



Proposition de stage:

Mise en oeuvre d'un schéma aux volumes finis convergent qui préserve la décroissance de l'entropie pour un modèle de diffusion croisée: le système de Stefan-Maxwell.

Travail demandé

Les modèles de diffusion croisée sont des systèmes d'équations paraboliques fortement couplées. La dynamique d'un mélange gazeux à composants multiples peut être décrite par les équations de Maxwell-Stefan, qui modélisent le transport diffusif des composants du mélange. Les applications sont nombreuses : sédimentation, dialyse, voies respiratoires, électrolyse et réacteurs chimiques. Sous certaines hypothèses simplificatrices (vitesse barycentrique décroissante, gaz idéal, conditions isobares et isothermes, mêmes masses molaires pour tous les composants), les équations pour les concentrations molaires u_1, \dots, u_n sont données par les équations de bilan massique et les bilans de force réduits :

$$\partial_t u_i + \operatorname{div} J_i = 0 \quad \nabla u_i = - \sum_{j \neq i} \frac{u_j J_i - u_i J_j}{D_{ij}}, \quad i = 1, \dots, n,$$

où les $D_{ij} > 0$ sont les coefficients de diffusion binaire. Et l'on a $\sum_{i=1}^n u_i = 1$.

L'objectif de ce stage sera de mettre en oeuvre, de tester voire d'améliorer, pour ce système, un schéma récent aux volumes finis convergent qui préserve la décroissance de l'entropie.

Connaissances préalables

Ce stage fait principalement appel à des connaissances en méthodes numériques pour la résolution d'EDP et plus particulièrement sur la résolution numérique d'équations paraboliques, ainsi qu'à une pratique du langage C/C++.

- Type de stage: dernière année d'école d'ingénieur et/ou master Recherche/ Pro.
- Spécialité: mathématiques appliquées.
- Durée: idéalement 6 mois.
- Lieu: Centre CEA, DAM, DIF situé 6 rue de la Piquetterie à Bruyères Le Châtel en Essonne, et desservi par cars CEA notamment depuis Paris.
- Gratification selon formation, possibilité d'indemnités de logement et indemnité de fin de stage.
- Responsables: Christophe Buet christophe.buet@cea.fr et Emmanuel Labourasse emmanuel.labourasse@cea.fr