



Analyse numérique des équations de Maxwell-Stefan



Durée : environ 5 mois (mars – juillet 2012)

Contexte et objectifs : La diffusion est un processus dépendant du temps, prenant sa source dans le mouvement auto-généré de particules données dans l'espace. Traditionnellement, la diffusion est décrite par la loi de Fick. Son postulat est qu'une espèce donnée va se déplacer d'une région à forte concentration vers une région à concentration plus faible, et que le flux est proportionnel au gradient de la concentration.

Cette relation de proportionnalité entre le flux et le gradient de concentration fournit une bonne approximation du processus de diffusion dans la plupart des cas. Néanmoins, dans certaines situations, on ne peut plus se contenter de la loi de Fick. La diffusion dans des mélanges gazeux à plusieurs espèces a été décrite avec précision pour la première fois dans des travaux indépendants de Maxwell et de Stefan. Ils expliquent que la diffusion est due aux interactions binaires entre molécules du mélange gazeux, ce qui mène à un système d'équations aux dérivées partielles couplées et non linéaires que nous détaillons dans [1]. La diffusion apparaît alors comme bien plus complexe que prévue par la loi de Fick. On peut renvoyer à l'article de revue physique sur les équations de Maxwell-Stefan [3].

L'objectif du stage est d'établir des discrétisations possibles de ces équations de Maxwell-Stefan, comme cela a été fait de façon préliminaire dans [1], et d'étudier les propriétés des schémas qui en découlent. L'ouvrage [2] servira de référence au cours du stage.

Profil souhaité : Étudiant de Master 2 ou de dernière année d'école d'ingénieur, spécialisé en mathématiques appliquées avec compétences en Scilab ou Matlab.

Perspectives : Ce stage pourra éventuellement se prolonger en une thèse de doctorat en mathématiques appliquées.

Lieu du stage : Laboratoire Jacques-Louis Lions, UPMC

Responsables du stage :

L. Boudin (IJLL, UPMC & Reo, INRIA Paris-Rocquencourt),

laurent.boudin@upmc.fr

V. Giovangigli (CMAP, École Polytechnique)

vincent.giovangigli@polytechnique.fr

B. Grec (Reo, INRIA Paris-Rocquencourt & MAP5, Paris Descartes),

berenice.grec@parisdescartes.fr

F. Salvarani (Département de mathématiques, Pavie, Italie),

francesco.salvarani@unipv.it

Bibliographie :

[1] L. Boudin, B. Grec, F. Salvarani. A mathematical and numerical analysis of the Maxwell-Stefan diffusion equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 2011. Accepté pour publication sous réserve de modifications.

[2] V. Giovangigli. *Multicomponent flow modeling. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1999.

[3] R. Krishna, J.A. Wesselingh. The Maxwell-Stefan approach to mass transfer. *Chem. Eng. Sci.*, 52(6):861-911, 1997.