantité de mouvement,} \\ T & \rightarrow \text{conservation de l'énergie,} \\ \mathbf{w} := \nabla \rho & \rightarrow \text{conservation de la masse différenciée en espace.} \end{cases}$$

1. Gavriljuk, S. and Gouin, H., Trends in applications of M. to M., 1998.
Bresch, D. and Couderc, F. and Noble, P. and Vila, J.-P., Comptes Rendus M., 2016.

SYSTÈME CAPILLAIRE

SYSTÈME FLUIDE AUGMENTÉ¹

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{P}, \\ \partial_t (\rho e^{\text{tot}}) + \nabla \cdot (\rho e^{\text{tot}} \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{Q} - \nabla \cdot (\mathcal{P} \cdot \mathbf{v}), \\ \partial_t \mathbf{w} + \nabla \cdot (\mathbf{w} \otimes \mathbf{v} + \rho (\nabla \mathbf{v})^t) = 0. \end{cases}$$

LES FLUX DE CHALEUR ET LES TENSEURS DE PRESSION

$$\mathcal{P} = \underbrace{\left(\frac{1}{2}(\rho \partial_\rho \kappa - \kappa) |\mathbf{w}|^2 - \kappa \rho \nabla \cdot \mathbf{w} \right) \mathbf{I} + \kappa \mathbf{w} \otimes \nabla \rho}_{\text{Tenseur de Korteweg}} + \underbrace{\mathcal{P}^{\text{NS}}}_{\text{Tenseur de pression classique}},$$

$$\mathcal{Q} = \underbrace{\kappa \rho \mathbf{w} \nabla \cdot \mathbf{v}}_{\text{Flux de chaleur de Dunn-Serin}} + \underbrace{\mathcal{Q}^{\text{NS}}}_{\text{Flux de chaleur classique}}.$$

1. Gavriljuk, S. and Gouin, H., Trends in applications of M. to M., 1998.
Bresch, D. and Couderc, F. and Noble, P. and Vila, J.-P., Comptes Rendus M., 2016.

SYSTÈME CAPILLAIRE

SYSTÈME FLUIDE AUGMENTÉ

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{P}, \\ \partial_t (\rho e^{\text{tot}}) + \nabla \cdot (\rho e^{\text{tot}} \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathcal{Q} - \nabla \cdot (\mathcal{P} \cdot \mathbf{v}), \\ \partial_t \mathbf{w} + \nabla \cdot (\mathbf{w} \otimes \mathbf{v} + \rho (\nabla \mathbf{v})^t) = 0. \end{cases}$$

LA FORME PSEUDO NORMALE¹

$$z := \underbrace{(\rho, \mathbf{w})}_{z_I} \underbrace{(\mathbf{v}, T)}_{z_{II}}^t, \quad z_I : \text{hyperbolique}, \quad z_{II} : \text{parabolique},$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{A}}_0(z) \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{A}}_i(z) \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \left[\partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}}(z) \partial_{x_j} z \right) \right. \\ \left. + \partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}}(z) \partial_{x_j} z \right) \right] = \bar{\mathbf{r}}(z, \nabla z). \end{aligned}$$

1. Kawashima, S. and Shizuta, Y., Tohoku Mathematical J., Second Series, 1988.

THÉORÈME D'EXISTENCE ET D'UNICITÉ

SYSTÈME SOUS FORME PSEUDO NORMALE

$$\underbrace{\bar{\mathbf{A}}_0(z)}_{\text{définie positive}} \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \underbrace{\bar{\mathbf{A}}_i(z)}_{\text{symétrique}} \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \left[\partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}}(z) \partial_{x_j} z \right) + \partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}}(z) \partial_{x_j} z \right) \right] = \bar{\mathbf{r}}(z, \nabla z).$$

STRUCTURE DU SYSTÈME

d = la dimension en espace

$$\bar{\mathbf{A}}_0 = \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{A}}_0^{\text{I}} & 0_{d+1,d+1} \\ 0_{d+1,d+1} & \bar{\mathbf{A}}_0^{\text{II}} \end{pmatrix}, \quad z = \begin{pmatrix} z_{\text{I}} \\ z_{\text{II}} \end{pmatrix},$$

$$\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}} = \begin{pmatrix} 0_{d+1,d+1} & 0_{d+1,d+1} \\ 0_{d+1,d+1} & (\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}})^{\text{II,II}} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}} = \begin{pmatrix} 0_{d+1,d+1} & (\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}})^{\text{I,II}}(\rho, \mathbf{v}, T) \\ (\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}})^{\text{II,I}} & (\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}})^{\text{II,II}} \end{pmatrix}.$$

THÉORÈME D'EXISTENCE ET D'UNICITÉ

SYSTÈME SOUS FORME PSEUDO NORMALE

$$\underbrace{\bar{\mathbf{A}}_0(z)}_{\text{définie positive}} \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \underbrace{\bar{\mathbf{A}}_i(z)}_{\text{symétrique}} \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \left[\partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}}(z) \partial_{x_j} z \right) + \partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}}(z) \partial_{x_j} z \right) \right] = \bar{\mathbf{r}}(z, \nabla z).$$

STRUCTURE DU SYSTÈME

$$\left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}} \right)^t = \bar{\mathbf{B}}_{ji}^{\text{dis}}, \quad \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}} \right)^t = -\bar{\mathbf{B}}_{ji}^{\text{cap}},$$

$\sum_{i,j \in \mathcal{D}} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}} \right)^{\text{II,II}} \omega_i \omega_j$ définie positive pour tout ω dans la sphère unité.

THÉORÈME D'EXISTENCE ET D'UNICITÉ

SYSTÈME SOUS FORME PSEUDO NORMALE

$$\underbrace{\bar{\mathbf{A}}_0(z)}_{\text{définie positive}} \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \underbrace{\bar{\mathbf{A}}_i}_{\text{symétrique}}(z) \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \left[\partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}}(z) \partial_{x_j} z \right) + \partial_{x_i} \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}}(z) \partial_{x_j} z \right) \right] = \bar{\mathbf{f}}(z, \nabla z).$$

THÉORÈME D'EXISTENCE ET D'UNICITÉ

Soit $l \in \mathbb{N}$ tel que $l \geq \lfloor \frac{d}{2} \rfloor + 3$ et \bar{z} un vecteur constant. Il existe alors une solution forte z sur $[0, t_f]$ du système pour une condition initiale z_0 telle que $z_0 - \bar{z} \in H^l(\mathbb{R}^d)$.

DÉFINITION D'UNE SOLUTION FORTE

$$\begin{cases} \rho - \bar{\rho} \in C^0([0, t_f]; H^{l+1}) \cap C^1([0, t_f]; H^{l-1}), \\ \mathbf{w} - \bar{\mathbf{w}} \in C^0([0, t_f]; H^l) \cap C^1([0, t_f]; H^{l-2}), \\ (\mathbf{v}, T) - \overline{(\mathbf{v}, T)} \in C^0([0, t_f]; H^l) \cap C^1([0, t_f]; H^{l-2}) \cap L^2([0, t_f]; H^{l+1}). \end{cases}$$

Adaptation de la méthode de **point fixe** pour les systèmes hyperbolique-parabolique¹.

I- Stabilisation du système.

Le système est sous forme **pseudo-normale**.

II- Linéarisation du système.

III- Estimations à priori pour le système linéaire.

IV- Existence de solutions pour le système linéaire : méthode de la transposition².

V- $\nabla\rho = \mathbf{w}$ implique $\nabla\tilde{\rho} = \tilde{\mathbf{w}}$.

VI- Construction d'une suite stable et contractante.

VII- Conclusion.

1. Kawashima, S., Kyoto University, 1984.

2. Benzoni-Gavage, S. and Serre, D., Oxford University Press on Demand, 2007.

Estimations d'énergie sur

$$\bar{\mathbf{A}}_0(z) \frac{dz}{dt} + \mathbf{A}(z)z = \bar{\mathbf{r}}(z, \nabla z), \quad z(0) = z_0.$$

I- Estimations d'ordre 0 :

$$\underbrace{\langle \bar{\mathbf{A}}_0 \frac{dz}{dt}, z - \bar{z} \rangle}_{a} L^2 + \underbrace{\langle \mathbf{A}(t)z, z - \bar{z} \rangle}_{b} L^2 = \underbrace{\langle \bar{\mathbf{r}}, z - \bar{z} \rangle}_{c} L^2.$$

a - $\langle \bar{\mathbf{A}}_0 z, z \rangle_{L^2}$ est une norme équivalente à la norme de L^2 .

b - Inégalité de Garding sur $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{dis}}$ et structure fine de $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}}$.

c - Utilisation de la structure de $\bar{\mathbf{r}}$.

$$\|z(t) - \bar{z}\|_{H^0}^2 + \int_0^t \|z_{\text{II}}(\tau) - \bar{z}_{\text{II}}\|_{H^1}^2 d\tau \leq C_1 e^{C_2(t+M_1\sqrt{t})} \|z_0 - \bar{z}\|_{H^0}^2,$$

où $C_1 := C_1(\mathcal{O}_1)$, $C_2 := C_2(\mathcal{O}_1, \|z - \bar{z}\|_{L^\infty(H^1)})$ et $M_1 := \|z_{\text{II}} - \bar{z}_{\text{II}}\|_{L^2(H^{l+1})}$.

Estimations d'énergie sur

$$\bar{\mathbf{A}}_0(z) \frac{dz}{dt} + A(z)z = \bar{\mathbf{r}}(z, \nabla z), \quad z(0) = z_0.$$

I- Estimations d'ordre k :

$$\alpha \in \mathbb{N}^d \text{ et } \sum_{i=1}^d |\alpha_i| = k.$$

$$\underbrace{\langle \bar{\mathbf{A}}_0 \frac{d\partial^\alpha z}{dt}, \partial^\alpha z \rangle}_{a} + \underbrace{\langle A(t)\partial^\alpha z, \partial^\alpha z \rangle}_{b} = \underbrace{\langle \partial^\alpha \bar{\mathbf{r}}, \partial^\alpha z \rangle}_{c} + \underbrace{\langle R_\alpha, \partial^\alpha z \rangle}_{d}.$$

 (a, b, c) - Mêmes arguments que précédemment. d - Estimations sur les commutateurs.

$$\|z(t) - \bar{z}\|_{H^k}^2 + \int_0^t \|z_{\text{II}}(\tau) - \bar{z}_{\text{II}}\|_{H^{k+1}}^2 d\tau \leq C_1 e^{C_2(t+M_1\sqrt{t})} \|z_0 - \bar{z}\|_{H^k}^2,$$

où $C_1 := C_1(\mathcal{O}_1)$, $C_2 := C_2(\mathcal{O}_1, \|z - \bar{z}\|_{L^\infty(H^l)})$ et $M_1 := \|z_{\text{II}} - \bar{z}_{\text{II}}\|_{L^2(H^{l+1})}$.

CONCLUSION

- I- Construction d'une thermodynamique.
- II- Simulations des mélanges d'éthane et d'azote.
- III- Système augmenté bien posé.

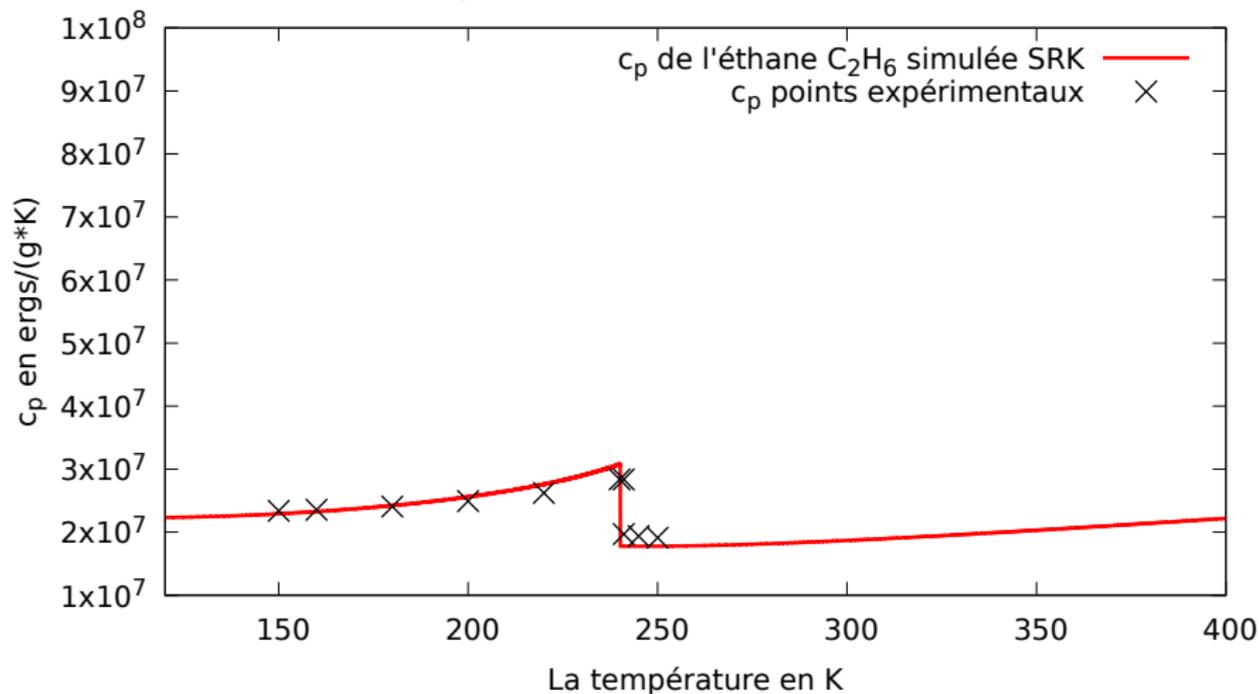
PERSPECTIVES

- I- Obtention des points critiques.
- II- Simulation des écoulements de fluides.
- III- Étude du système discrétisé.
- IV- Étude des fluides multi-espèces.

Merci de votre attention !

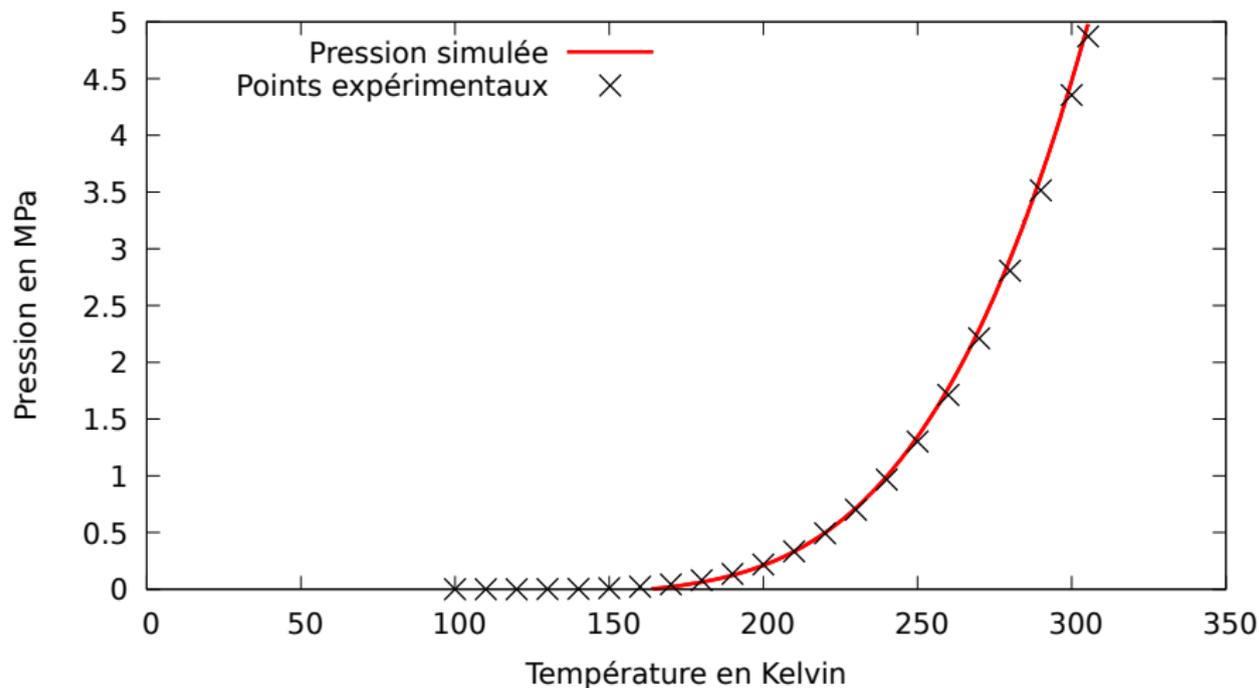
c_p DE L'ÉTHANE AVEC CHANGEMENT D'ÉTAT

c_p de l'éthane C_2H_6 pour $p = 1$ MPa



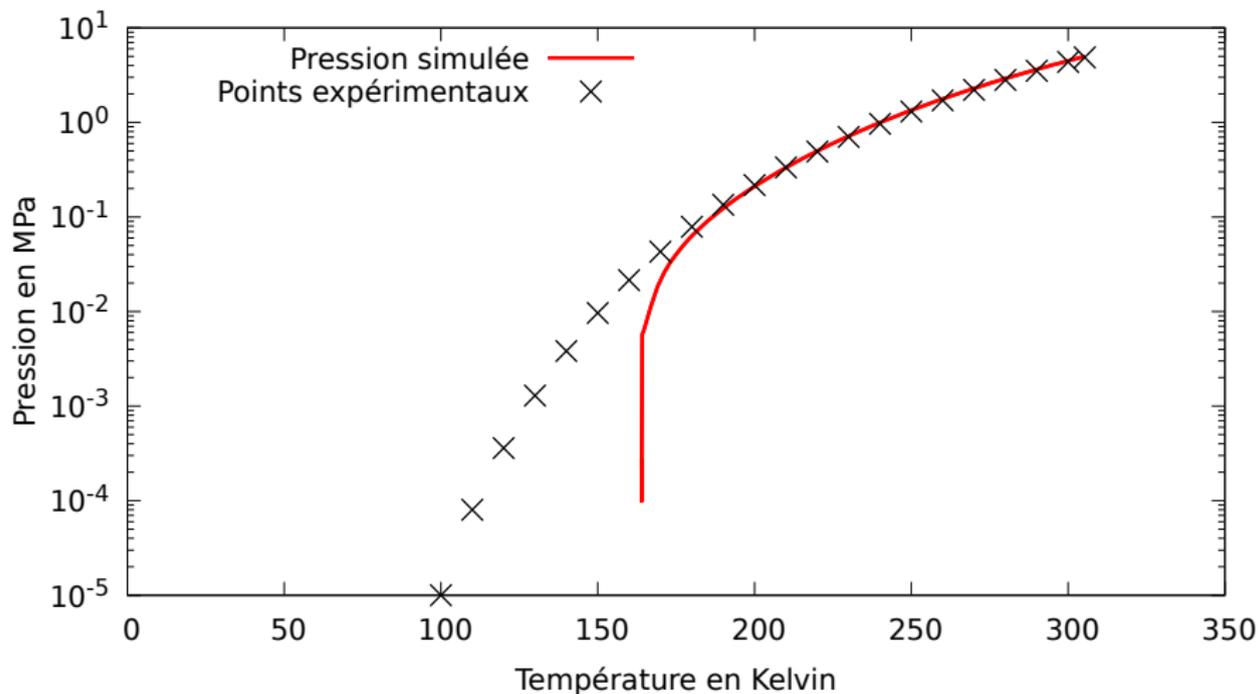
COURBE DE PRESSION DE VAPEUR SATURANTE (I)

Pression saturante de l'éthane C_2H_6



COURBE DE PRESSION DE VAPEUR SATURANTE (II)

Pression saturante de l'éthane C_2H_6



LA CONTINUATION : UNE MÉTHODE NUMÉRIQUE DE RÉSOLUTION DES SYSTÈMES NON-LINÉAIRES

PROBLÈME

Résoudre un système d'équations non linéaires de la forme

$$G(v) = G(u(\lambda), \lambda) = 0,$$

avec $v \in \mathbb{R}^{n+1}$, $u \in \mathbb{R}^n$ et λ un réel.

IDÉE DE LA CONTINUATION

Paramétrer $u(s)$ et $\lambda(s)$ par un paramètre $s \in I$ puis déterminer les arcs $(u(s), \lambda(s))_{s \in I}$ en résolvant un système augmenté de la forme

$$\begin{cases} G(u(s), \lambda(s)) & = 0 \quad (\text{Équation originelle}), \\ N(u(s), \lambda(s), s) & = 0 \quad (\text{Équation } s = \text{longueur de l'arc courbe}), \\ (u(0), \lambda(0)) & = (u_0, \lambda_0). \end{cases}$$

EXEMPLES D'APPLICATIONS

LE SYSTÈME

$$u = (T, y_1, y_2),$$

$$\lambda = \nu,$$

$$\begin{cases} y_1 + y_2 - 1 = 0, \\ T - T^* = 0, \\ \det(\Lambda(T, \nu, y_1, y_2)) = 0. \end{cases}$$

UNE NOUVELLE INCONNUE ET UN NOUVEAU SYSTÈME

$$u = (T, y_1, y_2, \rho),$$

$$\lambda = \nu,$$

$$\begin{cases} y_1 + y_2 - 1 = 0, \\ T - T^* = 0, \\ \det(\Lambda(T, \nu, y_1, y_2)) = 0, \\ \rho - \text{"loi d'état SRK"}(T, \nu, y_1, y_2) = 0. \end{cases}$$

LES ÉTATS INSTABLES, MÉTASTABLE ET STABLES

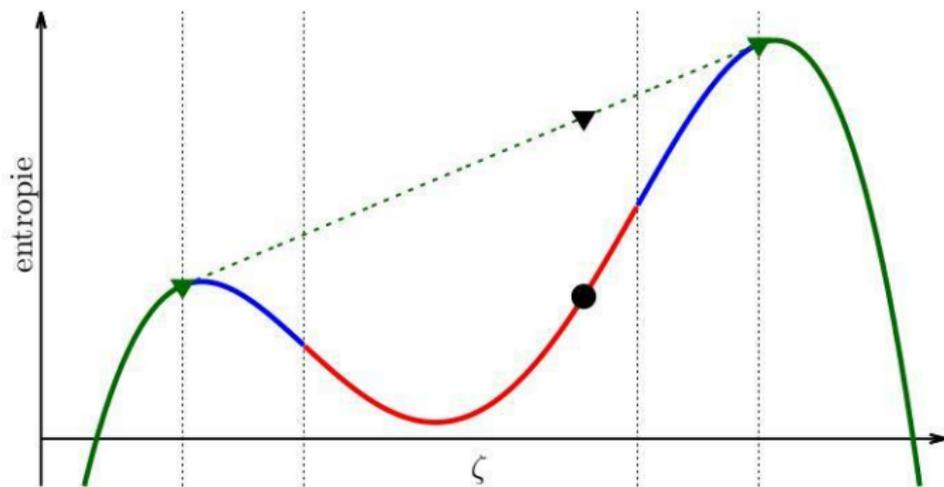


FIGURE I.4 – Exemple d'entropie : (—) zone instable, (—) zone métastable, (—) zone globalement stable, et (---) enveloppe concave. • exemple de mélange instable, ▼ mélange équivalent après séparation en deux phases à l'équilibre ▼.

Source : Thèse de Pierre Gaillard.

CONSTRUCTION DU SYSTÈME (I)

VARIABLE CONSERVATIVE ET ENTROPIQUE

$$\mathbf{u} = \left(\rho, \mathbf{w}, \rho \mathbf{v}, \mathcal{E} + \frac{1}{2} \rho |\mathbf{v}|^2 \right), \quad \mathbf{v} = \frac{1}{T} \left(g - \frac{1}{2} |\mathbf{v}|^2, \kappa \mathbf{w}, \mathbf{v}, -1 \right).$$

SYSTÈME AVEC LA VARIABLE CONSERVATIVE

$$\partial_t \mathbf{u} = - \sum_{i \in \mathcal{D}} \partial_{x_i} \mathbf{F}_i^{\text{tot}},$$

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_i^{\text{tot}} = \nabla \left(\underbrace{\mathbf{F}_i}_{\text{Transformée de Legendre}} + \underbrace{\mathbf{F}_i^{\text{dis}}}_{\text{Navier-Stokes}} + \mathbf{F}_i^{\text{cap}} \right).$$

DÉTERMINATION DU FLUX CONVECTIF

$$\partial_v (\mathcal{L} v_i) =: \mathbf{F}_i, \quad \sigma := -\text{entropie volumique},$$

$$\mathcal{L} := \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle - \sigma = \frac{1}{T} \left(p^0 + \frac{1}{2} (\kappa + \rho \partial_\rho \kappa) |\mathbf{w}|^2 \right) = \frac{1}{T} (p + \kappa |\mathbf{w}|^2).$$

CONSTRUCTION DU SYSTÈME (II)

SYSTÈME POUR LA VARIABLE NATURELLE *avant* SYMÉTRISATION

$$z = (\rho, \mathbf{w}, \mathbf{v}, T) \quad (\text{variable naturelle}),$$

$$\hat{\mathbf{A}}_0 \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \hat{\mathbf{A}}_i \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \hat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{x_i x_j}^2 z = \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \partial_{x_i} \hat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{x_j} z.$$

Normalisation

On multiplie le système par $(D_z \mathbf{v})^t$.

SYSTÈME POUR LA VARIABLE NATURELLE *après* SYMÉTRISATION

$$\bar{\mathbf{A}}_0 \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{A}}_i \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{x_i x_j}^2 z = \sum_{i,j \in \mathcal{D}} (\partial_z \mathbf{v})^t \partial_{x_i} \hat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{x_j} z.$$

CONSTRUCTION DU SYSTÈME (III)

Stabilisation

On multiplie l'équation de conservation de la masse par M et on l'ajoute à la première ligne.

SYSTÈME SOUS FORME PSEUDO-NORMALE

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{A}}_0 \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{A}}_{i,M} \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{x_i x_j}^2 z + M \rho \operatorname{div}(\mathbf{v}) \mathbf{e}_1 \\ = - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} (\partial_z \mathbf{v})^t \partial_{x_i} \hat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{x_j} z. \end{aligned}$$

Linéarisation

La linéarisation doit assurer $\nabla \tilde{\rho} = \tilde{\mathbf{w}}$.

SYSTÈME LINÉAIRE

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{A}}_0(z) \partial_t z + \sum_{i \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{A}}_i(z) \partial_{x_i} z - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{B}}_{ij}(z) \partial_{x_i x_j}^2 z = \bar{\mathbf{r}}, \\ \bar{\mathbf{r}} = \bar{\mathbf{C}}(z, \nabla z) \tilde{z} + \sum_{i \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{D}}_i(z, \nabla z) \partial_{x_i} \tilde{z}. \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
 \left\langle \overline{\mathbf{A}}_0 \left[\partial^\alpha, (\overline{\mathbf{A}}_0)^{-1} \overline{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{cap}} \right], \partial^\alpha \tilde{\mathbf{z}} \right\rangle &= \underbrace{\left\langle \overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{I}} \left[\partial^\alpha, (\overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{I}})^{-1} \overline{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{I,I}} \right] \partial_{x_i x_j}^2 \tilde{\mathbf{z}}_{\text{I}}, \partial^\alpha \tilde{\mathbf{z}}_{\text{I}} \right\rangle}_{\mathfrak{q}_1} \\
 &+ \underbrace{\left\langle \overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{I}} \left[\partial^\alpha, (\overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{I}})^{-1} \overline{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{I,II}} \right] \partial_{x_i x_j}^2 \tilde{\mathbf{z}}_{\text{II}}, \partial^\alpha \tilde{\mathbf{z}}_{\text{I}} \right\rangle}_{\mathfrak{q}_2} \\
 &+ \underbrace{\left\langle \overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{II}} \left[\partial^\alpha, (\overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{II}})^{-1} \overline{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{II,I}} \right] \partial_{x_i x_j}^2 \tilde{\mathbf{z}}_{\text{I}}, \partial^\alpha \tilde{\mathbf{z}}_{\text{II}} \right\rangle}_{\mathfrak{q}_3} \\
 &+ \underbrace{\left\langle \overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{II}} \left[\partial^\alpha, (\overline{\mathbf{A}}_0^{-\text{II}})^{-1} \overline{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{II,II}} \right] \partial_{x_i x_j}^2 \tilde{\mathbf{z}}_{\text{II}}, \partial^\alpha \tilde{\mathbf{z}}_{\text{II}} \right\rangle}_{\mathfrak{q}_4}.
 \end{aligned}$$

$\mathfrak{q}_1 = 0,$

$\mathfrak{q}_2 \rightarrow$ estimations des commutateurs,

$\mathfrak{q}_3 \rightarrow$ I.P.P et estimations commutateurs,

$\mathfrak{q}_4 \rightarrow$ estimations des commutateurs.

$$Lz = f, \quad z(0) = \tilde{z}_0.$$

EXISTENCE ET UNICITÉ POUR LE SYSTÈME LINÉAIRE

On s'intéresse au **problème adjoint** L^* .

- I- On montre que L^* est injectif pour $\varphi \in C^\infty([0, t_f]; H^\infty)$ et $\varphi(t_f) = 0$.
- II- On utilise successivement le théorème de Hahn-Banach et Riesz sur la forme linéaire,

$$l(\cdot) : \text{Im}(L^*) \rightarrow \mathbb{R},$$

$$\varphi \mapsto \langle f, (L^*)^{-1}\varphi \rangle_{L^2} + \langle \bar{\mathbf{A}}_0(z(0))\tilde{z}_0, (L^*)^{-1}\varphi(0) \rangle_{L^2}.$$

- III- Conclure à l'existence.

PROPRIÉTÉ IMPORTANTE

On veut avoir la propriété suivante : "si $\nabla\rho = \mathbf{w} \Rightarrow \nabla\tilde{\rho} = \tilde{\mathbf{w}}$ ".

Equation sur $\tilde{\rho}$

$$\partial_t \tilde{\rho} + \mathbf{v} \cdot \nabla \tilde{\rho} + \rho \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}}) = 0.$$

Equation sur $\nabla\tilde{\rho}$

$$\partial_t \nabla \tilde{\rho} + (\nabla \mathbf{v})^t \nabla \tilde{\rho} + \nabla^2 \tilde{\rho} \mathbf{v} + \nabla \rho \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}}) + \rho \nabla \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}}) = 0.$$

Equation sur $\tilde{\mathbf{w}}$

$$\partial_t \tilde{\mathbf{w}} + \underbrace{(\nabla \mathbf{v})^t \tilde{\mathbf{w}}}_{\text{reste quadratique}} + \nabla \tilde{\mathbf{w}} \mathbf{v} + \tilde{\mathbf{w}} \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}}) + \rho \nabla \operatorname{div}(\tilde{\mathbf{v}}) = 0.$$

- On fait la différence entre l'équation sur $\tilde{\mathbf{w}}$ et $\nabla\tilde{\rho}$.
- Cette équation admet une unique solution.
- La fonction nulle vérifie l'équation.

THERMODYNAMIQUE MONO-ESPÈCE

Par la propriété (T_1) et en définissant $\nu_1 = \frac{\nu}{y_1}$

$$e(T, \nu, y_1) = y_1 e(T, \nu_1, \mathbf{1}), \quad s(T, \nu, y_1) = y_1 s(T, \nu_1, \mathbf{1}),$$

$$p(T, \nu, y_1) = y_1 p(T, \nu_1, \mathbf{1}).$$

On définit alors des nouvelles fonctions

$$e_1(T, \nu_1) := e(T, \nu_1, \mathbf{1}), \quad s_1(T, \nu_1) := s(T, \nu_1, \mathbf{1}), \quad p_1(T, \nu_1) := p(T, \nu_1, \mathbf{1}).$$

Thermodynamique adaptée

Les fonctions e_1 , s_1 et p_1 sont une thermodynamique pour la variable (T, ν_1) .

$$\begin{cases} T ds_1 & = \partial_T e_1 dT + (\partial_{\nu_1} e_1 + p_1) d\nu_1, \\ g_1(T, \nu_1) & = e_1(T, \nu_1) - T s_1(T, \nu_1) + p_1 \nu_1. \end{cases}$$

loi d'état SRK

$$p(\zeta) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{M_i} \right) \frac{RT}{\nu - b(\mathbf{y})} - \frac{a(T, \mathbf{y})}{\nu(\nu + b(\mathbf{y}))},$$

Calcul des b_i

$$b(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^n y_i b_i,$$
$$b_i = 0.08664 \frac{RT_{c,i}}{M_i p_{c,i}},$$

Calcul des a_j

$$a(T, \mathbf{y}) = \sum_{i,j=1}^n y_i y_j \alpha_i(T) \alpha_j(T),$$

$$\frac{\alpha_i(T)}{\alpha_{T_{c,i}}} = 1 + W \left(s_i (1 - \sqrt{T} / \sqrt{T_{c,i}}) \right),$$

$$\alpha_{T_{c,i}} = \sqrt{a_{T_{c,i}}},$$

$$a_{T_{c,i}} = 0.42748 \frac{R^2 T_{c,i}^2}{M_i p_{c,i}},$$

$$W(t) = \begin{cases} t & \text{si } t \geq 0 \\ \frac{t}{(1+t^4)^{1/4}}, & \text{si } t \leq 0 \end{cases}$$

$$s_i = 0.48508 + 1.5517\pi_i - 0.151613\pi_i^2.$$

$$p^{\text{gp}}(T, \nu, \mathbf{y}) := \frac{RT}{\nu} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{M_i},$$

$$e^{\text{gp}}(T, \mathbf{y}) := \sum_{i=1}^n y_i e_i^{\text{gp}}(T), \quad e_i^{\text{gp}}(T) = e_i^{\text{st}} + \int_{T^{\text{st}}}^T c_{v,i}^{\text{gp}}(T') dT',$$

$$s^{\text{gp}}(T, \nu, \mathbf{y}) := \sum_{i=1}^n y_i s_i^{\text{gp}}(T, \nu),$$

$$s_i^{\text{gp}}(T, \nu) = s_i^{\text{st}} + \int_{T^{\text{st}}}^T \frac{c_{v,i}^{\text{gp}}(T')}{T'} dT' - \frac{R}{M_i} \ln \left(\frac{y_i RT}{\nu M_i p^{\text{st}}} \right).$$

- e_i^{gp} : l'énergie interne massique de la i ème espèce,
- $c_{v,i}^{\text{gp}}$: la capacité thermique massique à volume constant de la i ème espèce,
- $^{\text{st}}$: état standard.

- Domaine en Température de validité du modèle
 $[T_{\text{basse}}, T_{\text{haute}}] = [T_{\text{basse}}, T_{\text{mil}}] \cup [T_{\text{mil}}, T_{\text{haute}}]$,
- Sur chaque sous-intervalle, on utilise un polynôme pour approcher $c_{p,i}$, h_i et s_i .

$$\frac{c_{p,i}^{\text{gp}}(T)}{R} = a_{1,i} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3,$$
$$\frac{h_i^{\text{gp}}(T)}{RT} = a_{1,i} + \frac{a_{2,i}}{2}T + \frac{a_{3,i}}{3}T^2 + \frac{a_{4,i}}{4}T^3 + \frac{a_{6,i}}{T},$$
$$\frac{s_i^{\text{gp}}(T, \nu)}{R} = a_{1,i} \ln(T) + a_{2,i}T + \frac{a_{3,i}}{2}T^2 + \frac{a_{4,i}}{3}T^3 + \frac{a_{5,i}}{4}T^4 +$$
$$+ a_{7,i} - \frac{\ln(x_i)}{M_i} - \frac{1}{M_i} \ln(p/p^{\text{st}}).$$

DÉFINITION DE LA FORTE PARABOLICITÉ

$$\bar{\mathbf{A}}_0 \partial_t w - \sum_{i,j \in \mathcal{D}} \bar{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{x_j} \partial_{x_i} w - \bar{f}(w, \nabla w) = 0, \quad (1)$$

$\bar{\mathbf{A}}_0$ définie positive et $(\bar{\mathbf{B}}_{ij})^t = \bar{\mathbf{B}}_{ji}$.

DEFINITION

On suppose que le système (1) est symétrique en un certain w . Ce système est fortement parabolique s'il existe une constante δ strictement positive telle que pour tout $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_d)^t$ et $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_1, \dots, \zeta_d)^t$, on a

$$\sum_{1 \leq i,j \leq d ; 1 \leq k,l \leq n} (\bar{\mathbf{B}}_{ij})_{kl} \xi_i \xi_j \zeta_k \zeta_l \geq \delta |\boldsymbol{\xi}|^2 |\boldsymbol{\zeta}|^2.$$