Simulation Numérique de Points Critiques et d'Écoulements Étirés pour les Mélanges d'Éthane et d'Azote

Vincent GIOVANGIGLI, CMAP-CNRS Ecole Polytechnique - Palaiseau
Yoann LE CALVEZ, CMAP Ecole Polytechnique - Palaiseau
Flore NABET, CMAP Ecole Polytechnique - Palaiseau
Guillaume RIBERT, Coria Insa - Rouen

Avant toute simulation d'écoulement de fluides, il est nécessaire d'en connaître la thermodynamique. Celle-ci est construite à partir d'une loi d'état en utilisant les gaz parfaits comme conditions aux limites pour les faibles densités [GM12]. On utilise en pratique la loi d'état de Soave-Redlich-Kwong (SRK) et la thermodynamique obtenue autorise les instabilités chimiques et mécaniques.

On s'intéresse ici aux mélanges d'éthane et d'azote et il est naturel de vouloir simuler leurs états critiques. Ces derniers sont caractérisés comme les valeurs singulières d'une matrice faisant intervenir des dérivées troisièmes de la fonction de Gibbs [PR77]. Un calculateur formel est utilisé afin d'écrire les programmes FORTRAN correspondants ainsi qu'une méthode de continuation permettant de passer les points de retournement [Kel77]. Les points critiques des mélanges d'éthane et d'azote obtenus sont en bon accord avec les résultats expérimentaux.

La thermodynamique est ensuite étendue aux phénomènes capillaires et on s'intéresse ensuite aux différences entre cette dernière et la thermodynamique issue de SRK. On simule alors numériquement des écoulements étirés pour des mélanges d'éthane et d'azote pour ces deux thermodynamiques. Une formulation augmentée [Bre+16] est utilisée pour résoudre le système fluide modélisé par la thermodynamique capillaire.

Ce travail a été soutenu par le projet ANR INSIDE ANR-19-CE05-0037-02 de l'Agence Nationale pour la Recherche.

Références

[Bre+16] Didier Bresch et al. "A generalization of the quantum Bohm identity : Hyperbolic CFL condition for Euler–Korteweg equations". In : *Comptes Rendus Mathematique* 354.1 (2016), p. 39-43.

[GM12] Vincent Giovangigli et Lionel Matuszewski. "Supercritical fluid thermodynamics from equations of state". In : *Physica D : Nonlinear Phenomena* 241.6 (2012), p. 649-670.

[Kel77] Herbert B Keller. "Numerical solution of bifurcation and nonlinear eigenvalue problems". In : *Application of bifurcation theory* (1977), p. 359-384.

[PR77] Ding-yu Peng et Donald B Robinson. "A rigorous method for predicting the critical properties of multicomponent systems from an equation of state". In : *AIChE Journal* 23.2 (1977), p. 137-144.

Contact : `yoann.le-calvez@polytechnique.edu`