



Modélisation de mélanges gazeux réactifs ionisés dissipatifs

Benjamin Graille

► To cite this version:

Benjamin Graille. Modélisation de mélanges gazeux réactifs ionisés dissipatifs. Mathématiques [math]. Migration - université en cours d'affectation, 2004. Français. NNT : . tel-00007444v1

HAL Id: tel-00007444

<https://theses.hal.science/tel-00007444v1>

Submitted on 18 Nov 2004 (v1), last revised 26 Nov 2004 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Thèse pour l'obtention du titre de
DOCTEUR DE L'ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Spécialité : Mathématiques Appliquées

présentée et soutenue par

Benjamin GRAILLE

Modélisation de mélanges gazeux réactifs ionisés dissipatifs

Jury

Grégoire	ALLAIRE	(Examineur)
Laurent	DESVILLETES	(Rapporteur)
Vincent	GIOVANGIGLI	(Directeur de thèse)
Brigitte	LUCQUIN	(Examineur)
Marc	MASSOT	(Examineur)
Jean-Michel	ROQUEJOFFRE	(Rapporteur)

le 9 novembre 2004

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier très chaleureusement Vincent GIOVANGIGLI, mon directeur de thèse, qui a su m'accorder beaucoup de son temps et de son attention. Il m'a toujours accueilli dans son bureau avec patience et gentillesse. Son aide m'a été précieuse tant sur le plan scientifique que sur le plan humain. Son enthousiasme et son optimisme à toute épreuve m'ont permis de toujours prendre plaisir à aborder les nouveaux problèmes et son exigence scientifique fut très formatrice et enrichissante.

Laurent DESVILLETES et Jean-Michel ROQUEJOFFRE ont immédiatement accepté d'être les rapporteurs de cette thèse, malgré un emploi du temps très chargé, et je leur en suis profondément reconnaissant. Je me permets également de remercier Laurent DESVILLETES dont les excellents cours à l'ENS de Cachan ont sans aucun doute inspiré mon orientation vers les Mathématiques Appliquées. Grégoire ALLAIRE, Brigitte LUCQUIN et Marc MASSOT m'ont fait l'honneur de participer au jury. Je suis sensible à leur présence et je les en remercie.

J'ai eu la chance d'effectuer ma thèse au Centre de Mathématiques Appliquées (CMAP) de l'École Polytechnique, un laboratoire extrêmement accueillant et chaleureux dont les multiples équipes de recherche cohabitent en harmonie.

Je porte une attention spéciale aux trois secrétaires du laboratoire, Jeanne, Liliane et Véronique, qui contribuent pour une grande part à la bonne ambiance, que ce soit par l'organisation de pots ou par leur rapidité à résoudre tous les problèmes. Leurs compétences n'ont d'égales que leurs sourires. J'aimerai également remercier Sylvain qui m'a toujours apporté tout le soutien informatique dont j'avais besoin ainsi que Natacha et Robert que j'ai souvent dérangés la dernière année pour des problèmes de Fortran.

Je souhaite citer à présent Florian avec qui il a été très agréable de travailler pour

le monitorat et Frédéric et Karima dont j'ai apprécié les qualités lors du Canum en Alsace.

Je tiens ensuite à remercier les permanents du labo, doctorants ou docteurs (par ordre alphabétique), Habib AMMARI, Emmanuel BACRY, Jocelyne BION-NADAL, Antonin CHAMBOLLE, Jean-François COLONNA, Victorita DOLEAN, Nicole EL KAROUI, Emmanuel GOBET, Carl GRAHAM, Laurence HALPERN, Kamel HAMDACHE, François JOUVE, Alexey et Anastasia KOZHEMYAK, Mi Kyoung LIM, Hervé MAILLOT, Stéphane MALLAT, Sylvie MAS-GALLIC, Aldjia MAZARI, Rémi MUNOS, Frédéric NATAF, Jean-Claude NÉDÉLEC, Olivier PANTZ, Claudia RAVANELLI, que j'ai eu le plaisir de cotoyer au long de ces trois années.

J'adresse également un grand merci à Luca, Patrice, Gabriel, Sofiane, Kaouthar, Asma, Erwan, Charles et Sylvain (encore une fois...), de véritables amis. J'apprécie les soirées passées en votre compagnie, que ce soit autour d'un verre de vodka, de bière ou de thé à la menthe.

Bien sûr, je remercie Audrey qui m'a accompagné tout au long de ma thèse (et même un petit bout avant !). Merci d'avoir supporté le travail le week-end, le réveil à 6h, de d'être occupé de l'appartement tout en préparant également ta thèse...

Enfin, MERCI à tous ceux qui ont eu le courage d'assister à la soutenance (et au pôt).

Table des matières

Introduction	11
<i>Références bibliographiques de l'introduction</i>	17
I Théorie cinétique des mélanges gazeux polyatomiques ionisés	19
I.1 Introduction	20
I.2 Cadre théorique	22
I.2.1 Fonctions de répartitions	22
I.2.2 Propriétés macroscopiques	23
I.2.3 Réactions chimiques	24
I.2.4 Equations de Boltzmann	24
I.3 Entropie cinétique	26
I.3.1 Définition	26
I.3.2 Equation de conservation de l'entropie cinétique	26
I.3.3 Positivité de la production d'entropie cinétique	27
I.4 Développement de Enskog	28
I.4.1 Présentation de la méthode	28
I.4.2 Invariants de l'opérateur de collisions non réactives	29
I.4.3 Développement de Enskog	30
I.5 Approximation d'ordre zéro	32
I.5.1 Fonctions de répartition Maxwelliennes généralisées	32
I.5.2 Equations macroscopiques d'ordre zéro	35
I.5.3 Terme source chimique d'ordre zéro	36
I.5.3.1 Expression du terme source chimique d'ordre zéro	36
I.5.3.2 Conservation des espèces, de la masse et de la charge	37
I.5.3.3 Formulation symétrique des taux de réaction	39
I.5.4 Equation de conservation de la température à l'ordre zéro	40
I.6 Approximation d'ordre un dans le cas $b = 1$	41
I.6.1 Opérateur de Boltzmann linéarisé	41
I.6.2 Equations de Boltzmann linéarisées	42

I.6.3	Remarque sur la solution de l'équation de Boltzmann linéarisée	45
I.6.4	Développement des ϕ_i	46
I.6.4.1	Equations pour $\phi_i^{\hat{\lambda}}$ et $\phi_i^{D_j}$	46
I.6.4.2	Equations pour ϕ_i^{η}	53
I.6.4.3	Equations pour ϕ_i^{κ}	58
I.6.4.4	Equations pour des ϕ_i^r	59
I.6.5	Equations macroscopiques d'ordre un	61
I.6.5.1	Equations de conservation d'ordre un	61
I.6.5.2	Expressions des vitesses de diffusion $\mathbf{V}_i$	64
I.6.5.3	Expression du flux de chaleur $\mathbf{Q}$	70
I.6.5.4	Expression du tenseur de viscosité $\mathbf{\Pi}$	74
I.6.5.5	Expression du terme source chimique $\overline{\omega}_i$	76
I.6.6	Bilan entropique	78
I.6.6.1	Entropie macroscopique volumique	78
I.6.6.2	Equation de conservation de l'entropie	80
I.6.6.3	Positivité de la production d'entropie	80
I.6.7	Relations de réciprocité de Onsager	83
I.7	Structure des systèmes linéaires de transport	85
I.7.1	Formulation variationnelle	85
I.7.2	Techniques itératives	90
I.8	Approximation d'ordre un dans le cas $b = 0$	92
I.8.1	Equations macroscopiques d'ordre un	92
I.8.2	Flux et coefficients de transport	93
I.8.3	Production d'entropie	94
I.9	Annexe : Isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé	95
I.9.1	Etude des collisions non réactives	95
I.9.2	Cas des fonctions du type $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i$	97
I.9.2.1	Etude du premier terme	98
I.9.2.2	Etude du deuxième terme	99
I.9.2.3	Etude du troisième terme	100
I.9.2.4	Etude du quatrième terme	102
I.9.3	Cas général	103
I.10	Annexe : Complexification et notations $\parallel$, $\perp$ et $\odot$	104
I.10.1	Anisotropie et complexification	104
I.10.2	Formulations complexes des flux de transport	105
	<i>Références bibliographiques du chapitre I</i>	107
II	Le problème de Cauchy local pour les plasmas dissipatifs	111
II.1	Introduction	112

II.2	Equations pour les mélanges gazeux réactifs ionisés et magnétisés . .	113
II.2.1	Equations de conservation	113
II.2.2	Flux de transport	114
II.2.3	Expression du terme source chimique	117
II.2.4	Relations thermodynamiques	118
II.2.5	Equations de Maxwell	120
II.2.6	Hypothèses mathématiques	120
II.2.6.1	Hypothèses sur la thermoélectrochimie	121
II.2.6.2	Hypothèses sur les coefficients de transport	122
II.2.7	Production d'entropie	123
II.2.8	Formulations alternatives	125
II.3	Forme quasilineaire	127
II.3.1	Notations vectorielles	128
II.3.2	L'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{U}$	129
II.3.3	Forme quasilineaire	130
II.4	Existence locale pour un système abstrait	138
II.4.1	Symétrisation partielle et entropie partielle	138
II.4.2	Formes normales partielles	141
II.4.3	Un théorème d'existence dans $V_l(\mathbb{R}^d)$	146
II.5	Théorème d'existence pour les mélanges multiespèces magnétisés . . .	149
II.5.1	Symétrisation partielle	149
II.5.2	Variable normale partielle	157
II.5.3	Théorème d'existence	164
	<i>Références bibliographiques du chapitre II</i>	169

III Les plasmas ambipolaires 171

III.1	Introduction	172
III.2	Les mélanges gazeux réactifs ambipolaires	173
III.2.1	Equations de conservation	174
III.2.2	Flux de transport	175
III.2.3	Contrainte du courant nul	175
III.2.4	Relations thermodynamiques	177
III.2.5	Termes sources chimiques	178
III.2.6	Hypothèses mathématiques	178
III.2.6.1	Hypothèses sur la thermochimie	179
III.2.6.2	Hypothèses sur les coefficients de transport	181
III.2.7	Formulation quasi-linéaire	182
III.3	Nullité de la masse de l'électron	187
III.3.1	Définition de D comme une inverse généralisée	187

III.3.2	Matrices de diffusion pour la masse électronique nulle	189
III.3.3	Hypothèses lorsque la masse de l'électron est nulle	193
III.4	Existence locale pour un système abstrait	194
III.4.1	Symétrisation conservative	194
III.4.2	Forme normale	197
III.4.3	Existence locale	199
III.5	Existence globale et stabilité asymptotique pour un système abstrait .	205
III.5.1	Dissipativité locale	206
III.5.2	Existence globale et stabilité asymptotique	207
III.5.3	Estimations de décroissance	217
III.6	Symétrisation pour les plasmas ambipolaires	220
III.6.1	Entropie et forme conservative symétrique	220
III.6.2	Variable normale	223
III.7	Existence globale et stabilité asymptotique	227
III.7.1	Résultats principaux	227
III.7.2	Preuve	230
	<i>Références bibliographiques du chapitre III</i>	233
IV	Simulations numériques de flammes laminaires ionisées	235
IV.1	Introduction	236
IV.2	Equations des flammes isobares ionisées	237
IV.2.1	Equations de conservation	237
IV.2.2	Relations thermodynamiques	239
IV.2.3	Expression du terme source chimique	241
IV.2.4	Flux de transport	243
IV.2.5	Equation de Poisson	244
IV.3	Les équations des flammes planes	245
IV.3.1	Les équations de conservation instationnaires	245
IV.3.2	Les équations de conservation stationnaires	247
IV.3.3	Les conditions aux limites pour les flammes stationnaires . . .	248
IV.4	Les équations des flammes étirées	250
IV.4.1	Les équations de conservation instationnaires	251
IV.4.2	Les conditions aux limites	254
IV.4.3	Les variables traditionnelles	256
IV.4.4	Les équations des flammes étirées stationnaires	256
IV.5	Méthode numérique	258
IV.5.1	Equations discrétisées	258
IV.5.2	Librairies de thermochimie et de transport	261
IV.5.3	Méthode de continuation	261

IV.6 Calcul de flammes laminaires d'hydrogène	262
IV.6.1 Données thermochimiques	262
IV.6.2 Données de transport	265
IV.6.3 Calcul d'une flamme plane laminaire	265
IV.6.4 Calcul d'une flamme laminaire étirée ($a = 2000s^{-1}$)	272
IV.6.5 Calcul d'une flamme laminaire étirée ($a = 400s^{-1}$)	276
<i>Tables des figures du chapitre IV</i>	283
<i>Références bibliographiques du chapitre IV</i>	285
Index des symboles	289

Introduction

Cette thèse est consacrée à l'étude de mélanges gazeux réactifs dissipatifs partiellement ionisés. Nous élaborons pour de tels mélanges des modèles macroscopiques d'équations aux dérivées partielles et nous effectuons diverses études mathématiques puis quelques simulations numériques dans différents contextes.

L'ionisation des mélanges gazeux réactifs est un phénomène abondamment étudié actuellement tant du point de vue de la modélisation physique que de l'étude mathématique ou de la simulation numérique. Les plasmas réactifs sont en effet des milieux qu'il est important d'apprendre à maîtriser qu'ils nous soient imposés, comme dans le cas de l'ionisation devant le nez d'une navette rentrant dans l'atmosphère, ou que l'on cherche au contraire à les utiliser pour résoudre des problèmes scientifiques et industriels, tels que la stabilisation des flammes pauvres ou encore le dépôt chimique en phase vapeur pour fabriquer des films minces. Nous nous sommes intéressés durant cette thèse aux trois versants de ce problème, la modélisation, l'étude mathématique des modèles obtenus et la simulation numérique.

Cette thèse est donc formée de trois parties, la première constituée du chapitre I correspondant à la modélisation des mélanges gazeux réactifs ionisés soumis à un champ électromagnétique. La seconde, où nous étudions mathématiquement divers modèles, regroupe les chapitres II et III. Dans la dernière partie, formée du chapitre IV, nous effectuons quelques simulations numériques. Nous avons essayé de rendre chacun de ces quatre chapitres formellement indépendant des autres en rappelant les notations et les hypothèses considérées.

La partie modélisation a consisté à déterminer les équations macroscopiques régissant les mélanges gazeux réactifs partiellement ionisés à partir d'un modèle moléculaire de type Boltzmann. L'objectif est de prendre en compte des mélanges partiellement ionisés d'espèces polyatomiques ainsi qu'un nombre arbitraire de réactions

chimiques entre ces espèces, dans un cadre monotempérature et sans micropolarisation. S. Chapman et T.G. Cowling se sont intéressés aux mélanges binaires de gaz monoatomiques [CC70] et J.H. Ferziger et H.G Kaper ont ensuite complètement étudié le cas des mélanges multiespèces monoatomiques non réactifs [FK72]. Ces auteurs ont montré qu'un champ magnétique intense engendre une anisotropie du milieu qui se traduit par une anisotropie des coefficients de transport.

Pour dériver des modèles macroscopiques du modèle microscopique, nous effectuons un développement de Enskog à l'ordre zéro et à l'ordre un, en considérant les interactions électromagnétiques entre les particules ionisées et en distinguant deux cas selon l'intensité du champ magnétique. Cette analyse asymptotique nous permet d'obtenir les équations macroscopiques aux régimes d'ordre zéro et d'ordre un, ainsi que des expressions des flux de transport et les relations thermochimiques. En ce qui concerne les coefficients de diffusion, leurs expressions sous forme de crochets intégraux selon chaque direction spatiale font intervenir des termes qui n'apparaissent pas dans [FK72]. Nous donnons également pour la première fois la structure des matrices de diffusion multiespèces. Pour les coefficients de viscosité, nous distinguons classiquement la viscosité volumique ainsi que cinq viscosités de cisaillement à cause de l'anisotropie. Nous exprimons également ces coefficients sous forme de crochets intégraux et nous donnons les propriétés de positivité associées. A notre connaissance, c'est la première fois que ces propriétés non intuitives des coefficients de transport sont exposées tant pour la partie diffusive que pour la partie visqueuse. A l'aide de ces dernières, nous établissons ensuite la positivité de la production d'entropie macroscopique.

Nous nous intéressons enfin à l'évaluation des coefficients de transport par la résolution de systèmes linéaires. Nous étudions la structure de ces systèmes linéaires de transport et la convergence des méthodes itératives de résolution. Nous en déduisons une expression des coefficients de transport sous la forme de séries convergentes.

Concernant l'étude mathématique des divers modèles obtenus, nous avons déterminé la structure des systèmes d'équations aux dérivées partielles obtenus en utilisant les propriétés de symétrie et nous en avons déduit des théorèmes d'existence et d'unicité de solutions. A.I. Vol'Pert et S.I. Hudjaev ont étudié la résolution locale du problème de Cauchy dans un espace de fonctions régulières pour des systèmes composites hyperboliques-paraboliques d'équations non-linéaires. Ils appliquent notamment leur théorie au système d'équations d'un fluide visqueux compressible et à celui de la dynamique des gaz [VH72]. S. Kawashima s'est intéressé à l'existence globale en temps et à la stabilité asymptotique de solutions régulières du problème de Cauchy pour une classe de systèmes quasi-linéaires symétriques hyperboliques-paraboliques. Les systèmes qu'il considère ne tiennent pas compte de phénomènes non isotropes,

ni de courant de conduction, ni de réactions chimiques entre les espèces. Il montre en particulier que les solutions constantes sont asymptotiquement stables en temps pour de petites perturbations à l'instant initial et il applique ces résultats au système de Navier-Stokes et aux équations des fluides conducteurs en présence d'un champ électromagnétique [Kaw84]. V. Giovangigli et M. Massot ont établi des résultats de stabilité asymptotique dans le cas des mélanges gazeux réactifs non ionisés avec des mécanismes réactionnels quelconques [GM98a]. Ils considèrent également des mélanges réactifs de gaz polyatomiques dilués en déséquilibre vibrationnel complet et prouvent le caractère bien posé du problème de Cauchy local en temps pour des conditions initiales régulières [GM98b]. V. Giovangigli s'intéresse par ailleurs aux équations des mélanges gazeux qui sont localement à l'équilibre chimique et démontre des résultats d'existence globale en temps et de stabilité asymptotique autour des états d'équilibre constant [Gio99]. Enfin, V. Giovangigli et M. Massot ont plus récemment étudié des mélanges réactifs dans la limite des équilibres chimiques partiels pour distinguer les réactions lentes des réactions rapides [GM04].

Nous avons étudié dans les chapitres II et III deux modèles de mélanges gazeux réactifs ionisés.

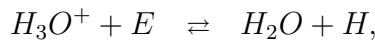
Le premier modèle est celui obtenu dans le chapitre I pour les mélanges ionisés dissipatifs soumis à un champ électromagnétique. A notre connaissance, ce type de modèle n'a jamais été étudié et possède une structure inhabituelle. En effet, les coefficients de diffusion multiespèces des mélanges non ionisés sont isotropes, tandis que ceux de notre modèle sont différents selon chaque direction spatiale où pour un vecteur donné, les trois directions sont celle parallèle au champ magnétique, celle orthogonale au champ magnétique dans le plan engendré par le champ magnétique et ce vecteur et la direction orthogonale aux deux précédentes. Ces flux diffusifs contiennent aussi des termes d'ordre zéro. Par ailleurs, le tenseur de viscosité fait intervenir tous les tenseurs symétriques construits à partir du tenseur des taux de déformation et de la matrice de rotation antisymétrique associée au champ magnétique. Enfin, notons également que le terme source du système obtenu contient des termes linéaires en les gradients des variables macroscopiques qui proviennent de la présence du courant de conduction dans l'équation de Maxwell-Ampère. En utilisant les variables entropiques, nous récrivons le système de lois de conservation tout d'abord sous une forme partiellement symétrique, puis sous une forme partiellement normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système quasi-linéaire composé de deux sous-systèmes couplés, le premier symétrique hyperbolique et le second fortement parabolique. Le système fortement parabolique n'est pas qualifié de symétrique car, d'une part, les termes convectifs contiennent des termes non symétriques provenant directement des contributions d'ordre zéro des flux diffusifs et, d'autre part,

les termes dissipatifs ne sont pas symétriques. Ce défaut de symétrie est dû aux relations de réciprocité de Onsager qui imposent de changer le champ magnétique en son opposé lorsque l'on effectue une transposition et les termes impairs en le champ magnétique sont donc anti-symétriques. Une difficulté associée à l'anisotropie est d'établir la régularité des coefficients du système d'équations aux dérivées partielles lorsque le champ magnétique tend vers zéro. Cette régularité est établie grâce au comportement asymptotique des coefficients de transport lorsque le champ magnétique tend vers zéro obtenue au chapitre I. Nous démontrons enfin un théorème d'existence locale en temps et d'unicité d'une solution bornée et régulière pour le problème de Cauchy en utilisant un résultat de A.I. Vol'Pert et S.I. Hudjaev.

Le second modèle, que nous étudions au chapitre III, est un modèle de plasma ambipolaire, obtenu à partir des équations des plasmas généraux lorsque la longueur de Debye tend vers zéro. Celui-ci est un modèle quasi-neutre où la densité de courant de conduction est prise nulle. Dans le cadre de cette approximation, il n'y a pas de champ magnétique et le champ électrique est éliminé grâce à la contrainte du courant nul. Le champ électrique peut alors s'exprimer sous la forme d'une combinaison linéaire des gradients des variables macroscopiques et les flux de transport résultants s'expriment à partir de nouveaux coefficients de transport effectifs. Pour étudier la limite lorsque la masse de l'électron tend vers zéro, nous utilisons une formulation molaire des équations et nous établissons la régularité des coefficients de transport effectifs vis-à-vis de la masse de l'électron. Nous établissons que les équations gouvernant ce modèle peuvent s'écrire sous une forme symétrique en utilisant les variables entropiques. Les matrices de dissipation correspondantes satisfont la propriété d'invariance des noyaux et le système d'équations aux dérivées partielles peut être écrit sous forme normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système composite symétrique hyperbolique-parabolique. La structure de ce système est la même que celle obtenue pour les mélanges gazeux réactifs non ionisés en prenant le soin de modifier convenablement les termes sources chimiques et/ou les matrices de diffusion. La nouveauté est apportée par la masse de l'électron qui est considérée comme un paramètre de ce système destiné à tendre vers zéro. Nous établissons un résultat d'existence locale pour un système avec un paramètre, puis, en utilisant des estimations uniformes en ce paramètre, nous obtenons l'existence globale et la stabilité asymptotique des états d'équilibre ainsi que des estimations de décroissance uniformes par rapport au paramètre et la continuité par rapport à ce paramètre. Nous démontrons alors que, pour les plasmas ambipolaires, la solution globale est continue par rapport à la masse de l'électron lorsque celle-ci s'annule.

Pour la partie simulation numérique, nous avons calculé des flammes ionisées planes et étirées d'un mélange hydrogène-air. Ces flammes sont un parfait exemple de mé-

lange gazeux réactifs et l'ionisation dans les flammes est un thème de recherche très actif dans le contexte actuel des préoccupations environnementales et le souci de réduire les émissions de polluants lors de la combustion. Dans ce but, les industriels cherchent à utiliser des flammes pauvres en combustible qui émettent peu de polluants, mais dont l'inconvénient majeur est d'être difficiles à allumer puis à stabiliser. Un moyen de stabilisation envisagé actuellement est le bombardement de la flamme par des ions. Nous avons éprouvé des difficultés pour obtenir les données thermo-chimiques et les données de transport pour toutes les espèces ionisées. L'ionisation dans une flamme d'hydrogène a assez peu été étudiée et il en est de même pour les flammes d'hydrocarbures. En particulier, la seule réaction d'ionisation intervenant pour l'hydrogène



est très mal connue. En ce qui concerne le calcul de flamme de méthane par exemple, c'est encore pire car la plupart des données thermo-chimiques des ions carbonnés n'a pas été évaluée, notamment pour les ions CH_3^+ , $C_3H_3^+$ et $C_2H_3O^+$.

Nous effectuons des simulations numériques de flammes planes laminaires et de flammes laminaires étirées d'un mélange ionisé hydrogène-air, pour lesquelles les équations considérées ne font apparaître qu'une seule variable d'espace. Nous utilisons une méthode de Newton modifiée pour résoudre les équations discrétisées par différences finies sur une grille adaptative. Pour évaluer les propriétés thermo-chimiques et les propriétés de transport, nous avons recours à des bibliothèques externes CHEMKIN II pour la thermo-chimie [KMJ80, KRM89] et EGLIB pour le transport [EG94, EG95, EG96, EG97]. Nous obtenons des structures de flammes planes typiques d'un mélange hydrogène-air et nous observons que l'impact de l'ionisation pour l'hydrogène est faible. Nous obtenons aussi des structures de flammes étirées pour un étirement fort et pour un étirement faible, l'ionisation de la flamme modifiant également peu ces structures.

Nous envisageons certaines suites à ce travail tant du point de vue de la modélisation, de l'étude mathématique que des simulations numériques.

Il serait extrêmement souhaitable, dans un premier temps, d'évaluer numériquement les coefficients de transport pour les mélanges ionisés magnétisés. Ces développements pourraient conduire à l'écriture de modules que l'on ajouterait à la bibliothèque EGLIB et qui prendraient en compte l'ionisation et/ou l'anisotropie provoquée par le champ magnétique.

Il serait par ailleurs envisageable de simuler des flammes ionisées multidimensionnelles par la méthode des éléments finis, en utilisant des expressions des coefficients de transport valables pour les mélanges ionisés. On pourrait par exemple effectuer

des simulations de l'ionisation dans une flamme laminaire de type Bunsen.

Il serait également très intéressant de généraliser le modèle obtenu à partir de la théorie cinétique des mélanges gazeux réactifs ionisés à des modèles multitempératures. Pour ce type de modèle, les fonctions de répartition à l'ordre zéro des espèces lourdes et des électrons sont des maxwelliennes dont les températures peuvent être différentes [CF67, LD98]. Il serait alors possible d'obtenir des expressions de coefficients de transport—ainsi qu'une chimie—multitempératures et éventuellement de les évaluer numériquement. On en déduirait les hypothèses mathématiques satisfaites par ces coefficients afin d'effectuer une étude des propriétés de symétrie des modèles macroscopiques obtenus pour établir des résultats d'existence de solutions.

La stabilité asymptotique des états d'équilibre constants pour les mélanges réactifs ionisés magnétisés dissipatifs est également un sujet de recherche qu'il faudrait aborder. La structure du système obtenue au chapitre II ne permet pas l'application des théorèmes [Kaw84, GM98a, Gio99]. En effet, en considérant un état d'équilibre constant avec un champ électromagnétique et une vitesse nulle, les matrices de convection à l'équilibre possèdent une partie antisymétrique. Pour obtenir des théorèmes de stabilité asymptotique, il sera donc nécessaire d'établir de nouvelles estimations a priori.

Enfin, un autre axe de recherche est la détermination de l'existence d'une solution au problème d'onde pour les flammes ionisées planes et étirées sans champ magnétique.

Références bibliographiques

- [CC70] S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge Mathematical Library, third ed., 1970.
- [CF67] R.M. Chmielewski and J.H. Ferziger, “Transport Properties of a Nonequilibrium Partially Ionized Gas”, *Phys. Fluids* **10** (1967), no. 2, pp. 364–371.
- [EG94] A. Ern and V. Giovangigli, *Multicomponent transport Algorithms*, Lectures Notes in Physics, Series monographs, m24, Springer, Berlin, 1994.
- [EG95] ———, “Fast and Accurate Multicomponent Property Evaluations”, *J. Comp. Physics* **120** (1995), pp. 105–116.
- [EG96] ———, “Optimised Transport Algorithms for Flame Codes”, *Comb. Sci. Tech.* **118** (1996), pp. 387–395.
- [EG97] ———, “EGLIB : A General Purpose Fortran Library for Multicomponent Transport Property Evaluation”, *Internal Reports, CERMICS 96-51* **250** (1997), pp. 289–315.
- [FK72] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [Gio99] V. Giovangigli, *Multicomponent Flow Modeling*, Birkhäuser, 1999.
- [GM98a] V. Giovangigli and M. Massot, “Asymptotic Stability of Equilibrium States for Multicomponent Reactive Flows”, *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.* **8** (1998), pp. 251–297.
- [GM98b] ———, “The Local Cauchy Problem for Multicomponent Reactive Flows in Full Vibrational Non-equilibrium”, *Math. Metho. Appl. Sci.* **21** (1998), pp. 1415–1469.
- [GM04] ———, “Entropic structure of multicomponent reactive flows with partial equilibrium reduced chemistry”, *Math. Metho. Appl. Sci.* **27** (2004), pp. 739–768.
- [Kaw84] S. Kawashima, *Systems of a Hyperbolic-Parabolic Composite Type, with Applications to the equations of Magnetohydrodynamics*, Doctoral thesis, Kyoto University, 1984.

- [KMJ80] R.J. Kee, J.A. Miller and T.H. Jeffersen, *CHEMKIN : A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package*, SAND80-8003, SANDIA National Laboratories Report, 1980.
- [KRM89] R.J. Kee, F.M. Rupley and J.A. Miller, *CHEMKIN II : A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics*, SAND89-8009B, SANDIA National Laboratories Report, 1989.
- [LD98] B. Lucquin-Desreux, “Fluid limit for magnetized plasmas”, *transport theory and statistical physics* **27** (1998), no. 2, pp. 99–135.
- [VH72] A.I. Vol’Pert and S.I. Hudjaev, “On the Cauchy Problem for composite systems of Nonlinear Differential Equations”, *Math USSR Sbornik*. **16** (1972), pp. 517–544.

Théorie cinétique des mélanges gazeux polyatomiques ionisés

Ce chapitre reprend et détaille un article paru dans *Physica A*, volume 327 (2003), pages 313–348.

Résumé

On s'intéresse aux mélanges gazeux réactifs partiellement ionisés en présence d'un champ électromagnétique en partant d'une équation de Boltzmann généralisée comprenant un terme source valide pour un mécanisme réactionnel quelconque. On étudie le développement de Enskog de cette équation et on obtient les équations de conservation macroscopiques pour les régimes d'ordre zéro et d'ordre un, ainsi que les expressions des flux de transport et des coefficients de transport. On écrit sous forme de crochets intégraux les coefficients de diffusion perpendiculaire/transverse, de diffusion thermique et de viscosité de cisaillement et on introduit une nouvelle définition des taux de diffusion thermique, ces nouvelles expressions se réduisant aux expressions habituelles lorsque le champ magnétique est nul. On étudie les propriétés de positivité des matrices de diffusion multiespèces et on montre que la production d'entropie macroscopique est positive. On s'intéresse enfin à la structure mathématique des systèmes linéaires de transport qui doivent être résolus pour évaluer les coefficients de transport. En particulier, on exprime tous ces coefficients sous la forme de séries convergentes, ces séries fournissant par troncature des coefficients approchés précis utiles pour les modèles numériques.

I.1 Introduction

On observe un intérêt grandissant pour la théorie cinétique des mélanges ionisés réactifs. Le sujet possède en effet de nombreuses applications, notamment les plasmas froids hautes densités utilisés dans les laboratoires, les écoulements de gaz à très hautes vitesses, les phénomènes de rentrée d'objets dans l'atmosphères et les flammes ionisées.

L'application d'une méthode d'Enskog aux gaz partiellement ionisés permet de modéliser les plasmas à haute densité et basse température [FK72, Rai87]. Les effets du champ électromagnétique sont décomposés en deux contributions différentes. Lorsque deux particules sont à des distances inférieures à la longueur de Debye, leur interaction est modélisée par une collision tandis que lorsque la distance est supérieure à la longueur de Debye, leur interaction se fait grâce au champ électromagnétique moyen créé par ces particules [FK72]. Pour la validité de ce modèle, le nombre de particules se trouvant dans une sphère de diamètre la longueur de Debye doit être grand et le rayon cyclotron et la longueur d'onde des ondes électromagnétiques doivent être supérieurs à la longueur de Debye. Pour les gaz partiellement ionisés, l'opérateur approprié est l'opérateur de collision de Boltzmann avec des potentiels d'écran [CF67]. Pour le cas particulier des gaz complètement ionisés, on peut également utiliser l'opérateur de Fokker-Planck qui fournit des résultats quasiment identiques [FK72]. L'opérateur de Fokker-Planck peut en effet être obtenu à partir de l'opérateur de Boltzmann en passant à la limite pour des collisions rasantes et, pour la plupart des particules, les collisions multiples impliquant de faibles forces sont statistiquement équivalentes à des successions de collisions binaires de petit angle [CD69].

Chapman et Cowling ont été les premiers à appliquer la théorie de Chapman et Enskog aux mélanges ionisés dans le cas des mélanges binaires monoatomiques [CC70]. Kaneko et coauteurs ont proposé des évaluations d'ordres plus élevés des coefficients de transport pour des mélanges neutres binaires soumis à un champ magnétique uniforme dans un cadre cinétique simplifié [Kan60, KT78, KY80]. Le cas des mélanges de plusieurs gaz monoatomiques a été étudié en détails par Ferziger et Kaper [FK72]. Dans ce chapitre, on considère le cas général des mélanges gazeux polyatomiques et réactifs. Le mélange d'espèces polyatomiques est décrit dans un cadre semi-classique en utilisant les équations de Wang Chang, Uhlenbeck et de Boer, dans lesquelles les sections efficaces de collision sont moyennées sur les dégénérescences [Rai87, EG94]. Les termes sources chimiques qui apparaissent dans les équations de Boltzmann sont essentiellement tirés des travaux de Ludwig et Heil [LH60], Alexeev et coauteurs [ACG94], Ern et Giovangigli [EG98] et Grünfeld [Grü93], et sont va-

lides pour des mécanismes réactionnels quelconques. On supposera également que les fonctions de répartition ne dépendent pas des moments angulaires [MM88].

On considère un mélange monotempérature et on suppose que le champ électrique n'est pas trop intense [FK72]. Cette situation se rencontre dans de nombreuses expériences de laboratoire et dans des plasmas atmosphériques comme, par exemple, les torches à plasma couplées par induction, les plasmatrions à micro-ondes ou les décharges optiques continues [Rai87, FK72]. La généralisation aux mélanges réactionnels multitempératures, dont les équations résultent d'un passage à la limite vers zéro du rapport entre la masse des électrons et celle des ions, sort du cadre de cette thèse. On suppose également qu'il n'y a qu'une seule vitesse dans le mélange et on écarte les modèles multifluides où chaque espèce possède sa propre vitesse [Bra65]. On note au passage que les équations de conservation macroscopiques pour les modèles multifluides conduisent à de sérieux problèmes mathématiques.

On effectue un développement de Enskog et on obtient les équations de conservations macroscopiques correspondant aux régimes d'ordre zéro et d'ordre un, ainsi que les flux de transport et les coefficients de transport dans ces deux cas. Les expressions sous forme de crochets intégraux des coefficients de transport orthogonaux et transverses au champ magnétique incluent des termes quadratiques négligés dans [FK72]. On exprime également pour la première fois les viscosités de cisaillement grâce à des crochets intégraux. Une nouvelle définition des taux de diffusion thermique est introduite qui se réduit à la définition habituelle en l'absence de champ magnétique. On étudie ensuite les propriétés de positivité des matrices de diffusion multiespèces parallèle, orthogonale et transverse qui en résultent. Ces propriétés, établies ici pour les matrices exactes provenant de la théorie cinétique des gaz, sont un point-clé pour les approximations numériques de la diffusion multiespèces : les algorithmes utilisés pour évaluer les coefficients de transport doivent préserver ces propriétés. À l'aide de ces propriétés de positivité, on établit ensuite la positivité de la production d'entropie macroscopique. Ce résultat, paru pour la première fois dans [GG03], est important tant du point de vue thermodynamique que mathématique et numérique [Gio99]. Pour ce faire, on généralise l'utilisation des quantités complexes introduites en [CC70, FK72] qui permettent de réduire les produits de vecteurs à des multiplications scalaires par des nombres imaginaires.

En utilisant des approximations matricielles de l'opérateur de collision, on peut évaluer les coefficients de transport par la résolution de grands systèmes linéaires. On s'intéresse à la structure mathématique de ces systèmes linéaires de transport. Bien qu'une inversion directe de ces systèmes linéaires soit envisageable, celle-ci a un coût prohibitif pour de nombreuses applications pratiques impliquant des flux multiespèces. Afin de diminuer le coût effectif des approximations des coefficients de

transport, il faut développer des modèles numériques détaillés respectant la théorie cinétique plutôt qu'utiliser des moyennes empiriques. On étudie ici le caractère bien posé des systèmes linéaires de transport et on établit la convergence de méthodes itératives. Il en résulte une expression des coefficients de transport sous la forme de séries convergentes qui fournissent par troncature des suites d'approximations de ces coefficients généralisant ainsi des propriétés établies dans le cas des mélanges non ionisés [EG95, EG96].

La deuxième section présente les équations cinétiques des mélanges réactifs ionisés. La troisième partie est consacrée à l'entropie cinétique. On présente dans une quatrième section le développement de Enskog qui permet de déterminer une solution approchée de l'équation de Boltzmann. La cinquième partie concerne l'approximation d'ordre zéro et la sixième partie l'approximation d'ordre un dans le cas d'un champ magnétique intense, où l'on détaille les équations de conservations macroscopiques d'ordre un ainsi que les expressions des coefficients de transport d'ordre un. Dans la septième section, on étudie la structure des systèmes linéaires de transport qui déterminent ces coefficients de transport. On termine en présentant brièvement dans la huitième section l'approximation d'ordre un pour le régime du champ magnétique faible.

I.2 Cadre théorique

Dans cette section, on décrit un modèle cinétique pour les mélanges gazeux polyatomiques réactifs en présence d'un champ électromagnétique dans un cadre semi-classique avec une équation de Boltzmann généralisée dérivée de [Wal58]. Ce modèle moyenne les paramètres d'impact sur les différentes dégénérescences quantiques et peut être dérivé de l'équation de Boltzmann obtenue dans le cadre de la mécanique quantique par Waldmann-Snyder [Wal58]. Les expressions des termes sources sont donnés en [LH60, ACG94, EG98, Grü93].

I.2.1 Fonctions de répartition

On considère un mélange gazeux dilué, réactif et ionisé composé de n^s espèces chimiques ayant des degrés internes de liberté et on note $S = \{1, \dots, n^s\}$, l'ensemble des indices de ces espèces et $\mathfrak{Q}_i$, l'ensemble des indices des états énergétiques quantiques de la i^{e} espèce, $i \in S$. L'état du mélange est décrit par les fonctions de répartition des espèces notées $f_i(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}_i, \mathbf{l})$, où $i \in S$ est l'indice de l'espèce, $t \in \mathbb{R}$ le temps,

$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ le vecteur position de dimension trois, $\mathbf{c}_i \in \mathbb{R}^3$ le vecteur vitesse et $I \in \Omega_i$ l'indice de l'état énergétique quantique.

La quantité $f_i(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}_i, I) \delta \mathbf{x} \delta \mathbf{c}_i$ représente le nombre probable de molécules de type i dans l'état quantique indexé par I attendues dans l'élément de volume $\delta \mathbf{x}$ centré en $\mathbf{x}$ dont les vitesses sont dans l'élément $\delta \mathbf{c}_i$ centré en $\mathbf{c}_i$, au temps t .

I.2.2 Propriétés macroscopiques

Les quantités macroscopiques sont aisément obtenues à partir des fonctions de répartition. On note $\mathbf{n}_i$ la densité moléculaire de la i^e espèce, $\mathbf{n}$ la densité moléculaire totale, ρ_i la densité massique de la i^e espèce, ρ la densité massique totale, $\mathbf{m}_i$ la masse moléculaire de la i^e espèce, z_i la charge de la i^e espèce par unité de masse, q_i la charge de la i^e espèce par unité de volume, q la charge totale par unité de volume, $\mathbf{v}$ la vitesse hydrodynamique, $\mathcal{E}$ l'énergie interne par unité de volume et $\mathcal{E}_{iI}$ l'énergie interne de la i^e molécule dans le I^e état quantique. On a en particulier les expressions de la densité moléculaire de la i^e espèce $\mathbf{n}_i$ et celle de la densité moléculaire totale $\mathbf{n}$

$$\mathbf{n}_i = \sum_{I \in \Omega_i} \int f_i d\mathbf{c}_i, \quad \mathbf{n} = \sum_{i \in S} \mathbf{n}_i. \quad (\text{I.1a})$$

La densité massique de la i^e espèce ρ_i et la densité massique totale ρ s'écrivent

$$\rho_i = \mathbf{m}_i \mathbf{n}_i = \sum_{I \in \Omega_i} \int f_i \mathbf{m}_i d\mathbf{c}_i, \quad \rho = \sum_{i \in S} \rho_i, \quad (\text{I.1b})$$

la charge totale q

$$q = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int f_i \mathbf{m}_i z_i d\mathbf{c}_i = \sum_{i \in S} \rho_i z_i = \sum_{i \in S} q_i, \quad (\text{I.1c})$$

la vitesse hydrodynamique $\mathbf{v}$

$$\rho \mathbf{v} = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int f_i \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i d\mathbf{c}_i, \quad (\text{I.1d})$$

et l'énergie totale,

$$\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E} = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int f_i \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{iI} \right) d\mathbf{c}_i. \quad (\text{I.1e})$$

Dans ce chapitre, on obtiendra des équations aux dérivées partielles qui régissent ces quantités macroscopiques (Cf équations (I.85) page 62).

I.2.3 Réactions chimiques

Le mélange gazeux est supposé être le lieu de réactions chimiques. Ces mécanismes réactionnels sont constitués d'un nombre arbitraire de réactions élémentaires réversibles. Celles-ci sont indexées par $r \in \mathfrak{R}$ et sont écrites sous la forme

$$\sum_{i \in \mathcal{F}^r} \mathfrak{M}_i \rightleftharpoons \sum_{k \in \mathcal{B}^r} \mathfrak{M}_k, \quad r \in \mathfrak{R},$$

où $\mathcal{F}^r$ et $\mathcal{B}^r$ sont respectivement les indices des espèces sources et des espèces produits de la r^e réaction, $r \in \mathfrak{R}$, comptés avec leur multiplicité et $\mathfrak{M}_i$ et $\mathfrak{M}_k$ sont les symboles chimiques des espèces. On note ν_{ir}^f et ν_{ir}^b les coefficients stœchiométriques respectivement directs et inverses de la réaction $r \in \mathfrak{R}$, c'est-à-dire les multiplicités avec lesquelles les espèces apparaissent en temps que source et produit de réaction. On définit également ν_{ir} , les coefficients stœchiométriques totaux de la réaction r par

$$\nu_{ir} = \nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f, \quad i \in S, \quad r \in \mathfrak{R}.$$

Les indices des états quantiques des espèces sources et produits seront notés F^r et B^r . Enfin, on pose $\mathcal{F}_i^r = \mathcal{F}^r \setminus \{i\}$, c'est-à-dire que $\mathcal{F}_i^r$ comprend une occurrence de i de moins que $\mathcal{F}^r$ et on prend des notations similaires pour $\mathcal{B}_k^r$, F_1^r et B_K^r .

I.2.4 Equations de Boltzmann

La famille $f = (f_i)_{i \in S}$ des fonctions de répartition des espèces est solution de l'équation de Boltzmann généralisée suivante

$$\mathcal{D}_i(f_i) = \mathcal{S}_i(f) + \mathcal{C}_i(f), \quad i \in S, \quad (\text{I.2})$$

où $\mathcal{D}_i(f_i)$ est l'opérateur différentiel usuel, $\mathcal{S}_i(f)$ le terme source non réactif et $\mathcal{C}_i(f)$ le terme source réactif. L'opérateur différentiel $\mathcal{D}_i(f_i)$ peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{D}_i(f_i) = \partial_t f_i + \mathbf{c}_i \cdot \partial_{\mathbf{x}} f_i + \mathbf{b}_i \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} f_i, \quad (\text{I.3})$$

où $\mathbf{b}_i$ est la force qui s'exerce sur la i^e espèce. Dans ce modèle, on suppose que

$$\mathbf{b}_i = \mathbf{g} + z_i(\mathbf{E} + \mathbf{c}_i \wedge \mathbf{B}), \quad (\text{I.4})$$

où $\mathbf{g}$ est une force extérieure indépendante de l'espèce, $\mathbf{E}$ le champ électrique et $\mathbf{B}$ le champ magnétique. On définit également B comme la norme du vecteur $\mathbf{B}$.

L'expression du terme source non réactif est la suivante

$$\mathcal{S}(f) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{i' \in \Omega_i \\ j, j' \in \Omega_j}} \int \left(f'_i f'_j \frac{\alpha_{i1} \alpha_{j1}}{\alpha_{i1'} \alpha_{j1'}} - f_i f_j \right) W_{ij}^{i1'j1} d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}'_i d\mathbf{c}'_j, \quad (\text{I.5})$$

où α_{i1} est la dégénérescence du 1^e état quantique de la i^{e} espèce et $W_{ij}^{i1'j1}$ les probabilités de transition pour les collisions non réactives. On utilise ici la notation usuelle qui consiste à ajouter un prime à une fonction, par exemple f'_i , pour signifier que l'on prend la valeur de la fonction après la collision : $f'_i = f_i(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}'_i, i')$ où $\mathbf{c}'_i$ et i' sont la vitesse et l'indice de l'état quantique après collision. Le choix de travailler avec les probabilités de transition plutôt qu'avec les paramètres d'impact est justifié par le fait que les termes de collisions réactives sont alors plus simples à écrire [ACG94, Gio99, LH60]. Les probabilités de transition $W_{ij}^{i1'j1}$ vérifient les relations de réciprocité suivantes [Wal58]

$$\alpha_{i1} \alpha_{j1} W_{ij}^{i1'j1} = \alpha_{i1'} \alpha_{j1'} W_{ij}^{i1j1'}. \quad (\text{I.6})$$

On écrit le terme source réactif sous la forme

$$\mathcal{C}_i(f) = \sum_{r \in \mathfrak{R}} \mathcal{C}_i^r(f), \quad (\text{I.7})$$

où $\mathcal{C}_i^r(f)$ est le terme source de la i^{e} espèce dû à la r^{e} réaction dont l'expression est

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_i^r(f) = & \nu_{ir}^f \sum_{F_i^r, B_i^r} \int \left(\prod_{k \in \mathcal{B}^r} f_k \frac{\prod_{k \in \mathcal{B}^r} \beta_{kK}}{\prod_{j \in \mathcal{F}^r} \beta_{jJ}} - \prod_{j \in \mathcal{F}^r} f_j \right) \mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{F_i^r B_i^r} \prod_{j \in \mathcal{F}_i^r} d\mathbf{c}_j \prod_{k \in \mathcal{B}^r} d\mathbf{c}_k \\ & - \nu_{ir}^b \sum_{F_i^r, B_i^r} \int \left(\prod_{k \in \mathcal{B}^r} f_k \frac{\prod_{k \in \mathcal{B}^r} \beta_{kK}}{\prod_{j \in \mathcal{F}^r} \beta_{jJ}} - \prod_{j \in \mathcal{F}^r} f_j \right) \mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{F_i^r B_i^r} \prod_{j \in \mathcal{F}^r} d\mathbf{c}_j \prod_{k \in \mathcal{B}_i^r} d\mathbf{c}_k, \quad (\text{I.8}) \end{aligned}$$

où $\beta_{i1} = h_P^3 / (\alpha_{i1} m_i^3)$ et h_P est la constante de Planck. Les quantités $\mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{F_i^r B_i^r}$ sont les probabilités de transition des collisions réactives pour lesquelles les réactifs $\mathcal{F}^r$ dans les états énergétiques F^r sont transformés en les produits $\mathcal{B}^r$ dans les états énergétiques B^r . La somme sur B^r dans (I.8) représente la somme sur les états quantiques $K \in \Omega_k$, pour tout $k \in \mathcal{B}^r$, des notations similaires étant utilisées pour les

sommes sur B_K^r , F^r et F_I^r . Finalement, les probabilités de transition réactive vérifient les relations de réciprocité suivantes [LH60, ACG94, EG98]

$$\mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{F^r B^r} \prod_{k \in \mathcal{B}^r} \prod_{K \in \mathcal{Q}_k} \beta_{kK} = \mathcal{W}_{\mathcal{B}^r \mathcal{F}^r}^{B^r F^r} \prod_{j \in \mathcal{F}^r} \prod_{J \in \mathcal{Q}_j} \beta_{jJ}. \quad (\text{I.9})$$

I.3 Entropie cinétique

Dans cette section, on détermine l'équation de conservation de l'entropie cinétique et on calcule son terme de production. On montre alors que le terme source non réactif $\mathcal{S}_i(f)$, donné en (I.5), et le terme source réactif $\mathcal{C}_i(f)$, donné en (I.7), sont tous les deux compatibles avec le théorème H [EG98]. C'est-à-dire que la production d'entropie cinétique associée est positive.

I.3.1 Définition

On définit l'entropie cinétique par unité de volume par

$$\mathcal{S}^{\text{kin}} = -k_B \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \mathcal{Q}_i}} \int f_i [\log(\beta_{iI} f_i) - 1] d\mathbf{c}_i, \quad (\text{I.10})$$

où k_B est la constante de Boltzmann. Pour la justification de cette définition, voir la section 4.2 de [FK72].

I.3.2 Equation de conservation de l'entropie cinétique

En multipliant l'équation de Boltzmann (I.2) par $\log(\beta_{iI} f_i)$, on obtient, après intégration sur $\mathbf{c}_i$ et sommation sur $i \in S$ et $I \in \mathcal{Q}_i$,

$$\sum_{\substack{i \in S \\ I \in \mathcal{Q}_i}} \int (\mathcal{D}_i(f_i) - \mathcal{S}_i(f) - \mathcal{C}_i(f)) \log(\beta_{iI} f_i) d\mathbf{c}_i = 0.$$

En remplaçant $\mathcal{Q}_i(f_i)$ par sa valeur donnée en (I.3) et en utilisant les relations suivantes

$$\begin{aligned}\partial_t [f_i (\log(\beta_{il} f_i) - 1)] &= (\partial_t f_i) \log(\beta_{il} f_i), \\ \partial_{\mathbf{x}} \cdot [f_i (\log(\beta_{il} f_i) - 1) \mathbf{c}_i] &= (\mathbf{c}_i \cdot \partial_{\mathbf{x}} f_i) \log(\beta_{il} f_i), \\ \mathbf{b}_i \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} f_i &= \partial_{\mathbf{c}_i} \cdot (\mathbf{b}_i f_i),\end{aligned}$$

la dernière relation étant due à la forme particulière de $\mathbf{b}_i$, on obtient l'équation de conservation de l'entropie cinétique

$$\partial_t \mathcal{S}^{\text{kin}} + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{S}^{\text{kin}} \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathcal{J}^{\text{kin}} = \mathbf{v}^{\text{kin}}, \quad (\text{I.11a})$$

où $\mathcal{J}^{\text{kin}}$ est le flux diffusif d'entropie cinétique défini par

$$\mathcal{J}^{\text{kin}} = -k_B \sum_{\substack{i \in S \\ l \in \Omega_i}} \int f_i (\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) [\log(\beta_{il} f_i) - 1] d\mathbf{c}_i \quad (\text{I.11b})$$

et $\mathbf{v}^{\text{kin}}$ le terme source d'entropie cinétique. On décompose ce dernier en deux termes sources, l'un correspondant à la contribution non réactive $\mathbf{v}^{\mathcal{J}}$ et l'autre à la contribution réactive $\mathbf{v}^{\mathcal{C}}$. On écrit donc

$$\mathbf{v}^{\text{kin}} = \mathbf{v}^{\mathcal{J}} + \mathbf{v}^{\mathcal{C}}, \quad (\text{I.11c})$$

avec

$$\mathbf{v}^{\mathcal{J}} = -k_B \sum_{\substack{i \in S \\ l \in \Omega_i}} \int \mathcal{J}_i(f) \log(\beta_{il} f_i) d\mathbf{c}_i \quad (\text{I.11d})$$

et

$$\mathbf{v}^{\mathcal{C}} = -k_B \sum_{\substack{i \in S \\ l \in \Omega_i}} \int \mathcal{C}_i(f) \log(\beta_{il} f_i) d\mathbf{c}_i. \quad (\text{I.11e})$$

I.3.3 Positivité de la production d'entropie cinétique

On montre à présent que la production d'entropie cinétique, notée $\mathbf{v}^{\text{kin}}$, est positive. Pour cela, on utilise les relations de réciprocité (I.6) et (I.9) des probabilités de

transition et on met les termes de production d'entropie cinétique $\mathbf{v}^{\mathcal{S}}$ et $\mathbf{v}^{\mathcal{C}}$ sous la forme symétrisée

$$\mathbf{v}^{\mathcal{S}} = \frac{k_B}{4} \sum_{i,j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{I,I' \in \mathfrak{Q}_i \\ J,J' \in \mathfrak{Q}_j}} \int \mathfrak{P}\left(\frac{f'_i f'_j}{\alpha_{iI'} \alpha_{jJ'}}, \frac{f_i f_j}{\alpha_{iI} \alpha_{jJ}}\right) w_{ij}^{I,I',J,J'} \alpha_{iI} \alpha_{jJ} d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}'_i d\mathbf{c}'_j,$$

$$\mathbf{v}^{\mathcal{C}} = \frac{k_B}{4} \sum_{\substack{r \in \mathfrak{R} \\ r^r, \mathbf{B}^r}} \int \mathfrak{P}\left(\prod_{k \in \mathcal{B}^r} \beta_{kK} f_k, \prod_{j \in \mathcal{F}^r} \beta_{jJ} f_j\right) \frac{\mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{\mathbf{F}^r \mathbf{B}^r}}{\prod_{j \in \mathcal{F}^r} \beta_{jJ}} \prod_{j \in \mathcal{F}^r} d\mathbf{c}_j \prod_{k \in \mathcal{B}^r} d\mathbf{c}_k,$$

où $\mathfrak{P}(x, y) = (x - y) \log(x/y)$ est une fonction positive. On obtient donc que la production d'entropie est positive, c'est-à-dire $\mathbf{v}^{\text{kin}} \geq 0$. Notons que toutes les collisions, réactives et non réactives, ont une contribution positive pour la production d'entropie cinétique. L'équation de Boltzmann généralisée est donc compatible avec le théorème H ou second principe de la thermodynamique.

L'importance de la positivité de la production d'entropie cinétique apparaîtra dans la suite de ce chapitre, par exemple pour déterminer l'expression (I.21) de la solution à l'ordre zéro, mais également pour étudier les équations qui régissent les fonctions ϕ_i dans l'étude à l'ordre un. De plus, elle exprime l'irréversibilité des collisions. Cette irréversibilité ne provient pas de chaque collision prise séparément puisque les collisions sont microscopiquement réversibles mais d'un effet statistique global. En effet, dans le cadre cinétique, les particules sont supposées non corrélées avant le choc et corrélées après. L'hypothèse du chaos combiné aux lois de réciprocité impliquent le second principe de la thermodynamique. Le lecteur pourra trouver plus de détail dans [CC70] au chapitre 4.

I.4 Développement de Enskog

I.4.1 Présentation de la méthode

Le développement de Enskog est une méthode asymptotique qui permet de déterminer une solution approchée de l'équation de Boltzmann (I.2) ainsi que les équations macroscopiques associées. Pour cela, on supposera que les temps caractéristiques des réactions chimiques sont plus grands que les temps de relaxation de l'énergie interne et que les temps de libre parcours moyen des particules.

De plus, on distingue deux modèles, suivant l'intensité du champ magnétique. On trouvera des justifications physiques de cette distinction dans les articles de S.I. Bra-

ginskii, [Bra65, Bra58]. Lorsque le champ magnétique est intense, on doit supposer que le terme $\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}$ est petit devant le terme $(\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) \wedge \mathbf{B}$, et cela engendre une anisotropie du milieu. Dans le cas où l'intensité du champ magnétique est faible, on ne distingue pas ces deux termes.

I.4.2 Invariants de l'opérateur de collisions non réactives

Les invariants de collision scalaires jouent un rôle primordial dans la recherche de la solution des équations de Boltzmann. On verra qu'ils permettent de calculer effectivement la solution f_i^0 en utilisant la positivité de l'entropie cinétique.

Comme son nom l'indique, un invariant de collision $\mathbf{u}$ est une famille de fonctions notée $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_i)_{i \in S}$ où $\mathbf{u}_i$, $i \in S$, est une fonction des variables t , $\mathbf{x}$, $\mathbf{c}_i$ et $\mathbf{I}$, qui est invariante lors d'une collision non réactive. Plus précisément, si i et j sont deux indices d'espèces, on a

$$\mathbf{u}_i + \mathbf{u}_j = \mathbf{u}'_i + \mathbf{u}'_j,$$

pour toute collision non réactive entre deux particules de type i et j . On dira qu'un invariant de collision est scalaire lorsque les fonctions $\mathbf{u}_i$ sont scalaires.

Les invariants de collision scalaires ψ^l pour $l \in \{1, \dots, n^s + 4\}$ sont donnés par

$$\begin{cases} \psi^k &= (\delta_{ki})_{i \in S}, & k \in S, \\ \psi^{n^s + \nu} &= (\mathbf{m}_i c_{i\nu})_{i \in S}, & \nu \in \{1, 2, 3\}, \\ \psi^{n^s + 4} &= \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{iI}\right)_{i \in S}, \end{cases} \quad (\text{I.12})$$

où $c_{i\nu}$ est la $\nu^{\text{ième}}$ composante du vecteur $\mathbf{c}_i$ et δ_{ki} est le symbole de Kronecker associé à k et i . Ces invariants engendrent l'espace vectoriel des invariants de collision scalaires.

Pour $k \in S$, dire que ψ^k est un invariant de collision signifie que lors d'une collision non réactive, les espèces chimiques ne changent pas; pour $\nu \in \{1, 2, 3\}$, dire que $\psi^{n^s + \nu}$ est un invariant de collision signifie que la quantité de mouvement se conserve dans chaque direction; enfin, dire que $\psi^{n^s + 4}$ est un invariant de collision signifie que, lors d'une collision non réactive, l'énergie totale se conserve.

Il est à noter que dans le cas d'un mélange micropolaire apparaît un autre invariant de collision vectoriel, linéairement indépendant, qui traduit la conservation du moment angulaire. Mais sa contribution étant nulle dans le cas d'un mélange non

micropolaire, on n'en parlera pas. On pourra trouver des précisions quant à son influence par exemple dans les articles [KA61, VMS78, CS79].

Pour deux familles $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$ et $\zeta = (\zeta_i)_{i \in S}$, on introduit le produit scalaire $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle$

$$\langle\langle \xi, \zeta \rangle\rangle = \sum_{\substack{i \in S \\ \mathbf{l} \in \Omega_i}} \int \xi_i \odot \bar{\zeta}_i d\mathbf{c}_i, \quad (\text{I.13})$$

où $\xi_i \odot \bar{\zeta}_i$ désigne la contraction maximale entre le tenseur ξ_i et le complexe conjugué du tenseur ζ_i . Le tableau TAB. I.1 indique le résultat de l'action de $\odot$ suivant les types de fonctions auxquelles elle s'applique.

ξ_i fonction \ ζ_i fonction	scalaire	vectorielle	matricielle
scalaire	scalaire	vecteur colonne	matrice
vectorielle	vecteur ligne	scalaire	vecteur ligne
matricielle	matrice	vecteur colonne	scalaire

TAB. I.1 – résultat de l'action de $\odot$.

On a introduit ce produit scalaire pour des vecteurs ou des tenseurs à valeurs complexes car on verra que de telles quantités apparaissent naturellement dans la solution de l'équation de Boltzmann linéarisée en présence d'un champ magnétique. Les propriétés macroscopiques s'écrivent alors sous la forme

$$\langle\langle f, \psi^l \rangle\rangle = \begin{cases} \mathbf{n}_l, & l \in S, \\ \rho v_\nu, & l = n^s + \nu, \nu \in \{1, 2, 3\}, \\ \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E}, & l = n^s + 4. \end{cases} \quad (\text{I.14})$$

On introduit également les familles suivantes, $\mathcal{D}(\xi) = (\mathcal{D}_i(\xi_i))_{i \in S}$, $\mathcal{S}(\xi) = (\mathcal{S}_i(\xi))_{i \in S}$ et $\mathcal{C}(\xi) = (\mathcal{C}_i(\xi))_{i \in S}$, où $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$ est une famille de fonctions dépendant de $(\mathbf{c}_i, \mathbf{l})$.

I.4.3 Développement de Enskog

L'équation de Boltzmann est réécrite sous la forme

$$\mathcal{D}_i(f_i) = \frac{1}{\epsilon} \mathcal{S}_i(f) + \epsilon^a \mathcal{C}_i(f), \quad i \in S, \quad (\text{I.15a})$$

où ϵ est le paramètre formel associé à la méthode de Enskog et a dépend du régime considéré. L'opérateur différentiel $\mathcal{D}_i(f_i)$ est également décomposé en deux opérateurs

$$\mathcal{D}_i(f_i) = \tilde{\mathcal{D}}_i(f_i) + \frac{1}{\epsilon^b} \hat{\mathcal{D}}_i(f_i) \quad (\text{I.15b})$$

avec

$$\tilde{\mathcal{D}}_i(f_i) = \partial_i f_i + \mathbf{c}_i \cdot \partial_{\mathbf{x}} f_i + \tilde{\mathbf{b}}_i \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} f_i, \quad (\text{I.15c})$$

$$\hat{\mathcal{D}}_i(f_i) = (\mathbf{b}_i - \tilde{\mathbf{b}}_i) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} f_i, \quad (\text{I.15d})$$

$$\tilde{\mathbf{b}}_i = \mathbf{g} + z_i(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}). \quad (\text{I.15e})$$

Le paramètre b vaut 0 ou 1 suivant le modèle considéré : $b = 1$ si le champ magnétique est intense et $b = 0$ sinon. Le paramètre ϵ étant considéré comme petit devant 1, il permet exactement d'ordonner les termes par ordre de grandeur : le terme non réactif $\mathcal{S}_i(f)$ est plus grand que le terme réactif $\mathcal{C}_i(f)$, tandis que le terme $\tilde{\mathcal{D}}_i(f_i)$ est plus petit que le terme $\hat{\mathcal{D}}_i(f_i)$. Dans ce chapitre, on considère à la fois le régime champ magnétique intense, $b = 1$, et le régime champ magnétique faible, $b = 0$. Les différents régimes associés au paramètre a sont étudiés, en particulier, dans [EG98, Gio99] et on ne considère que les régimes $a = 1$ et $a = 0$, le régime d'équilibre chimique cinétique, $a = -1$, sortant du cadre de cette thèse. On introduit également les familles $\tilde{\mathcal{D}}(\xi) = (\tilde{\mathcal{D}}_i(\xi_i))_{i \in S}$ et $\hat{\mathcal{D}}(\xi) = (\hat{\mathcal{D}}_i(\xi_i))_{i \in S}$, où $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$ est une famille de fonctions dépendant de $(\mathbf{c}_i, \mathbf{i})$.

Dans le cadre de la méthode d'Enskog, les fonctions de répartition des espèces f_i , $i \in S$, se développent selon le paramètre ϵ sous la forme

$$f_i = f_i^0 (1 + \epsilon \phi_i + \mathcal{O}(\epsilon^2)), \quad i \in S, \quad (\text{I.16})$$

où les fonctions d'ordre zéro f_i^0 ont les mêmes moyennes macroscopiques que les fonctions f_i , ce qui s'écrit

$$\langle\langle f^0, \psi^l \rangle\rangle = \langle\langle f, \psi^l \rangle\rangle, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.17})$$

En utilisant l'expression (I.5) et les relations de réciprocité des probabilités de transition (I.6), on obtient, pour $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$ fonction de $\mathbf{c}_i$, la relation

$$4\langle\langle \xi, \mathcal{S}(f) \rangle\rangle = \sum_{i,j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{i}, \mathbf{i}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int (\xi_i + \xi_j - \xi'_i - \xi'_j) \left[f'_i f'_j \frac{\alpha_{i\mathbf{i}} \alpha_{j\mathbf{j}}}{\alpha_{i\mathbf{i}'} \alpha_{j\mathbf{j}'}} - f_i f_j \right] \mathbf{w}_{ij}^{\text{LH} \mathbf{i}' \mathbf{j}'} d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}'_i d\mathbf{c}'_j,$$

en notant $\xi'_i = \xi_i(\mathbf{c}'_i, \mathbf{l})$. Ainsi, si ξ est un invariant de collision, le terme $\xi_i + \xi_j - \xi'_i - \xi'_j$ s'annule et on obtient alors

$$\langle\langle \psi^l, \mathcal{S}(f) \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.18})$$

En substituant l'expression de $\mathcal{D}_i(f_i)$ fournie par (I.15b) dans l'équation (I.15a), on obtient

$$\langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f) \rangle\rangle + \frac{1}{\epsilon^b} \langle\langle \psi^l, \hat{\mathcal{D}}(f) \rangle\rangle = \epsilon^a \langle\langle \psi^l, \mathcal{C}(f) \rangle\rangle, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.19})$$

L'importance de cette formule réside dans le fait qu'elle contient les équations de conservation macroscopiques d'ordre zéro et d'ordre un.

Dans les sections suivantes, on explicite l'équation vérifiée par f_i^0 , on écrit les équations d'ordre zéro, puis, en utilisant l'expression de f_i^0 , on détermine ϕ_i et on écrit les équations d'ordre un.

I.5 Approximation d'ordre zéro

Dans cette section, on détermine l'expression de f_i^0 , $i \in S$, et on présente les équations macroscopiques pour les mélanges de gaz polyatomiques qui résultent de l'approximation d'Euler d'ordre zéro pour les deux régimes $b = 0$ et $b = 1$.

I.5.1 Fonctions de répartition Maxwelliennes généralisées

En ne gardant que le terme en $1/\epsilon$ dans l'équation (I.15a) où l'on a substitué le développement de f_i donné par (I.16), on obtient l'équation vérifiée par la famille des fonctions de répartition d'ordre zéro, $f^0 = (f_i^0)_{i \in S}$,

$$\mathcal{S}_i(f^0) = \delta_{1b} \hat{\mathcal{D}}_i(f_i^0), \quad i \in S. \quad (\text{I.20})$$

En multipliant l'équation (I.20) par $\log(\beta_{ii} f_i^0)$, puis en sommant sur $\mathbf{c}_i$, $i \in \Omega_i$ et enfin sur $i \in S$, on obtient

$$\sum_{\substack{i \in S \\ \mathbf{l} \in \Omega_i}} \int \log(\beta_{ii} f_i^0) \mathcal{S}_i(f^0) d\mathbf{c}_i = \delta_{1b} \sum_{\substack{i \in S \\ \mathbf{l} \in \Omega_i}} \int \log(\beta_{ii} f_i^0) \hat{\mathcal{D}}_i(f_i^0) d\mathbf{c}_i.$$

En utilisant la relation (I.15d) exprimant $\widehat{\mathcal{Q}}_i(f_i^0)$, le second membre se met sous la forme

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int \log(\beta_{il} f_i^0) \widehat{\mathcal{Q}}_i(f_i^0) d\mathbf{c}_i &= \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int \log(\beta_{il} f_i^0) z_i [(\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) \wedge \mathbf{B}] \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} f_i^0 d\mathbf{c}_i \\ &= \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} z_i \int [(\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) \wedge \mathbf{B}] \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} [f_i^0 (\log(\beta_{il} f_i^0) - 1)] d\mathbf{c}_i. \end{aligned}$$

Comme la fonction de répartition f_i^0 tend vers zéro lorsque la norme de la vitesse $\mathbf{c}_i$ tend vers l'infini, l'intégration par parties

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} z_i \int [(\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) \wedge \mathbf{B}] \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} [f_i^0 (\log(\beta_{il} f_i^0) - 1)] d\mathbf{c}_i &= \\ &= \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} z_i \int \partial_{\mathbf{c}_i} \cdot [(\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) \wedge \mathbf{B}] f_i^0 (\log(\beta_{il} f_i^0) - 1) d\mathbf{c}_i, \end{aligned}$$

permet alors de conclure à la nullité de ce terme car $\partial_{\mathbf{c}_i} \cdot ((\mathbf{c}_i - \mathbf{v}) \wedge \mathbf{B}) = 0$. On obtient donc

$$\sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int \log(\beta_{il} f_i^0) \mathcal{S}_i(f^0) d\mathbf{c}_i = 0,$$

et on est alors ramené au calcul standard de solution Maxwellienne de l'équation de Boltzmann qui est traité par exemple dans [FK72, Gio99]. Si on introduit la production d'entropie cinétique non réactive d'ordre -1,

$$\mathbf{v}^{(-1)\mathcal{S}} = -k_B \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int \mathcal{S}_i(f^0) \log(\beta_{il} f_i^0) d\mathbf{c}_i,$$

on obtient donc $\mathbf{v}^{(-1)\mathcal{S}} = 0$. Le même calcul que pour la positivité de $\mathbf{v}^{\mathcal{S}}$ à la sous-section I.3.3 permet de montrer que cela n'est possible que si $(\log(\beta_{il} f_i^0))_{i \in S}$ est un invariant de collision. Donc d'après l'étude des invariants de collision scalaires, on obtient l'existence de $(\alpha_i)_{i \in S}$, de $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$ et de $\gamma \in \mathbb{R}$ tels que

$$\log(\beta_{il} f_i^0) = \alpha_i - \mathbf{w} \cdot \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i - \gamma \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{il} \right), \quad i \in S.$$

On utilise alors les contraintes macroscopiques (I.17) sur les fonctions f_i^0 , $i \in S$, pour déterminer ces coefficients. On obtient que l'énergie $\mathcal{E}$ est une fonction croissante de

$1/\gamma$ et on définit la température cinétique T par $T = 1/(k_B\gamma)$. Il est alors possible de déterminer les coefficients $(\alpha_i)_{i \in S}$, $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$ et $\gamma \in \mathbb{R}$. On parvient à l'expression suivante de f_i^0

$$f_i^0 = \mathbf{n}_i \left(\frac{\mathbf{m}_i}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \frac{\frac{1}{\beta_{i1}} \exp \left(-\frac{\mathbf{m}_i}{2k_B T} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - \frac{\mathcal{E}_{i1}}{k_B T} \right)}{\sum_{i \in \Omega_i} \frac{1}{\beta_{i1}} \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_{i1}}{k_B T} \right)}, \quad i \in S, \quad (\text{I.21})$$

où $\mathbf{C}_i = \mathbf{c}_i - \mathbf{v}$ est la vitesse relative de l'espèce i . La fonction de répartition à l'ordre zéro apparaît donc comme une distribution Maxwellienne.

Il est possible d'identifier la température cinétique qui vient d'être définie avec la température thermodynamique du système. Pour plus de détails, on renvoie par exemple le lecteur à l'ouvrage [CC70].

On donne deux autres formulations équivalentes à l'expression (I.21) de la fonction de répartition à l'ordre zéro en introduisant la fonction de partition de l'énergie interne de l'espèce i Q_i^{int} ,

$$Q_i^{\text{int}} = \sum_{i \in \Omega_i} \alpha_{i1} \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_{i1}}{k_B T} \right), \quad i \in S,$$

la fonction de partition de l'énergie de translation de l'espèce i par unité de volume Q_i^{tr} ,

$$Q_i^{\text{tr}} = \left(\frac{2\pi \mathbf{m}_i k_B T}{h_p^2} \right)^{3/2}, \quad i \in S,$$

ainsi que la fonction de partition de l'énergie totale de l'espèce i par unité de volume Q_i ,

$$Q_i = Q_i^{\text{int}} Q_i^{\text{tr}}, \quad i \in S.$$

On a alors

$$f_i^0 = \frac{\mathbf{n}_i}{\beta_{i1} Q_i} \exp \left(-\frac{\mathbf{m}_i}{2k_B T} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - \frac{\mathcal{E}_{i1}}{k_B T} \right), \quad i \in S,$$

ou encore

$$f_i^0 = \frac{\alpha_{i1} \mathbf{n}_i}{Q_i^{\text{int}}} \left(\frac{\mathbf{m}_i}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{\mathbf{m}_i}{2k_B T} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - \frac{\mathcal{E}_{i1}}{k_B T} \right), \quad i \in S.$$

I.5.2 Equations macroscopiques d'ordre zéro

Les équations de conservation macroscopiques sont obtenues en prenant le produit scalaire de l'équation de Boltzmann par les invariants de collision,

$$\langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f) \rangle\rangle + \frac{1}{\epsilon^b} \langle\langle \psi^l, \hat{\mathcal{D}}(f) \rangle\rangle = \epsilon^a \langle\langle \psi^l, \mathcal{C}(f) \rangle\rangle, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}.$$

En y substituant le développement (I.16) de f_i et en ne gardant que les termes d'ordre zéro, on obtient

$$\langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f^0) + \delta_{0b} \hat{\mathcal{D}}(f^0) + \delta_{1b} \hat{\mathcal{D}}(f^0 \phi) \rangle\rangle = \delta_{a0} \langle\langle \psi^l, \mathcal{C}(f^0) \rangle\rangle, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}.$$

Or, d'après l'expression (I.21) de f_i^0 , $\hat{\mathcal{D}}(f_i^0) = 0$, car le vecteur $\partial_{\mathbf{c}_i} f_i^0$ est colinéaire au vecteur $\mathbf{C}_i$. L'équation précédente devient donc

$$\langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f^0) \rangle\rangle + \delta_{1b} \langle\langle \psi^l, \hat{\mathcal{D}}(f^0 \phi) \rangle\rangle = \delta_{a0} \langle\langle \psi^l, \mathcal{C}(f^0) \rangle\rangle, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}.$$

En explicitant cette dernière relation, on déduit les équations macroscopiques d'ordre zéro. Les équations de conservation de la masse des espèces sont obtenues pour $l = 1, \dots, n^s$ et s'écrivent

$$\partial_t \rho_i + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_i \mathbf{v}) = \delta_{a0} \mathbf{m}_i \bar{\omega}_i^0, \quad i \in S, \quad (\text{I.22a})$$

où $\bar{\omega}_i^0$ est le terme source chimique d'ordre zéro défini par

$$\bar{\omega}_i^0 = \langle\langle \psi^i, \mathcal{C}(f^0) \rangle\rangle = \sum_{i \in \Omega_i} \int \mathcal{C}_i(f^0) d\mathbf{c}_i. \quad (\text{I.22b})$$

On obtient ensuite l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour $l = n^s + 1, \dots, n^s + 3$,

$$\partial_t (\rho \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbb{I}) = \rho \mathbf{g} + q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}) + \delta_{1b} \mathbf{j} \wedge \mathbf{B}, \quad (\text{I.22c})$$

où $\mathbb{I}$ est la matrice identité de taille 3 et $p = n k_B T$ la pression thermodynamique. La densité de courant $\mathbf{j}$ dépend des fonctions de répartition des espèces d'ordre un,

$$\mathbf{j} = \sum_{\substack{i \in S \\ i \in \Omega_i}} \int f_i^0 \phi_i z_i \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i d\mathbf{c}_i.$$

Il y a donc un couplage entre les équations d'ordre zéro et celles d'ordre un, lorsque $b = 1$. La dernière équation est l'équation de conservation de l'énergie, obtenue pour $l = n^s + 4$,

$$\partial_t \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E} \right) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E} + p \right) \mathbf{v} \right] = (\rho \mathbf{g} + q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})) \cdot \mathbf{v} + \delta_{1b} (\mathbf{j} \wedge \mathbf{B}) \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{I.22d})$$

Les équations macroscopiques d'ordre zéro apparaissent ainsi comme les équations d'Euler réactives compressibles pour les gaz polyatomiques avec de nouveaux termes exprimant les effets de la force de Lorentz sur l'ensemble du gaz. Pour le régime $b = 1$, ces équations forment, avec celles de Maxwell, les équations de la magnétohydrodynamique, à condition que la densité de courant de conduction, $\mathbf{j}$, s'exprime en fonction des variables naturelles. Bien que les équations moléculaires d'ordre zéro puissent être résolues en f^0 et donner les distributions Maxwelliennes, les équations macroscopiques d'ordre zéro contiennent des termes impliquant les perturbations d'ordre un, ϕ , lorsque $b = 1$. L'origine de la difficulté est que le terme $\widehat{\mathcal{D}}(f^0\phi)$ n'est pas orthogonal aux invariants de collision pour le produit scalaire $\langle\langle f^0, \cdot \rangle\rangle$. En magnétohydrodynamique, la densité de courant de conduction s'exprime habituellement grâce à la loi d'Ohm, $\mathbf{j} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})$, où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des conductivités électriques. On verra dans les sections suivantes qu'à l'ordre un, la théorie cinétique fournit des expressions plus complexes pour la densité de courant $\mathbf{j}$.

I.5.3 Terme source chimique d'ordre zéro

On étudie à présent le terme source chimique d'ordre zéro, $\overline{\omega}_i^0$ défini en (I.22b) par

$$\overline{\omega}_i^0 = \langle\langle \psi^i, \mathcal{C}(f^0) \rangle\rangle = \sum_{i \in \Omega_i} \int \mathcal{C}_i(f^0) d\mathbf{c}_i.$$

I.5.3.1 Expression du terme source chimique d'ordre zéro

En utilisant l'expression (I.21) de f_i^0 pour calculer le terme $\mathcal{C}_i^r(f^0)$, on peut écrire le terme source chimique d'ordre zéro sous la forme

$$\overline{\omega}_i^0 = \sum_{r \in \mathfrak{R}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \overline{\tau}_r, \quad (\text{I.23})$$

où $\overline{\tau}_r$ est défini par

$$\overline{\tau}_r = \mathcal{K}_r \left[\prod_{k \in S} \left(\frac{\mathbf{n}_k}{Q_k} \right)^{\nu_{kr}^f} - \prod_{k \in S} \left(\frac{\mathbf{n}_k}{Q_k} \right)^{\nu_{kr}^b} \right], \quad (\text{I.24})$$

avec

$$\mathcal{K}_r = \sum_{F^r, B^r} \int \mathfrak{D}_r \prod_{\mathcal{F}^r} d\mathbf{c}_j \prod_{\mathcal{B}^r} d\mathbf{c}_k,$$

et

$$\mathfrak{D}_r = \prod_{j \in \mathcal{F}^r} \exp \left[-\frac{\mathfrak{m}_j}{2k_B T} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j - \frac{\mathcal{E}_{jJ}}{k_B T} \right] \frac{\mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}}{\prod_{j \in \mathcal{F}^r} \beta_{jJ}}.$$

En utilisant la loi de réciprocité (I.9), on peut récrire $\mathfrak{D}_r$ sous la forme

$$\mathfrak{D}_r = \prod_{k \in \mathcal{B}^r} \exp \left[-\frac{\mathfrak{m}_k}{2k_B T} \mathbf{C}_k \cdot \mathbf{C}_k - \frac{\mathcal{E}_{kK}}{k_B T} \right] \frac{\mathcal{W}_{\mathcal{B}^r \mathcal{F}^r}^{\mathcal{B}^r \mathcal{F}^r}}{\prod_{k \in \mathcal{B}^r} \beta_{kK}}.$$

Il est intéressant d'introduire les nouveaux coefficients $\mathcal{K}_r^f$ et $\mathcal{K}_r^b$ définis par

$$\mathcal{K}_r^f = \mathcal{K}_r \prod_{k \in \mathcal{S}} Q_k^{-\nu_{kr}^f} \quad \text{et} \quad \mathcal{K}_r^b = \mathcal{K}_r \prod_{k \in \mathcal{S}} Q_k^{-\nu_{kr}^b},$$

car on peut mettre $\bar{\tau}_r$ sous la forme

$$\bar{\tau}_r = \mathcal{K}_r^f \prod_{k \in \mathcal{S}} \mathfrak{n}_k^{\nu_{kr}^f} - \mathcal{K}_r^b \prod_{k \in \mathcal{S}} \mathfrak{n}_k^{\nu_{kr}^b}. \quad (\text{I.25})$$

Ces taux de réaction sont compatibles avec la loi d'action de masse, toutes les réactions élémentaires sont réversibles et on a les relations $\mathcal{K}_r^f = \mathcal{K}_r^b \mathcal{K}_r^{\text{eq}}$, $r \in \mathfrak{R}$, où les constantes d'équilibre sont données par

$$\mathcal{K}_r^{\text{eq}} = \prod_{k \in \mathcal{S}} Q_k^{\nu_{kr}^b - \nu_{kr}^f}, \quad r \in \mathfrak{R}. \quad (\text{I.26})$$

On peut facilement adapter ces expressions des taux d'avancement chimique et des constantes d'équilibre à d'autres systèmes d'unité que les densités moléculaires.

I.5.3.2 Conservation des espèces, de la masse et de la charge

Les espèces du mélange sont constituées d'atomes et on note $\mathfrak{A} = \{1, \dots, n^a\}$ l'ensemble des indices de ces atomes, n^a le nombre d'atomes dans le mélange, $\tilde{\mathfrak{m}}_l$, $l \in \mathfrak{A}$, la masse atomique du l^{e} atome et $\mathfrak{a}_{kl}$ le nombre de l^{e} atomes dans la k^{e} espèce. On définit également la charge moléculaire $\mathfrak{a}_{k0} = \mathfrak{m}_k z_k$, $\tilde{\mathfrak{m}}_0$ la masse d'un électron et $\bar{\mathfrak{A}} = \{0\} \cup \mathfrak{A} = \{0, 1, \dots, n^a\}$.

On introduit à présent quelques notations vectorielles et matricielles qui permettront d'alléger les équations à venir. On introduit tout d'abord les vecteurs des coefficients stœchiométriques directs et inverses pour la r^{e} réaction, ν_r^f , ν_r^b , $r \in \mathfrak{R}$,

$$\nu_r^f = (\nu_{1r}^f, \dots, \nu_{n^a r}^f)^T, \quad \nu_r^b = (\nu_{1r}^b, \dots, \nu_{n^a r}^b)^T, \quad r \in \mathfrak{R},$$

et le vecteur des coefficients stœchiométriques pour la réaction $r \in \mathfrak{R}$,

$$\nu_r = (\nu_{1r}, \dots, \nu_{n^s r})^T, \quad r \in \mathfrak{R}.$$

On introduit ensuite les vecteurs des atomes $\mathbf{a}_l$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, définis par

$$\mathbf{a}_l = (\mathbf{a}_{1l}, \dots, \mathbf{a}_{n^s l})^T, \quad l \in \overline{\mathfrak{A}},$$

le vecteur des masses $\mathbf{m}$ et le vecteur des charges $\mathbf{z}$ définis par

$$\mathbf{m} = (\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_{n^s})^T \quad \text{et} \quad \mathbf{z} = (z_1, \dots, z_{n^s})^T,$$

$\mathbf{u}$ est le vecteur unitaire de taille n^s , et la matrice de masse $\mathfrak{M}$ définie par

$$\mathfrak{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{m}_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \mathbf{m}_{n^s} \end{pmatrix}.$$

Les masses moléculaires des espèces, $\mathbf{m}_i$, $i \in \mathbf{S}$, sont données par les relations suivantes

$$\mathbf{m}_i = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{\mathbf{m}}_l \mathbf{a}_{il} - \tilde{\mathbf{m}}_0 \mathbf{a}_{i0}, \quad i \in \mathbf{S},$$

ce qui peut se récrire vectoriellement sous la forme

$$\mathbf{m} = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{\mathbf{m}}_l \mathbf{a}_l - \tilde{\mathbf{m}}_0 \mathbf{a}_0.$$

On peut alors écrire les relations de conservation dans le mélange. Les vecteurs atomiques $\mathbf{a}_l$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, et les vecteurs des coefficients stœchiométriques ν_r , $r \in \mathfrak{R}$, satisfont les relations de conservation

$$\langle \nu_r, \mathbf{a}_l \rangle = 0, \quad r \in \mathfrak{R}, l \in \overline{\mathfrak{A}}, \quad (\text{I.27})$$

où $\langle ., . \rangle$ désigne le produit scalaire euclidien de $\mathbb{R}^{n^s}$. Ces relations expriment la conservation des atomes pour $l \in \mathfrak{A}$ et la conservation de la charge pour $l = 0$. On en déduit la relation de conservation de la masse des espèces lors de la réaction $r \in \mathfrak{R}$,

$$\langle \mathfrak{M} \nu_r, \mathbf{u} \rangle = \langle \nu_r, \mathbf{m} \rangle = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{\mathbf{m}}_l \langle \nu_r, \mathbf{a}_l \rangle - \langle \nu_r, \mathbf{a}_0 \rangle = 0, \quad r \in \mathfrak{R}, \quad (\text{I.28})$$

et celle de conservation de la charge des espèces lors de la réaction $r \in \mathfrak{R}$,

$$\langle \mathfrak{M} \nu_r, \mathbf{z} \rangle = \langle \nu_r, \mathbf{a}_0 \rangle = 0, \quad r \in \mathfrak{R}. \quad (\text{I.29})$$

Puis on en déduit, en utilisant l'expression (I.23) de $\overline{\omega}_i^0$, que

$$\sum_{i \in \mathbf{S}} \mathbf{m}_i \overline{\omega}_i^0 = \sum_{r \in \mathfrak{R}} \overline{\tau}_r \langle \nu_r, \mathbf{m} \rangle = 0. \quad (\text{I.30})$$

I.5.3.3 Formulation symétrique des taux de réaction

On présente maintenant une formulation symétrique des taux de réaction chimique $\bar{\tau}_r$. Pour cela, on doit introduire le potentiel chimique de l'espèce $i \in S$, noté $\bar{\mu}_i$ et le potentiel chimique unitaire de l'espèce $i \in S$, noté $\bar{\mu}_i^u$, qui sont définis par

$$\begin{aligned}\bar{\mu}_i^u &= -\frac{1}{\mathfrak{m}_i} \log Q_i, \\ \bar{\mu}_i &= \bar{\mu}_i^u + \frac{1}{\mathfrak{m}_i} \log \mathfrak{n}_i.\end{aligned}$$

En utilisant ces définitions, on en déduit une expression des constantes d'équilibre $\mathcal{K}_r^{\text{eq}}$, définie en (I.26), sous la forme

$$\mathcal{K}_r^{\text{eq}} = \prod_{i \in S} Q_i^{\nu_{ir}} = \exp \left(- \sum_{i \in S} \nu_{ir} \mathfrak{m}_i \bar{\mu}_i^u \right). \quad (\text{I.31})$$

Il faut noter que la loi de réciprocité de la réaction $r \in \mathfrak{R}$,

$$\mathcal{K}_r^{\text{eq}} = \frac{\mathcal{K}_r^{\text{f}}}{\mathcal{K}_r^{\text{b}}} \quad (\text{I.32})$$

est une conséquence des lois de réciprocité moléculaires des réactions (I.9).

En définissant le vecteur des potentiels chimiques $\bar{\mu}$ et le vecteur des potentiels chimiques unitaires $\bar{\mu}^u$ par

$$\bar{\mu} = (\bar{\mu}_1, \dots, \bar{\mu}_{n^s})^{\text{T}}, \quad \bar{\mu}^u = (\bar{\mu}_1^u, \dots, \bar{\mu}_{n^s}^u)^{\text{T}},$$

la loi de réciprocité (I.32) permet d'écrire

$$\log \mathcal{K}_r^{\text{f}} - \langle \mathfrak{M} \nu_r^{\text{f}}, \bar{\mu}^u \rangle = \log \mathcal{K}_r^{\text{b}} - \langle \mathfrak{M} \nu_r^{\text{b}}, \bar{\mu}^u \rangle.$$

On en déduit alors une nouvelle expression de la constante de réaction $\mathcal{K}_r$, $r \in \mathfrak{R}$,

$$\log \mathcal{K}_r = \log \mathcal{K}_r^{\text{f}} - \langle \mathfrak{M} \nu_r^{\text{f}}, \bar{\mu}^u \rangle = \log \mathcal{K}_r^{\text{b}} - \langle \mathfrak{M} \nu_r^{\text{b}}, \bar{\mu}^u \rangle,$$

ainsi que la formulation symétrique suivante des taux de réaction chimique $\bar{\tau}_r$, $r \in \mathfrak{R}$,

$$\bar{\tau}_r = \mathcal{K}_r \left(\exp \langle \mathfrak{M} \nu_r^{\text{f}}, \bar{\mu} \rangle - \exp \langle \mathfrak{M} \nu_r^{\text{b}}, \bar{\mu} \rangle \right). \quad (\text{I.33})$$

I.5.4 Equation de conservation de la température à l'ordre zéro

Au cours de l'étude à l'ordre un, on aura besoin de connaître l'équation qui régit la température. Celle-ci est obtenue en combinant les équations macroscopiques d'ordre zéro (I.22).

On commence par donner une expression de l'énergie interne $\mathcal{E}$. Celle-ci est obtenue en injectant la forme (I.21) de f_i^0 dans les expressions (I.1d) de la vitesse et (I.1e) de l'énergie interne macroscopique,

$$\mathcal{E} = \sum_{i \in S} \mathbf{n}_i \left(\frac{3}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_i \right), \quad (\text{I.34a})$$

où $\overline{\mathcal{E}}_i$ est l'énergie interne moyenne de la i^e espèce définie par

$$\overline{\mathcal{E}}_i = \frac{1}{Q_i^{\text{int}}} \sum_{l \in \Omega_i} \alpha_{il} \mathcal{E}_{il} \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_{il}}{k_B T} \right). \quad (\text{I.34b})$$

On introduit à présent différentes chaleurs spécifiques correspondant aux différentes contributions de l'énergie totale. On définit la chaleur spécifique moléculaire interne de la i^e espèce $\mathbf{c}_i^{\text{int}}$ par $\mathbf{c}_i^{\text{int}} = d\overline{\mathcal{E}}_i/dT$. Un calcul immédiat fournit la relation

$$\mathbf{c}_i^{\text{int}} = \frac{1}{k_B T^2 Q_i^{\text{int}}} \sum_{l \in \Omega_i} \alpha_{il} (\mathcal{E}_{il} - \overline{\mathcal{E}}_i)^2 \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_{il}}{k_B T} \right), \quad i \in S. \quad (\text{I.35a})$$

La chaleur spécifique moléculaire interne du mélange $\mathbf{c}^{\text{int}}$ est donnée par

$$\mathbf{c}^{\text{int}} = \sum_{i \in S} \frac{\mathbf{n}_i}{\mathbf{n}} \mathbf{c}_i^{\text{int}}, \quad (\text{I.35b})$$

la chaleur spécifique moléculaire de translation à volume constant $\mathbf{c}_v^{\text{tr}}$ par

$$\mathbf{c}_v^{\text{tr}} = \frac{3}{2} k_B, \quad (\text{I.35c})$$

et la chaleur spécifique moléculaire à volume constant du mélange $\mathbf{c}_v$ par

$$\mathbf{c}_v = \mathbf{c}_v^{\text{tr}} + \mathbf{c}^{\text{int}}. \quad (\text{I.35d})$$

Après un peu d'algèbre, on obtient $\partial_T \mathcal{E} = \mathbf{n} \mathbf{c}_v$. En effectuant ensuite l'opération $\frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \sum_{i \in S} (\text{I.22a})_i - (\text{I.22c}) \cdot \mathbf{v} + (\text{I.22d})$, on obtient l'équation de conservation de la température T à l'ordre zéro

$$\mathbf{n} \mathbf{c}_v (\partial_t T + \mathbf{v} \cdot \partial_{\mathbf{x}} T) = -p \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} - \delta_{a0} \sum_{i \in S} \left(\frac{3}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_i \right) \overline{\omega}_i^0. \quad (\text{I.36})$$

I.6 Approximation d'ordre un dans le cas $b = 1$

Dans cette section, on détermine les équations qui régissent les fonctions ϕ_i , $i \in S$, puis les équations de conservation macroscopiques d'ordre un, les expressions des flux et des coefficients de transport, ainsi que les relations de thermochimie, dans le cas $b = 1$, c'est-à-dire lorsque le champ magnétique $\mathbf{B}$ est intense. On distingue le cas $b = 1$ du cas $b = 0$ (traité dans la section I.8) car la structure des flux et des coefficients de transport en dépend fortement. En effet, lorsque le champ magnétique est intense, les flux et les coefficients ne sont plus isotropes.

On commence par introduire l'opérateur de Boltzmann linéarisé et par déterminer ses principales propriétés. On écrit ensuite l'équation de Boltzmann linéarisée dont on recherche une solution. Puis on écrit les équations de bilan d'ordre un ainsi que des expressions des flux et des coefficients de transport. Enfin, on étudie l'entropie macroscopique d'ordre un.

I.6.1 Opérateur de Boltzmann linéarisé

On introduit l'opérateur de Boltzmann linéarisé $\mathcal{F}^{\mathcal{S}} = (\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}})_{i \in S}$ obtenu à partir de l'opérateur de collision rapide

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{i' \in \Omega_i \\ j, j' \in \Omega_j}} \int f_j^0(\phi_i + \phi_j - \phi_{i'} - \phi_{j'}) w_{ij}^{i'j'} d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}_{i'} d\mathbf{c}_{j'}, \quad i \in S. \quad (\text{I.37})$$

L'opérateur de Boltzmann linéarisé possède une propriété importante qui est appelée isotropie et dont l'étude est détaillée dans l'Annexe I.9 : $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ transforme toute famille de fonctions du type $(\mathbf{u}_i)_{i \in S}$ où $\mathbf{u}_i$ est une fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}_i)^2$ multipliée par un vecteur ou un tenseur construit à partir des vecteurs $\mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B}$ en une famille de fonctions du même type.

Pour expliciter cette propriété, on note $\mathbf{u}_i = u_i \mathbf{T}_i$ où u_i est une fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}_i)^2$ et $\mathbf{T}_i$ un tenseur d'ordre $\alpha \in \{0, 1, 2\}$, d'un espace vectoriel qu'on notera E^α . E^α est engendré par

- 1 si $\alpha = 0$,
- $\mathbf{C}_i$, $\mathbf{B}$ et $\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}$ si $\alpha = 1$ et
- $\mathbf{T}_i^{(1)}, \dots, \mathbf{T}_i^{(5)}$ si $\alpha = 2$, où l'on définit les tenseurs $\mathbf{T}_i^{(n)}$, $n \in \{1, \dots, 5\}$, par

$$\mathbf{T}_i^{(1)} = \mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbb{I},$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}_i^{(2)} &= \frac{1}{2} [\mathbf{C}_i \otimes (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) + (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes \mathbf{C}_i], \\
\mathbf{T}_i^{(3)} &= (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbb{I} + (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2 / \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}, \\
\mathbf{T}_i^{(4)} &= \frac{1}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} [\mathbf{C}_i \otimes \mathbf{B} + \mathbf{B} \otimes \mathbf{C}_i] - (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2 / \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}, \\
\mathbf{T}_i^{(5)} &= \frac{1}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} [\mathbf{B} \otimes (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) + (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes \mathbf{B}].
\end{aligned}$$

où l'on a utilisé la notation $\otimes$ pour désigner le produit tensoriel entre deux vecteurs et définit les vecteurs vitesses renormalisées $\mathbf{C}_i$, $i \in S$, par

$$\mathbf{C}_i = \sqrt{\frac{m_i}{2k_B T}} \mathbf{C}_i, \quad i \in S.$$

En notant $\mathbf{uT} = (\mathbf{u}_i \mathbf{T}_i)_{i \in S}$, l'isotropie de $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ se traduit par

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\mathbf{uT}) = \mathbf{v}_i \mathbf{T}_i, \quad i \in S,$$

où $\mathbf{v}_i$ est également une fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ et $(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}_i)^2$. Cette propriété aura un rôle très important dans le développement de la solution de l'équation de Boltzmann, notamment pour découpler certaines équations.

On introduit également l'opérateur crochet intégral associé à l'opérateur de Boltzmann linéarisé $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$

$$[\xi, \zeta] = \langle f^0 \xi, \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\zeta) \rangle, \quad (\text{I.38})$$

défini pour $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$ et $\zeta = (\zeta_i)_{i \in S}$ où ξ_i et ζ_i , $i \in S$, sont des fonctions de $\mathbf{c}_i$ et de $\mathbf{l}$. Le crochet intégral est un opérateur hermitien, semi-défini positif dont le noyau est exactement l'ensemble des invariants de collision. Ses propriétés peuvent être résumées ainsi :

- Pour tout $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$ et pour tout $\zeta = (\zeta_i)_{i \in S}$, $[\xi, \zeta] = \overline{[\zeta, \xi]}$, où $\overline{}$ signifie la prise du complexe conjugué.
- Pour tout $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$, $[\xi, \xi] \geq 0$.
- Soit $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$, telle que $[\xi, \xi] = 0$. Alors ξ est un invariant de collision (tensoriel), c'est à dire que ses composants sont des invariants de collision scalaires.

Pour montrer ces trois propriétés, il suffit d'écrire que

$$[\xi, \zeta] = \frac{1}{4} \sum_{i,j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{l}, \mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_i^0 f_j^0 (\xi_i + \xi_j - \xi'_i - \xi'_j) \odot (\overline{\zeta_i + \zeta_j - \zeta'_i - \zeta'_j}) w_{ij}^{\mathbf{l}, \mathbf{l}', \mathbf{j}, \mathbf{j}'} d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\mathbf{c}'_i d\mathbf{c}'_j.$$

I.6.2 Equations de Boltzmann linéarisées

Pour déterminer les équations qui régissent les fonctions ϕ_i , on injecte le développement de f_i donné par (I.16) dans l'équation (I.15a) pour ne garder que les termes

en ϵ^0 . On obtient alors que $\phi = (\phi_i)_{i \in S}$ vérifie

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi) = -z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i + \Psi_i, \quad i \in S, \quad (\text{I.39})$$

avec

$$\Psi_i = -\tilde{\mathcal{G}}_i(\log f_i^0) + \delta_{a0} \frac{\mathcal{C}_i(f^0)}{f_i^0}, \quad i \in S.$$

De plus, les relations (I.17) fournissent les contraintes scalaires

$$\langle\langle f^0 \phi, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.40})$$

On doit à présent calculer le terme $\tilde{\mathcal{G}}_i(\log f_i^0)$ pour expliciter l'équation (I.39). Ce calcul, long mais sans difficultés, repose sur l'expression (I.21) de f_i^0 , sur les équations macroscopiques d'ordre zéro (I.22) et sur l'équation de conservation de la température (I.36) à l'ordre zéro. On souligne également le fait que, dans la méthode de Enskog, l'opérateur de dérivée temporelle ∂_t doit être développé par rapport au paramètre ϵ . Plus précisément, on écrit

$$\partial_t = \partial_t^0 + \mathcal{O}(\epsilon),$$

où ∂_t^0 peut être évalué au moyen des équations d'ordre zéro. On renvoie le lecteur à l'article [Wal58] pour les détails de ce calcul. On peut alors récrire l'équation (I.39) ainsi :

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi) + z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \phi_j \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} d\mathbf{c}_j = \Psi_i^{\mathcal{S}} + \delta_{a0} \Psi_i^{\mathcal{C}}, \quad i \in S, \quad (\text{I.41})$$

où

$$\Psi_i^{\mathcal{C}} = \frac{\mathcal{C}_i(f^0)}{f_i^0} - \frac{\overline{\omega}_i^0}{\mathbf{n}_i} - \frac{1}{p \mathbf{c}_v T} \left(\frac{3}{2} k_B T - \frac{\mathbf{m}_i}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \overline{\mathcal{E}}_i - \mathcal{E}_{ii} \right) \sum_{j \in S} \left(\frac{3}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_j \right) \overline{\omega}_j^0, \quad (\text{I.42a})$$

$$\Psi_i^{\mathcal{S}} = -\Psi_i^{\eta} : \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} - \frac{1}{3} \Psi_i^{\kappa} \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} - p \sum_{j \in S} \Psi_i^{D_j} \cdot \mathbf{d}_j - \Psi_i^{\hat{\lambda}} \cdot \partial_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{k_B T} \right), \quad (\text{I.42b})$$

et où $p_i = \mathbf{n}_i k_B T$ est la pression partielle due à l'espèce i et $\mathbf{d}_i = (\partial_{\mathbf{x}} p_i - \rho_i \tilde{\mathbf{b}}_i)/p$ la force de diffusion de l'espèce i .

L'apparition du terme

$$\sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \phi_j \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} d\mathbf{c}_j,$$

dans l'équation (I.41) est due au fait que $b = 1$, plus précisément, il résulte du terme $\mathbf{j}$ des équations d'ordre zéro. On verra qu'il permet exactement de compenser les projections sur les invariants de collision scalaires ψ^l du terme $z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i$.

Les fonctions apparaissant dans le développement (I.42b) de $\Psi_i^{\mathcal{S}}$, $i \in S$, sont identiques à celles des mélanges non ionisés. Les fonctions Ψ_i^η , $i \in S$, sont des tenseurs d'ordre deux symétriques à trace nulle dont l'expression est

$$\Psi_i^\eta = \frac{\mathbf{m}_i}{k_B T} (\mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbb{I}), \quad (\text{I.42c})$$

les fonctions Ψ_i^κ , $i \in S$, sont des fonctions scalaires de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ et de $\mathbf{I}$ qui s'écrivent

$$\Psi_i^\kappa = \frac{2\mathbf{c}^{\text{int}}}{\mathbf{c}_v k_B T} \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - \frac{3}{2} k_B T \right) + \frac{2\mathbf{c}_v^{\text{tr}}}{\mathbf{c}_v k_B T} (\bar{\mathcal{E}}_i - \mathcal{E}_{il}), \quad (\text{I.42d})$$

et les fonctions $\Psi_i^{D_j}$ et $\Psi_i^{\hat{\lambda}}$, $i \in S$, sont des fonctions vectorielles construites à partir d'une fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ et $\mathbf{I}$ multipliée par le vecteur $\mathbf{C}_i$,

$$\Psi_i^{D_j} = \frac{1}{p_i} \left(\delta_{ij} - \frac{\rho_i}{\rho} \right) \mathbf{C}_i, \quad (\text{I.42e})$$

$$\Psi_i^{\hat{\lambda}} = \left(\frac{5}{2} k_B T - \frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \bar{\mathcal{E}}_i - \mathcal{E}_{il} \right) \mathbf{C}_i. \quad (\text{I.42f})$$

On peut encore décomposer $\Psi_i^{\mathcal{C}}$ selon chaque réaction chimique

$$\Psi_i^{\mathcal{C}} = \sum_{r \in \mathfrak{R}} \Psi_i^r \bar{\tau}_r, \quad i \in S,$$

où $\bar{\tau}_r$ est le taux d'avancement macroscopique d'ordre zéro de la réaction r et Ψ_i^r est donné par

$$\begin{aligned} \Psi_i^r = & -\frac{\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f}{\mathbf{n}_i} - \frac{1}{p \mathbf{c}_v T} \left(\frac{3}{2} k_B T - \frac{\mathbf{m}_i}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \bar{\mathcal{E}}_i - \mathcal{E}_{il} \right) \sum_{j \in S} \left(\frac{3}{2} k_B T + \bar{\mathcal{E}}_j \right) \nu_{jr} \\ & + \frac{1}{f_i^0 \mathcal{K}_r} \left(\nu_{ir}^b \sum_{\mathbf{F}^r, \mathbf{B}_i^r} \int \mathfrak{D}_r \prod d\mathbf{c}_j \prod_{\mathbf{B}_i^r} d\mathbf{c}_k - \nu_{ir}^f \sum_{\mathbf{F}_i^r, \mathbf{B}^r} \int \mathfrak{D}_r \prod d\mathbf{c}_j \prod_{\mathbf{B}^r} d\mathbf{c}_k \right). \end{aligned} \quad (\text{I.42g})$$

Les décompositions de $\Psi_i^{\mathcal{S}}$ et $\Psi_i^{\mathcal{C}}$ permettront de simplifier l'étude de la solution de l'équation (I.41).

I.6.3 Remarque sur la solution de l'équation de Boltzmann linéarisée

Considérons deux fonctions ${}^1\phi$ et ${}^2\phi$ supposées solutions des équations de Boltzmann linéarisées (I.41)

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi) + z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i + \sum_{\substack{j \in S \\ \mathbf{J} \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \phi_j \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \, d\mathbf{c}_j = \Psi_i^{\mathcal{S}} + \delta_{a0} \Psi_i^{\mathcal{C}}, \quad i \in S,$$

et vérifiant les contraintes scalaires

$$\langle\langle f^0 \phi, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}.$$

Si on pose $\delta\phi = {}^1\phi - {}^2\phi$, par linéarité, $\delta\phi$ vérifie l'équation

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\delta\phi) + z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \delta\phi_i + \sum_{\substack{j \in S \\ \mathbf{J} \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \delta\phi_j \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \, d\mathbf{c}_j = 0, \quad i \in S,$$

et les contraintes scalaires

$$\langle\langle f^0 \delta\phi, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}.$$

En sommant sur $\mathbf{c}_i$, sur $\mathbf{I} \in \Omega_i$ puis sur $i \in S$, après avoir multiplié cette équation par $f_i^0 \delta\phi_i$, on obtient

$$\begin{aligned} \llbracket \delta\phi, \delta\phi \rrbracket + \sum_{\substack{i \in S \\ \mathbf{I} \in \Omega_i}} \int f_i^0 z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot (\partial_{\mathbf{c}_i} \delta\phi_i) \delta\phi_i \, d\mathbf{c}_i \\ + \sum_{i,j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{I} \in \Omega_i \\ \mathbf{J} \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \int f_j^0 f_i^0 \delta\phi_i \delta\phi_j \mathbf{C}_i \cdot (\mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B}) \, d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j = 0. \end{aligned}$$

Or par une intégration par parties, on obtient

$$\sum_{\substack{i \in S \\ \mathbf{I} \in \Omega_i}} \int f_i^0 z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot (\partial_{\mathbf{c}_i} \delta\phi_i) \delta\phi_i \, d\mathbf{c}_i = 0$$

car $\partial_{\mathbf{c}_i} \cdot (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) = 0$. Par ailleurs, comme

$$\mathbf{C}_i \cdot (\mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B}) = -\mathbf{C}_j \cdot (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}),$$

une permutation des indices i et j permet d'écrire

$$\sum_{i,j \in S} \sum_{\substack{1 \in \Omega_j \\ j \in \Omega_i}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \int f_j^0 f_i^0 \delta \phi_i \delta \phi_j \mathbf{C}_i \cdot (\mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B}) d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j = 0.$$

Ainsi, $[[\delta \phi, \delta \phi]] = 0$ et on déduit des propriétés de l'opérateur $[[\cdot, \cdot]]$ que $\delta \phi$ est un invariant de collision. D'après les contraintes scalaires, $\delta \phi$ est donc nul, les deux solutions sont donc égales.

I.6.4 Développement des ϕ_i

On recherche dans cette section une solution particulière du système des équations de Boltzmann. D'après la forme de $\Psi_i^{\mathcal{S}}$ et $\Psi_i^{\mathcal{C}}$ dans l'équation (I.41), on cherche une solution $\phi = (\phi_i)_{i \in S}$ sous la forme

$$\phi_i = \phi_i^{\mathcal{S}} + \delta_{a0} \phi_i^{\mathcal{C}}, \quad (\text{I.43a})$$

avec

$$\phi_i^{\mathcal{C}} = \sum_{r \in \mathfrak{R}} \phi_i^r \bar{\tau}_r, \quad (\text{I.43b})$$

$$\phi_i^{\mathcal{S}} = -\phi_i^{\eta} : \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} - \frac{1}{3} \phi_i^{\kappa} \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} - p \sum_{j \in S} \phi_i^{D_j} \cdot \mathbf{d}_j - \phi_i^{\hat{\lambda}} \cdot \partial_{\mathbf{x}} \left(\frac{1}{k_B T} \right). \quad (\text{I.43c})$$

Les fonctions ϕ^{μ} pour $\mu \in \{\eta, \kappa, \hat{\lambda}\} \cup \{D_j, j \in S\} \cup \{r, r \in \mathfrak{R}\}$ sont maintenant tensorielles et vérifient les équations intégral-différentielles

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^{\mu}) + z_i (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^{\mu} + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_i}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^{\mu} d\mathbf{c}_j = \Psi_i^{\mu}, \quad i \in S, \quad (\text{I.44a})$$

et les contraintes scalaires

$$\langle\langle f^0 \phi^{\mu}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.44b})$$

I.6.4.1 Equations pour $\phi_i^{\hat{\lambda}}$ et $\phi_i^{D_j}$

On étudie simultanément le cas des fonctions $\phi_i^{\hat{\lambda}}$ et $\phi_i^{D_j}$ car elles sont du même type (tenseur d'ordre un colinéaire à $\mathbf{C}_i$). Les calculs sont explicités avec $\phi_i^{\hat{\lambda}}$, mais ils se transposent directement pour $\phi_i^{D_j}$.

L'équation (I.44a) s'écrit pour $\phi^\hat{\lambda}$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^\hat{\lambda}) + z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\hat{\lambda} + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^\hat{\lambda} d\mathbf{c}_j = \Psi_i^\hat{\lambda}, \quad i \in S, \quad (\text{I.45})$$

et on cherche une solution sous la forme

$$\phi_i^\hat{\lambda} = \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i + \phi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B} + \phi_i^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B}, \quad (\text{I.46})$$

où les fonctions $\phi_i^{\hat{\lambda}(1)}$, $\phi_i^{\hat{\lambda}(2)}$ et $\phi_i^{\hat{\lambda}(3)}$ sont des fonctions scalaires qui ne dépendent que de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et de $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$. En effet, la solution doit être invariante par changement de repère et la famille des vecteurs $\{\mathbf{C}_i, \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}, \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B}\}$ forme une base des vecteurs construits à partir de $\mathbf{C}_i$, $i \in S$, et de $\mathbf{B}$ et qui vérifient cette propriété d'invariance [Wan70a, Wan70b]. En utilisant cette base, on transforme cette équation intégral-différentielle vectorielle (dans $\mathbb{R}^3$) en trois équations intégral-différentielles scalaires.

Pour résoudre les équations intégral-différentielles en $\phi_i^\hat{\lambda}$ et $\phi_i^{D_j}$, on a besoin d'un opérateur noté $\mathbf{R}$ qui transforme un vecteur $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)^T$ en une matrice antisymétrique à trace nulle

$$\mathbf{R}(\mathbf{a}) = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pour deux vecteurs $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$ de $\mathbb{R}^3$, on a alors les relations $\mathbf{R}(\mathbf{a})\mathbf{b} = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ et $\mathbf{b}^T \mathbf{R}(\mathbf{a}) = (\mathbf{b} \wedge \mathbf{a})^T$.

Le premier terme de l'équation $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^\hat{\lambda})$ se projette directement selon les trois vecteurs $\mathbf{C}_i$, $\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}$ et $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B}$ en utilisant l'isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé (voir Annexe I.9) et la forme (I.46) de $\phi_i^\hat{\lambda}$.

Pour le deuxième terme, $z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\hat{\lambda}$, un calcul direct montre que

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\hat{\lambda} &= \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbb{I} + 2\partial_1 \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i + \partial_2 \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i \otimes \mathbf{B} \\ &\quad - \phi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{R}(\mathbf{B}) + 2\partial_1 \phi_i^{\hat{\lambda}(2)} (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes \mathbf{C}_i + \partial_2 \phi_i^{\hat{\lambda}(2)} (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes \mathbf{B} \\ &\quad + \phi_i^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + 2\partial_1 \phi_i^{\hat{\lambda}(3)} (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} \otimes \mathbf{C}_i + \partial_2 \phi_i^{\hat{\lambda}(3)} (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B}) \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}. \end{aligned}$$

En multipliant scalairement par $\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}$, on en déduit la relation suivante

$$(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\hat{\lambda} = \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B} + \phi_i^{\hat{\lambda}(2)} (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} - \mathbf{B}^2 \mathbf{C}_i), \quad (\text{I.47})$$

en rappelant que B est la norme du vecteur $\mathbf{B}$.

On étudie à présent le dernier terme. En remarquant que l'on a la relation antisymétrique $\mathbf{C}_i \cdot (\mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B}) = -\mathbf{C}_j \cdot (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B})$, on peut écrire

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}} \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} d\mathbf{c}_j \\ &= - \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \int f_j^0 \mathbf{C}_j (\phi_j^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_j + \phi_j^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} + \phi_j^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{B} \mathbf{B}) d\mathbf{c}_j. \end{aligned}$$

En utilisant l'isotropie des fonctions $\phi_j^{\hat{\lambda}(1)}$, $\phi_j^{\hat{\lambda}(2)}$ et $\phi_j^{\hat{\lambda}(3)}$ et le fait que les seules contributions non nulles sont apportées par les fonctions paires en chacune des composantes de $\mathbf{C}_j$, on obtient

$$\begin{aligned} & \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_j \otimes \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j = \frac{1}{3} \left(\int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j \right) \mathbb{I}, \\ & \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_j \otimes (\mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B}) d\mathbf{c}_j = \frac{1}{3} \left(\int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j \right) \mathbf{R}(\mathbf{B}), \\ & \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{B} \mathbf{C}_j \otimes \mathbf{B} d\mathbf{c}_j = \frac{1}{3} \left(\int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j \right) \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}. \end{aligned}$$

En utilisant la formule $\mathbf{R}(\mathbf{B})\mathbf{a} = \mathbf{B} \wedge \mathbf{a}$, pour un vecteur $\mathbf{a}$ de $\mathbb{R}^3$, on obtient

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}} \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} d\mathbf{c}_j = -\frac{1}{3} \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B} \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j \\ & \quad + \frac{1}{3} \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} (B^2 \mathbf{C}_i - \mathbf{B} \cdot \mathbf{C}_i \mathbf{B}) \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j, \quad (\text{I.48}) \end{aligned}$$

le dernier terme de l'équation intégrale-différentielle (I.45) étant alors développé selon les trois vecteurs $\mathbf{C}_i$, $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B}$ et $\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}$.

En utilisant les formules (I.47) et (I.48) et l'isotropie de l'opérateur $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ (Voir Annexe I.9), une projection sur les trois vecteurs formellement indépendants $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}_i$ et $\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}$ permet de scinder l'équation (I.45) en trois équations couplées

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}) + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{3\rho k_B T} B^2 \mathbf{C}_i \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j - z_i B^2 \phi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_i = \Psi_i^{\hat{\lambda}}, \quad i \in S, \quad (\text{I.49a})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C} \wedge \mathbf{B}) - \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{3\rho k_B T} \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B} \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j + z_i \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B} = 0, \quad i \in S, \quad (\text{I.49b})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C} \cdot \mathbf{B} \mathbf{B}) - \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{3\rho k_B T} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} \int f_j^0 \phi_j^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j + z_i \phi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} = 0, \quad i \in S, \quad (\text{I.49c})$$

où l'on a défini les familles de fonctions

$$\begin{aligned} \phi^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C} &= \left(\phi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i \right)_{i \in S}, \\ \phi^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C} \wedge \mathbf{B} &= \left(\phi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B} \right)_{i \in S}, \\ \phi^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C} \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} &= \left(\phi_i^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} \right)_{i \in S}. \end{aligned}$$

A ce stade, les équations intégrro-différentielles pour $\phi_i^{\hat{\lambda}}$ sont réduites à des équations intégrales couplées dont les inconnues sont scalaires et réelles. Pour les découpler, on introduit les variables réelles $\varphi_i^{\hat{\lambda}(1)}$, $i \in S$, et les variables complexes $\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)}$, $i \in S$, définies par

$$\varphi_i^{\hat{\lambda}(1)} = \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} + B^2 \phi_i^{\hat{\lambda}(3)}, \quad i \in S, \quad (\text{I.50a})$$

$$\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)} = \phi_i^{\hat{\lambda}(1)} + \mathbf{i} B \phi_i^{\hat{\lambda}(2)}, \quad i \in S, \quad (\text{I.50b})$$

où $\mathbf{i}$ est une racine carrée de -1 . On résout ainsi les équations découplées en ces nouvelles variables et on en déduira l'existence des $\phi_i^{\hat{\lambda}}$, $i \in S$, par la relation

$$\phi_i^{\hat{\lambda}} = ((\varphi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + \Re(\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)}) (\mathbb{I} - \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}) - \Im(\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)}) \mathbf{R}(\mathbf{B}))) \mathbf{C}_i, \quad (\text{I.51})$$

où $\mathbf{B}$ est le vecteur unitaire défini par $\mathbf{B} = \mathbf{B}/B$ et où $\Re(z)$ et $\Im(z)$ désignent la partie réelle et la partie imaginaire du complexe $z = \Re(z) + \mathbf{i} \Im(z)$.

En ajoutant les équations (I.49a) et (I.49c) puis en prenant le produit scalaire avec le vecteur $\mathbf{B}$, on obtient les équations vérifiées par la famille de fonctions $\varphi^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C} = (\varphi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i)_{i \in S}$,

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\varphi^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}) = \Psi_i^{\hat{\lambda}}, \quad i \in S. \quad (\text{I.52a})$$

De plus, en ajoutant le produit vectoriel de l'équation (I.49a) par le vecteur $\mathbf{B}$ à l'équation (I.49b) multipliée par le scalaire $\mathbf{i} B$, on obtient les équations vérifiées par

la famille $\varphi^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C} = (\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_i)_{i \in S}$,

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\varphi^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}) - \mathbf{i}B \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{3\rho k_B T} \mathbf{C}_i \int f_j^0 \varphi_j^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j + \mathbf{i}B z_i \varphi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_i = \Psi_i^{\hat{\lambda}}, \quad i \in S. \quad (\text{I.52b})$$

Si les deux équations (I.52) ont une solution alors les trois équations (I.49) en auront une également.

En définissant les familles de fonctions vectorielles $\varphi^{\hat{\lambda}(1)}$ et $\varphi^{\hat{\lambda}(2)}$ par les relations

$$\varphi^{\hat{\lambda}(1)} = \left(\varphi_i^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}_i \right)_{i \in S}, \quad \varphi^{\hat{\lambda}(2)} = \left(\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}_i \right)_{i \in S},$$

et l'opérateur $\mathcal{F}^{q^1} = \left(\mathcal{F}_i^{q^1} \right)_{i \in S}$ défini pour $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_i)_{i \in S}$ par

$$\mathcal{F}_i^{q^1}(\mathbf{u}) = - \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{z_j \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{3\rho k_B T} \mathbf{C}_i \int f_j^0 \mathbf{u}_j \cdot \mathbf{C}_j d\mathbf{c}_j + z_i \mathbf{u}_i, \quad i \in S, \quad (\text{I.53})$$

où $\mathbf{u}_i$ est le produit du vecteur $\mathbf{C}_i$ par une fonction scalaire (complexe) de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et de $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$, les équations (I.52a) et (I.52b) se récrivent sous la forme

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi^{\hat{\lambda}(1)}) = \Psi^{\hat{\lambda}}, \quad (\text{I.54a})$$

$$\left(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + \mathbf{i}B \mathcal{F}^{q^1} \right) (\varphi^{\hat{\lambda}(2)}) = \Psi^{\hat{\lambda}}. \quad (\text{I.54b})$$

On s'intéresse à présent aux contraintes scalaires (I.44b). En utilisant la parité des fonctions f_i^0 , $\phi_i^{\hat{\lambda}(1)}$, $\phi_i^{\hat{\lambda}(2)}$ et $\phi_i^{\hat{\lambda}(3)}$ en la variable $\mathbf{C}_i$ et l'isotropie, on montre à partir des relations (I.44b) que

$$\langle f^0 \phi^{\hat{\lambda}(1)} \mathbf{C}, \psi^l \rangle = \langle f^0 \phi^{\hat{\lambda}(2)} \mathbf{C}, \psi^l \rangle = \langle f^0 \phi^{\hat{\lambda}(3)} \mathbf{C}, \psi^l \rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\},$$

et on obtient donc, d'après les définitions (I.50), que

$$\langle f^0 \varphi^{\hat{\lambda}(1)}, \psi^l \rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.55a})$$

$$\langle f^0 \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \psi^l \rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.55b})$$

On remarque que les images des opérateurs $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ et $\mathcal{F}^{q^1}$ sont orthogonales aux invariants de collision scalaires et ce grâce à l'isotropie de l'opérateur de Boltzmann

linéarisé et à la relation

$$\sum_{\substack{i \in S \\ i \in \Omega_i}} m_i^2 \int f_i^0 \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i d\mathbf{c}_i = 3\rho k_B T.$$

En mettant des hypothèses raisonnables sur les sections de collision, les équations intégrales sont classiquement résolues car la famille de fonctions $\Psi^{\hat{\lambda}}$ est orthogonale aux noyau de $\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + iB\mathcal{F}^{q^1}$ [FK72, Cer88]. On pourrait aussi formaliser cela dans un espace approprié en utilisant Lax-Milgram [Cer88, Wal58]. Par ailleurs, l'isotropie des opérateurs $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ et $\mathcal{F}^{q^1}$ permet de montrer que les fonctions $\varphi_i^{\hat{\lambda}(1)}$ et $\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)}$, $i \in S$, sont des fonctions des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$ —et non pas $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ —multipliées par le vecteur $\mathbf{C}_i$.

La solution $\varphi^{\hat{\lambda}(1)}$ de l'équation (I.54a) ne dépend pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. On s'intéresse à présent à la dépendance de la solution $\varphi^{\hat{\lambda}(2)}$ de l'équation (I.54b) vis à vis du champ magnétique lorsqu'il tend vers zéro. Comme les opérateurs $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ et $\mathcal{F}^{q^1}$ ne dépendent pas du champ magnétique, on peut développer les fonctions $\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)}$, $i \in S$, sous la forme

$$\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)} = \sum_{n \in \mathbb{N}} (iB)^n \varphi_{i,n}^{\hat{\lambda}}, \quad (\text{I.56})$$

où les familles de fonctions $\varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}} = (\varphi_{i,n}^{\hat{\lambda}})_{i \in S}$, $n \in \mathbb{N}$, vérifient les équations intégrales

$$\begin{cases} \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi_{\cdot,0}^{\hat{\lambda}}) = \Psi^{\hat{\lambda}}, \\ \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi_{\cdot,n+1}^{\hat{\lambda}}) = -\mathcal{F}^{q^1}(\varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}}), \quad n \geq 0, \end{cases} \quad (\text{I.57})$$

sous les contraintes

$$\langle\langle f^0 \varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{0, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.58})$$

Ces équations définissent de manière unique les fonctions réelles $\varphi_{i,n}^{\hat{\lambda}}$, $i \in S$, $n \in \mathbb{N}$, de manière récursive. On remarque enfin que les fonctions $\varphi_{i,0}^{\hat{\lambda}}$ et $\varphi_i^{\hat{\lambda}(1)}$, $i \in S$, sont égales car elles sont définies par les mêmes équations.

On peut effectuer un développement similaire pour ϕ^{D_j} , $j \in S$. L'équation vérifiée par les fonctions $\phi_i^{D_j}$, pour $i, j \in S$, correspondant à l'équation (I.45), est

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^{D_j}) + z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^{D_j} + \sum_{\substack{k \in S \\ k \in \Omega_k}} \frac{m_i m_k}{\rho k_B T} z_k \mathbf{C}_i \cdot \int f_k^0 \mathbf{C}_k \wedge \mathbf{B} \phi_i^{D_k} d\mathbf{c}_k = \Psi_i^{D_j}, \quad i \in S, \quad (\text{I.59})$$

pour laquelle on cherche une solution sous la forme

$$\phi_i^{D_j} = \phi_i^{D_j(1)} \mathbf{C}_i + \phi_i^{D_j(2)} \mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B} + \phi_i^{D_j(3)} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} \mathbf{B}. \quad (\text{I.60})$$

On introduit alors les fonctions auxiliaires scalaires $\varphi_i^{D_j(1)}$ et $\varphi_i^{D_j(2)}$ par les relations

$$\varphi_i^{D_j(1)} = \phi_i^{D_j(1)} + B^2 \phi_i^{D_j(3)}, \quad i \in S, \quad (\text{I.61a})$$

et

$$\varphi_i^{D_j(2)} = \phi_i^{D_j(1)} + \mathbf{i} B \phi_i^{D_j(2)}, \quad i \in S, \quad (\text{I.61b})$$

et on définit les familles de fonctions vectorielles $\varphi^{D_j(1)}$ et $\varphi^{D_j(2)}$ par

$$\varphi^{D_j(1)} = \left(\varphi_i^{D_j(1)} \mathbf{C}_i \right)_{i \in S}, \quad \varphi^{D_j(2)} = \left(\varphi_i^{D_j(2)} \mathbf{C}_i \right)_{i \in S}.$$

On résout les équations pour ces dernières variables et on utilise les relations

$$\phi_i^{D_j} = \left(\varphi_i^{D_j(1)} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + \Re(\varphi_i^{D_j(2)}) (\mathbb{I} - \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}) - \Im(\varphi_i^{D_j(2)}) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \right) \mathbf{C}_i, \quad (\text{I.62})$$

pour revenir aux inconnues $\phi_i^{D_j}$, $i, j \in S$.

Ces fonctions vérifient alors les équations suivantes qui correspondent aux équations (I.54) pour les variables $\varphi^{\tilde{\lambda}(1)}$ et $\varphi^{\tilde{\lambda}(2)}$

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi^{D_j(1)}) = \Psi^{D_j}, \quad (\text{I.63a})$$

$$(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + \mathbf{i} B \mathcal{F}^{q^1})(\varphi^{D_j(2)}) = \Psi^{D_j}, \quad (\text{I.63b})$$

et les contraintes scalaires, correspondant aux équations (I.55),

$$\langle\langle f^0 \varphi^{D_j(1)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.64a})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{D_j(2)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.64b})$$

pour tout $j \in S$. En mettant des hypothèses raisonnables sur les sections de collision, les équations intégrales sont classiquement résolues car les familles de fonctions Ψ^{D_j} , $j \in S$ sont orthogonales aux noyau de $\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + \mathbf{i} B \mathcal{F}^{q^1}$ [FK72, Cer88]. On pourrait aussi formaliser cela dans un espace approprié en utilisant Lax-Milgram [Cer88, Wal58]. Par ailleurs, l'isotropie des opérateurs $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ et $\mathcal{F}^{q^1}$ permet de montrer que les fonctions $\varphi_i^{D_j(1)}$ et $\varphi_i^{D_j(2)}$, $i, j \in S$, sont des fonctions des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$ —et non pas de $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ —multipliées par le vecteur $\mathbf{C}_i$.

La solution $\varphi^{D_j(1)}$ de l'équation (I.63a) ne dépend pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. En ce qui concerne la solution $\varphi^{D_j(2)}$ de l'équation (I.63b), les opérateurs $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ et $\mathcal{F}^{q^1}$

ne dépendant pas du champ magnétique, on peut développer les fonctions $\varphi_i^{D_j(2)}$, $i, j \in S$, sous la forme

$$\varphi_i^{D_j(2)} = \sum_{n \in \mathbb{N}} (\mathbf{i}B)^n \varphi_{i,n}^{D_j}, \quad (\text{I.65})$$

où les familles de fonctions $\varphi_{.,n}^{D_j} = (\varphi_{i,n}^{D_j})_{i \in S}$, $j \in S$, $n \in \mathbb{N}$, vérifient les équations intégrales

$$\begin{cases} \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi_{.,0}^{D_j}) = \Psi^{D_j}, \\ \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi_{.,n+1}^{D_j}) = -\mathcal{F}^{q^1}(\varphi_{.,n}^{D_j}), \quad n \geq 0, \end{cases} \quad (\text{I.66})$$

sous les contraintes

$$\langle f^0 \varphi_{.,n}^{D_j}, \psi^l \rangle = 0, \quad l \in \{0, \dots, n^s + 4\}, \quad n \geq 0. \quad (\text{I.67})$$

Ces équations définissent de manière unique les fonctions réelles $\varphi_{i,n}^{D_j}$, $i, j \in S$, $n \in \mathbb{N}$, de manière récursive. Et on remarque également que les familles de fonctions $\varphi_{i,0}^{D_j}$ et $\varphi_i^{D_j(1)}$, $i, j \in S$, sont égales.

Les membres de droite Ψ^{D_j} possèdent une propriété importante qu'on peut écrire $\sum_{j \in S} \rho_j \Psi^{D_j} = 0$, qui implique par linéarité que $\sum_{j \in S} \rho_j \phi^{D_j} = 0$, et donc que

$$\sum_{j \in S} \rho_j \varphi^{D_j(1)} = 0, \quad \sum_{j \in S} \rho_j \varphi^{D_j(2)} = 0. \quad (\text{I.68})$$

Enfin, le rang des deux familles $(\varphi^{\hat{\lambda}(1)}, \varphi^{D_j(1)}, j \in S)$ et $(\varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \varphi^{D_j(2)}, j \in S)$ est exactement n^s , car c'est celui des membres de droite correspondant $(\Psi^{\hat{\lambda}}, \Psi^{D_j}, j \in S)$.

I.6.4.2 Equations pour ϕ_i^η

D'après (I.44), les fonctions ϕ_i^η pour $i \in S$ vérifient les équations

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^\eta) + z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\eta + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho_{\text{KB}} T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^\eta d\mathbf{c}_j = \Psi_i^\eta, \quad i \in S, \quad (\text{I.69a})$$

et les contraintes

$$\langle f^0 \phi^\eta, \psi^l \rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.69b})$$

On introduit la vitesse renormalisée $\mathbf{C}_i$, $i \in S$, définie par

$$\mathbf{C}_i = \sqrt{\frac{\mathbf{m}_i}{2k_B T}} \mathbf{C}_i, \quad i \in S.$$

L'équation (I.69a) se réécrit alors, en utilisant l'expression (I.21) de f_i^0 ,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^\eta) + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{2\sqrt{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j} \mathbf{n}_j z_j}{\rho \pi^{3/2} \beta_{jJ}} \frac{\exp\left(-\frac{\varepsilon_{jJ}}{k_B T}\right)}{\sum_{j \in \Omega_j} \frac{1}{\beta_{jJ}} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{jJ}}{k_B T}\right)} \mathbf{C}_i \cdot \int \exp(-\mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j) \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^\eta d\mathbf{C}_j \\ + z_i (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \phi_i^\eta = 2 \left(\mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbb{I} \right). \quad (\text{I.70}) \end{aligned}$$

On cherche une solution $\phi^\eta = (\phi_i^\eta)_{i \in S}$ invariante par changement de repère, telle que les fonctions ϕ_i^η , $i \in S$, sont construites à partir de tous les tenseurs symétriques d'ordre deux à trace nulle qui peuvent être créés grâce au vecteur $\mathbf{C}_i$ et au pseudo-vecteur $\mathbf{B}$ [Wan70a, Wan70b]. Comme l'espace de ces tenseurs est de dimension 5, il est suffisant de considérer 5 tenseurs linéairement indépendants et de développer la solution sur cette base. Nous introduisons donc la famille des 5 tenseurs $\mathbf{T}_i^{(1)}, \dots, \mathbf{T}_i^{(5)}$, définis par

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_i^{(1)} &= \mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbb{I}, \\ \mathbf{T}_i^{(2)} &= \frac{1}{2} [\mathbf{C}_i \otimes (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) + (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes \mathbf{C}_i], \\ \mathbf{T}_i^{(3)} &= (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbb{I} + (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2 / \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}, \\ \mathbf{T}_i^{(4)} &= \frac{1}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} [\mathbf{C}_i \otimes \mathbf{B} + \mathbf{B} \otimes \mathbf{C}_i] - (\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2 / \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}, \\ \mathbf{T}_i^{(5)} &= \frac{1}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B} [\mathbf{B} \otimes (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) + (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \otimes \mathbf{B}]. \end{aligned}$$

On remarque que J.H. Ferziger et H.G. Kaper ont trouvé plus judicieux de considérer 6 tenseurs et la relation linéaire qui les lie dans [FK72]. Cette représentation permet d'obtenir les mêmes résultats mais elle est certainement moins élégante car certaines relations entre ces tenseurs ne sont pas linéaires et il est plus difficile de justifier les changements de variables.

On développe les fonctions ϕ_i^η , $i \in S$, par rapport à cette famille

$$\phi_i^\eta = \sum_{n=1}^5 \phi_i^{\eta(n)} \mathbf{T}_i^{(n)}. \quad (\text{I.71})$$

Les fonctions $\phi_i^{\eta(n)}$ sont a priori des fonctions scalaires de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, de $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et de $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$, car la solution ϕ^η doit être invariante par changement de repère.

Or les tenseurs $\mathbf{T}_i^{(n)}$ et les fonctions $\phi_i^{\eta(n)}$ étant pairs en $\mathbf{C}_i$, tous les termes

$$\int \exp(-\mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j) \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^\eta d\mathbf{C}_j$$

qui apparaissent dans l'équation (I.69a) sont nuls. On doit donc s'intéresser aux termes $(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \phi_i^\eta$. Comme les fonctions $\phi_i^{\eta(n)}$ sont des fonctions scalaires des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$, les vecteurs $\partial_{\mathbf{C}_i} \phi_i^{\eta(n)}$ sont dans le plan engendré par les vecteurs $\mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B}$. Ainsi,

$$(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \phi_i^{\eta(n)} = 0,$$

et on obtient

$$(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \phi_i^\eta = \sum_{n=1}^6 \phi_i^{\eta(n)} \left((\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \mathbf{T}_i^{(n)} \right).$$

Il reste donc à calculer les termes $(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \mathbf{T}_i^{(n)}$ et à les exprimer selon les tenseurs $\mathbf{T}_i^{(n)}$. Le résultat est le suivant

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \mathbf{T}_i^{(1)} &= 2\mathbf{T}_i^{(2)}, \\ (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \mathbf{T}_i^{(2)} &= -\mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbf{T}_i^{(1)} + \mathbf{T}_i^{(3)} + \mathbf{T}_i^{(4)}, \\ (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \mathbf{T}_i^{(3)} &= -2\mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbf{T}_i^{(2)} + 2\mathbf{T}_i^{(5)}, \\ (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \mathbf{T}_i^{(4)} &= \mathbf{T}_i^{(5)}, \\ (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{C}_i} \mathbf{T}_i^{(5)} &= -\mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \mathbf{T}_i^{(4)}. \end{aligned}$$

L'isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}$ implique que, pour chaque $n \in \{1, \dots, 5\}$, le tenseur $\mathbf{T}_i^{(n)}$ et son image par cet opérateur sont colinéaires. On peut alors écrire les équations intégrodifférentielles correspondant selon chacun de ces 5 tenseurs de base.

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(1)} \mathbf{T}_i^{(1)}) - z_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \phi_i^{\eta(2)} \mathbf{T}_i^{(1)} &= 2\mathbf{T}_i^{(1)}, \quad i \in \mathbf{S} \\ \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(2)} \mathbf{T}_i^{(2)}) + 2z_i(\phi_i^{\eta(1)} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \phi_i^{\eta(3)}) \mathbf{T}_i^{(2)} &= 0, \quad i \in \mathbf{S}, \\ \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(3)} \mathbf{T}_i^{(3)}) + z_i \phi_i^{\eta(2)} \mathbf{T}_i^{(3)} &= 0, \quad i \in \mathbf{S}, \\ \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(4)} \mathbf{T}_i^{(4)}) + z_i(\phi_i^{\eta(2)} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \phi_i^{\eta(5)}) \mathbf{T}_i^{(4)} &= 0, \quad i \in \mathbf{S}, \\ \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(5)} \mathbf{T}_i^{(5)}) + z_i(2\phi_i^{\eta(3)} + \phi_i^{\eta(4)}) \mathbf{T}_i^{(5)} &= 0, \quad i \in \mathbf{S}. \end{aligned}$$

En utilisant les relations linéaires liant les tenseurs $\mathbf{T}_i^{(n)}$, $n \in \{2, 3, 4, 5\}$, au tenseur $\mathbf{T}_i^{(1)}$, pour $i \in S$,

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_i^{(2)} &= \frac{1}{2}(\mathbf{T}_i^{(1)} \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{T}_i^{(1)}), \\ \mathbf{T}_i^{(3)} &= -\mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{T}_i^{(1)} \mathbf{R}(\mathbf{B}) + \frac{1}{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \mathbf{T}_i^{(1)} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}, \\ \mathbf{T}_i^{(4)} &= \frac{1}{2}(\mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \mathbf{T}_i^{(1)} + \mathbf{T}_i^{(1)} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}) - \frac{1}{\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \mathbf{T}_i^{(1)} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}, \\ \mathbf{T}_i^{(5)} &= \frac{1}{2}(\mathbf{B} \otimes \mathbf{B} \mathbf{T}_i^{(1)} \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{T}_i^{(1)} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}),\end{aligned}$$

on en déduit par isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé (voir Annexe I.9) que l'équation (I.70) est une conséquence des 5 équations couplées

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(1)}) - z_i \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \phi_i^{\eta(2)} = 2\Psi_i^\eta, \quad i \in S \quad (\text{I.72a})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(2)}) + 2z_i(\phi_i^{\eta(1)} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \phi_i^{\eta(3)}) = 0, \quad i \in S, \quad (\text{I.72b})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(3)}) + z_i \phi_i^{\eta(2)} = 0, \quad i \in S, \quad (\text{I.72c})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(4)}) + z_i(\phi_i^{\eta(2)} - \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} \phi_i^{\eta(5)}) = 0, \quad i \in S, \quad (\text{I.72d})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi_i^{\eta(5)}) + z_i(2\phi_i^{\eta(3)} + \phi_i^{\eta(4)}) = 0, \quad i \in S, \quad (\text{I.72e})$$

en ayant posé

$$\phi_i^{\eta(n)} = \phi_i^{\eta(n)} (\mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbb{I}).$$

Pour découpler ces équations, on fait intervenir à nouveau des variables complexes qu'on notera $\varphi_i^{\eta(1)}$, $\varphi_i^{\eta(2)}$ et $\varphi_i^{\eta(3)}$ définies par

$$\begin{aligned}\varphi_i^{\eta(1)} &= \phi_i^{\eta(1)} + B^2 \phi_i^{\eta(3)}, \quad i \in S, \\ \varphi_i^{\eta(2)} &= \phi_i^{\eta(1)} + \mathbf{i} B \phi_i^{\eta(2)} - B^2 \phi_i^{\eta(3)}, \quad i \in S, \\ \varphi_i^{\eta(3)} &= \phi_i^{\eta(1)} + \frac{1}{2} \mathbf{i} B \phi_i^{\eta(2)} + \frac{1}{2} B^2 \phi_i^{\eta(4)} + \frac{1}{2} \mathbf{i} B^3 \phi_i^{\eta(5)}, \quad i \in S,\end{aligned}$$

où B est la norme du vecteur $\mathbf{B}$.

Les équations vérifiées par ces nouvelles variables sont les suivantes

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\varphi_i^{\eta(1)}) = 2\Psi_i^\eta, \quad i \in S, \quad (\text{I.73a})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\varphi_i^{\eta(2)}) + 2\mathbf{i} B z_i \varphi_i^{\eta(2)} = 2\Psi_i^\eta, \quad i \in S, \quad (\text{I.73b})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\varphi_i^{\eta(3)}) + \mathbf{i} B z_i \varphi_i^{\eta(3)} = 2\Psi_i^\eta, \quad i \in S. \quad (\text{I.73c})$$

Pour $\mathbf{u} = (\mathbf{u}_i)_{i \in S}$, fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$ multipliée par le tenseur $\mathbf{T}_i^{(1)}$, on introduit alors l'opérateur $\mathcal{F}^{q^2} = (\mathcal{F}_i^{q^2})_{i \in S}$ défini par

$$\mathcal{F}_i^{q^2}(\mathbf{u}) = z_i \mathbf{u}_i, \quad i \in S.$$

Les équations (I.73) se récrivent alors immédiatement sous la forme

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi^{\eta(1)}) = \Psi^{\eta}, \quad (\text{I.74a})$$

$$(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + 2iB\mathcal{F}^{q^2})(\varphi^{\eta(2)}) = \Psi^{\eta}, \quad (\text{I.74b})$$

$$(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + iB\mathcal{F}^{q^2})(\varphi^{\eta(3)}) = \Psi^{\eta}. \quad (\text{I.74c})$$

De plus, les fonctions $\varphi^{\eta(1)}$, $\varphi^{\eta(2)}$ et $\varphi^{\eta(3)}$, vérifient les contraintes scalaires

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\eta(1)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.75a})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\eta(2)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.75b})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\eta(3)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.75c})$$

En mettant des hypothèses raisonnables sur les sections de collision, les équations intégrales sont classiquement résolues car la famille de fonctions Ψ^{η} est orthogonale au noyau de $\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + iB\mathcal{F}^{q^2}$ [Cer88, Wal58], ce qui peut se formaliser en utilisant Lax-Milgram dans un espace approprié. De plus, l'isotropie de l'opérateur $\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + iB\mathcal{F}^{q^2}$ permet de montrer que les fonctions $\varphi_i^{\eta(1)}$, $\varphi_i^{\eta(2)}$ et $\varphi_i^{\eta(3)}$, $i \in S$, sont des fonctions de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ et de $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$ multipliées par le tenseur $\mathbf{T}_i^{(1)}$.

La solution $\varphi^{\eta(1)}$ de l'équation (I.74a) ne dépend pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. En ce qui concerne les solutions $\varphi^{\eta(2)}$ et $\varphi^{\eta(3)}$ des équations (I.74b) et (I.74c), les opérateurs $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ et $\mathcal{F}^{q^2}$ ne dépendant pas du champ magnétique, on développe les fonctions $\varphi_i^{\eta(2)}$ et $\varphi_i^{\eta(3)}$, $i \in S$, sous la forme

$$\varphi_i^{\eta(2)} = \sum_{n \in \mathbb{N}} (2iB)^n \varphi_{i,n}^{\eta}, \quad (\text{I.76a})$$

$$\varphi_i^{\eta(3)} = \sum_{n \in \mathbb{N}} (iB)^n \varphi_{i,n}^{\eta}, \quad (\text{I.76b})$$

où les familles de fonctions $\varphi_{.,n}^{\eta} = (\varphi_{i,n}^{\eta})_{i \in S}$, $n \in \mathbb{N}$, vérifient les équations intégrales

$$\begin{cases} \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi_{.,0}^{\eta}) = \Psi^{\eta}, \\ \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi_{.,n+1}^{\eta}) = -\mathcal{F}^{q^1}(\varphi_{.,n}^{\eta}), \quad n \geq 0, \end{cases} \quad (\text{I.77})$$

sous les contraintes

$$\langle\langle f^0 \varphi_{.,n}^{\eta}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{0, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.78})$$

Ces équations définissent de manière unique les fonctions réelles $\varphi_{i,n}^{\eta}$, $i \in S$, $n \in \mathbb{N}$, de manière récursive. On remarque également que les fonctions $\varphi_{i,0}^{\eta}$ et $\varphi_i^{\eta(1)}$, $i \in S$, sont égales car elles sont définies par les mêmes équations.

I.6.4.3 Equations pour ϕ_i^κ

Le cas des fonctions ϕ_i^κ , $i \in S$, est identique à celui des mélanges neutre [Gio99]. D'après (I.44), ces fonctions vérifient les équations

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\phi^\kappa) + z_i(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\kappa + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho_{\text{KB}} T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^\kappa d\mathbf{c}_j = \Psi_i^\kappa, \quad i \in S, \quad (\text{I.79a})$$

et les contraintes scalaires

$$\langle\langle f^0 \phi^\kappa, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.79b})$$

On cherche une solution sous la forme $\phi^\kappa = (\phi_i^\kappa)_{i \in S}$ où ϕ_i^κ est une fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$. Par imparité, toutes les intégrales

$$\int f_j^0 \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^\kappa d\mathbf{c}_j$$

sont nulles. De plus, le vecteur $\partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\kappa$ est dans le plan défini par les vecteurs $\mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B}$. On obtient donc

$$(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^\kappa = 0.$$

L'équation (I.79) se récrit alors

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\phi^\kappa) = \Psi^\kappa. \quad (\text{I.80})$$

On remarque que la fonction Ψ^κ est orthogonale aux invariants de collision scalaire. En effet, comme cette fonction est paire en la variable $\mathbf{C}_i$, il est suffisant de montrer que

$$\sum_{i \in \Omega_i} \int f_i^0 \Psi_i^\kappa d\mathbf{c}_i = 0, \quad i \in S$$

et que

$$\sum_{\substack{i \in S \\ i \in \Omega_i}} \int f_i^0 \Psi_i^\kappa \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{il} \right) d\mathbf{c}_i = 0,$$

ce qui s'obtient en utilisant les relations

$$\Psi_i^\kappa = \frac{2\mathbf{c}^{\text{int}}}{\mathbf{c}_v \text{KB} T} \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - \frac{3}{2} \text{KB} T \right) + \frac{2\mathbf{c}_v^{\text{tr}}}{\mathbf{c}_v \text{KB} T} (\overline{\mathcal{E}_i} - \mathcal{E}_{il}), \quad i \in S,$$

avec $n\mathbf{c}^{\text{int}} = \sum_{i \in S} \mathbf{n}_i \mathbf{c}_i^{\text{int}}$, $\mathbf{c}_v^{\text{tr}} = 3/2 \, k_B$, et $\mathbf{c}_i^{\text{int}} = d\overline{\mathcal{E}}_i/dT$ qui se réécrit (I.35a) sous la forme

$$\mathbf{c}_i^{\text{int}} = \frac{1}{k_B T^2 Q_i^{\text{int}}} \sum_{i \in \Omega_i} \alpha_{i1} (\mathcal{E}_{i1} - \overline{\mathcal{E}}_i)^2 \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_{i1}}{k_B T}\right).$$

Les équations intégrales (I.80) (I.79b) sont résolubles car la famille de fonctions Ψ^κ est orthogonale au noyau de $\mathcal{F}^\mathcal{S}$ [FK72].

I.6.4.4 Equations pour des ϕ_i^r

Le cas des fonctions ϕ_i^r , $i \in S$, est identique à celui des mélanges neutres. D'après (I.44), ces fonctions vérifient les équations

$$\mathcal{F}_i^\mathcal{S}(\phi^r) + z_i (\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^r + \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\rho k_B T} z_j \mathbf{C}_i \cdot \int f_j^0 \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^r d\mathbf{c}_j = \Psi_i^r, \quad i \in S, \quad (\text{I.81a})$$

et les contraintes scalaires

$$\langle f^0 \phi^r, \psi^l \rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.81b})$$

On cherche une solution sous la forme $\phi^r = (\phi_i^r)_{i \in S}$ où ϕ_i^r est une fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$. Par imparité, toutes les intégrales

$$\int f_j^0 \mathbf{C}_j \wedge \mathbf{B} \phi_j^r d\mathbf{c}_j$$

sont nulles. De plus, le vecteur $\partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^r$ est dans le plan défini par les vecteurs $\mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B}$. On obtient donc

$$(\mathbf{C}_i \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{c}_i} \phi_i^r = 0.$$

L'équation (I.81) se réécrit alors

$$\mathcal{F}^\mathcal{S}(\phi^r) = \Psi^r. \quad (\text{I.82})$$

On montre à présent que la fonction Ψ^r est orthogonale aux invariants de collision scalaires. On rappelle que

$$\begin{aligned} \Psi_i^r &= \frac{\widetilde{\Psi}_i^r}{f_i^0} - \frac{\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f}{\mathbf{n}_i} \\ &\quad - \frac{1}{p \mathbf{c}_v T} \left(\sum_{j \in S} \left(\frac{3}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_j \right) (\nu_{jr}^b - \nu_{jr}^f) \right) \left(\frac{3}{2} k_B T - \frac{\mathbf{m}_i}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \overline{\mathcal{E}}_i - \mathcal{E}_{i1} \right), \end{aligned}$$

avec

$$\tilde{\Psi}_i^r = \frac{1}{\mathcal{K}_r} \left(-\nu_{ir}^f \sum_{\mathbf{F}_i^r, \mathbf{B}^r} \int \mathfrak{D}_r \prod_{\mathcal{F}_i^r} d\mathbf{c}_j \prod_{\mathcal{B}^r} d\mathbf{c}_k + \nu_{ir}^b \sum_{\mathbf{F}^r, \mathbf{B}_i^r} \int \mathfrak{D}_r \prod_{\mathcal{F}^r} d\mathbf{c}_j \prod_{\mathcal{B}_i^r} d\mathbf{c}_k \right).$$

- On montre que $\langle\langle f^0 \Psi^r, \psi^i \rangle\rangle = 0$, $i \in \{1, \dots, n^s\}$.

Soit $i \in \mathbf{S}$. On a, après un calcul rapide,

$$\sum_{i \in \Omega_i} \int f_i^0 \frac{\tilde{\Psi}_i^r}{f_i^0} d\mathbf{c}_i = -\nu_{ir}^f + \nu_{ir}^b,$$

$$\sum_{i \in \Omega_i} \int f_i^0 \frac{\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f}{\mathbf{n}_i} d\mathbf{c}_i = -\nu_{ir}^f + \nu_{ir}^b$$

et

$$\sum_{i \in \Omega_i} \int f_i^0 \left(\frac{3}{2} k_B T - \frac{\mathbf{m}_i}{2} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \overline{\mathcal{E}}_i - \mathcal{E}_{i1} \right) d\mathbf{c}_i = 0.$$

On en déduit alors que pour tout $i \in \{1, \dots, n^s\}$, $\langle\langle f^0 \Psi^r, \psi^i \rangle\rangle = 0$.

- On montre que $\langle\langle f^0 \Psi^r, \psi^{n^s+\nu} \rangle\rangle = 0$, $\nu \in \{1, 2, 3\}$.

Soit $\nu \in \{1, 2, 3\}$. Grâce à ce qui précède, on déduit

$$\sum_{\substack{i \in \mathbf{S} \\ i \in \Omega_i}} \int f_i^0 \Psi_i^r \mathbf{m}_i C_{i\nu} d\mathbf{c}_i = \sum_{\substack{i \in \mathbf{S} \\ i \in \Omega_i}} \int f_i^0 \Psi_i^r \mathbf{m}_i C_{i\nu} d\mathbf{c}_i.$$

Or cette dernière intégrale est nulle car la fonction Ψ_i^r est paire en la variable $\mathbf{C}_i$.

- On montre que $\langle\langle f^0 \Psi^r, \psi^{n^s+4} \rangle\rangle = 0$.

On commence par montrer que $\langle\langle \tilde{\Psi}^r, \psi^{n^s+4} \rangle\rangle = 0$. On a

$$\langle\langle \tilde{\Psi}^r, \psi^{n^s+4} \rangle\rangle = \sum_{i \in \mathbf{S}} \frac{\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f}{\mathcal{K}_r} \sum_{\mathbf{F}^r, \mathbf{B}^r} \int \prod_{j \in \mathcal{F}^r} f_j^0 \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{i1} \right) \mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r} \prod_{j \in \mathcal{F}^r} d\mathbf{c}_j \prod_{k \in \mathcal{B}^r} d\mathbf{c}_k,$$

avec

$$\widetilde{\mathcal{K}}_r = \mathcal{K}_r \prod_{j \in \mathcal{F}^r} \frac{\mathbf{n}_j \left(\frac{\mathbf{m}_j}{2\pi k_B T} \right)^{3/2}}{\sum_{j \in \Omega_j} \frac{1}{\beta_{j1}} \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_{j1}}{k_B T} \right)}.$$

Or

$$\frac{1}{\mathcal{K}_r} \sum_{\mathbf{F}^r, \mathbf{B}^r} \int \prod_{j \in \mathcal{F}^r} f_j^0 \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{il} \right) \mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{\mathbf{F}^r \mathbf{B}^r} \prod_{j \in \mathcal{F}^r} d\mathbf{c}_j \prod_{k \in \mathcal{B}^r} d\mathbf{c}_k$$

s'interprète comme la production d'énergie dans la réaction r correspondant aux particules de type i . Ainsi, $\langle \langle \tilde{\Psi}^r, \psi^{n^s+4} \rangle \rangle = 0$, par conservation de l'énergie dans la réaction r .

Il reste à montrer que les contributions des deux autres termes s'annulent. Les deux résultats suivants le montrent :

$$\sum_{\substack{i \in \mathcal{S} \\ I \in \Omega_i}} \int f_i^0 \frac{\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f}{n_i} \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{il} \right) d\mathbf{c}_i = \sum_{i \in \mathcal{S}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \left(\frac{3}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}_i} \right)$$

et

$$\sum_{\substack{i \in \mathcal{S} \\ I \in \Omega_i}} \int f_i^0 \left(\frac{3}{2} k_B T - \frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \overline{\mathcal{E}_i} - \mathcal{E}_{il} \right) \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \mathcal{E}_{il} \right) d\mathbf{c}_i = -n \mathbf{c}_v k_B T^2.$$

On a donc montré que la fonction Ψ^r vérifie les contraintes scalaires et les équations (I.82) (I.81b) sont donc bien posées [FK72].

I.6.5 Equations macroscopiques d'ordre un

Dans cette partie, on étudie les équations macroscopiques d'ordre un pour les mélanges de gaz polyatomiques dans le régime $b = 1$. Plus précisément, on étudie les équations de conservation, les flux de transport, les coefficients de transport, les relations thermodynamiques et le terme source chimique. On s'intéresse en particulier à la structure et aux propriétés des matrices de diffusion et des matrices de transport de chaleur et de masse multiespèces qui en résultent. Ces propriétés sont fondamentales pour étudier la production macroscopique d'entropie. De plus, ces propriétés, établies ici pour les matrices exactes issues de la théorie cinétique des gaz, ont un rôle important dans l'étude des approximations numériques de la diffusion multiespèces.

I.6.5.1 Equations de conservation d'ordre un

Les équations macroscopiques de conservation d'ordre un sont obtenues en effectuant le produit scalaire de l'équation de Boltzmann par les invariants de collision et en gardant les termes d'ordre zéro et d'ordre un en ϵ .

En substituant le développement (I.16) des fonctions f_i dans l'équation (I.19)

$$\langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f) \rangle\rangle + \frac{1}{\epsilon} \langle\langle \psi^l, \hat{\mathcal{D}}(f) \rangle\rangle = \epsilon^a \langle\langle \psi^l, \mathcal{C}(f) \rangle\rangle, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\},$$

on obtient

$$\frac{1}{\epsilon} \langle\langle \psi^l, \hat{\mathcal{D}}(f^0) \rangle\rangle + \langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f^0) + \hat{\mathcal{D}}(f^0 \phi) \rangle\rangle + \epsilon \langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f^0 \phi) \rangle\rangle = \epsilon^a \langle\langle \psi^l, \mathcal{C}(f) \rangle\rangle, \quad (I.83)$$

pour $l \in \{1, \dots, n^s + 4\}$.

D'après (I.21), on a $\hat{\mathcal{D}}(f^0) = 0$. De plus, on peut écrire

$$\mathcal{C}_i(f) = \mathcal{C}_i(f^0) + \epsilon \partial_f \mathcal{C}_i(f^0) f^0 \phi + \mathcal{O}(\epsilon^2),$$

avec la notation

$$\partial_f \mathcal{C}_i(f^0) f^0 \phi = \sum_{j \in S} \partial_{f_j} \mathcal{C}_i(f^0) f_j^0 \phi_j. \quad (I.84)$$

On obtient donc en ne gardant que les termes en ϵ^0 et ϵ

$$\langle\langle \psi^l, \tilde{\mathcal{D}}(f^0) + \tilde{\mathcal{D}}(f^0 \phi) + \hat{\mathcal{D}}(f^0 \phi) \rangle\rangle = \langle\langle \psi^l, \mathcal{C}(f^0) + \delta_{a0} \partial_f \mathcal{C}(f^0) f^0 \phi \rangle\rangle,$$

pour $l \in \{1, \dots, n^s + 4\}$, avec $\partial_f \mathcal{C}(f^0) f^0 \phi = (\partial_f \mathcal{C}_i(f^0) f^0 \phi)_{i \in S}$.

On en déduit les équations de bilan macroscopiques d'ordre un. Les n^s premières équations correspondent aux équations de conservation de la masse des espèces,

$$\partial_t \rho_i + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_i \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_i \mathbf{V}_i) = \mathbf{m}_i \overline{\omega}_i, \quad i \in S, \quad (I.85a)$$

où $\mathbf{V}_i$ est la vitesse de diffusion de l'espèce i donnée par

$$\mathbf{V}_i = \frac{1}{\mathbf{n}_i} \sum_{i \in \Omega_i} \int \mathbf{C}_i f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i, \quad i \in S, \quad (I.85b)$$

et $\overline{\omega}_i$ le terme de production chimique dont l'expression est

$$\overline{\omega}_i = \sum_{i \in \Omega_i} \int (\mathcal{C}_i(f^0) + \delta_{a0} \partial_f \mathcal{C}_i(f^0) f^0 \phi) d\mathbf{c}_i, \quad i \in S. \quad (I.85c)$$

L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit

$$\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbb{I}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \Pi = \rho \mathbf{g} + q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}) + \mathbf{j} \wedge \mathbf{B}, \quad (I.85d)$$

où $\boldsymbol{\Pi}$ est le tenseur de viscosité qui s'écrit

$$\boldsymbol{\Pi} = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i, \quad (\text{I.85e})$$

et $\mathbf{j}$ la densité de courant de conduction

$$\mathbf{j} = \sum_{i \in S} \rho_i z_i \mathbf{V}_i. \quad (\text{I.85f})$$

Enfin l'équation de conservation de l'énergie est

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E} \right) + \boldsymbol{\partial}_x \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E} + p \right) \mathbf{v} \right] + \boldsymbol{\partial}_x \cdot (\mathbf{Q} + \boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{v}) \\ = [\rho \mathbf{g} + q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})] \cdot \mathbf{v} + \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}, \end{aligned} \quad (\text{I.85g})$$

où $\boldsymbol{\Pi}$ est le tenseur de viscosité et $\mathbf{Q}$ le flux de chaleur donné par

$$\mathbf{Q} = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \mathcal{E}_{iI} \right) \mathbf{c}_i f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i. \quad (\text{I.85h})$$

En multipliant les équations (I.85a)_{*i*} par z_i et en sommant sur $i \in S$, on obtient l'équation de conservation de la charge

$$\partial_t(q) + \boldsymbol{\partial}_x \cdot (q\mathbf{v}) + \boldsymbol{\partial}_x \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (\text{I.86})$$

car $\sum_{i \in S} z_i \mathbf{m}_i \overline{\omega_i} = 0$, ce qui traduit l'absence de production de charge dans les réactions chimiques.

On note qu'il devrait y avoir un terme supplémentaire dans le membre de gauche de l'équation (I.83) qui s'écrit $\langle\langle \psi^l, \widehat{\mathcal{D}}(f^0 \phi^{(2)}) \rangle\rangle$, où $\phi^{(2)}$ est la contribution d'ordre deux dans le développement de Enskog de f , mais ce terme est habituellement négligé sans que son existence soit notifiée. La forme de sa contribution serait $\mathbf{j}^{(2)} \wedge \mathbf{B}$ dans le membre de droite de l'équation de conservation de la quantité de mouvement (I.85d) et $\mathbf{j}^{(2)} \cdot (\mathbf{B} \wedge \mathbf{v})$ dans celui de l'équation de conservation de l'énergie (I.85g), où $\mathbf{j}^{(2)}$ est le courant d'ordre deux [CD69]. Comme la charge converge habituellement rapidement vers zéro dans les fluides réactifs ionisés globalement neutres, il est usuel de négliger ce courant du second ordre.

I.6.5.2 Expressions des vitesses de diffusion V_i

D'après l'équation (I.85b), en rappelant que $p_k = n_k k_B T$, $k \in S$, on a

$$\mathbf{V}_i = \frac{k_B T}{p_i} \sum_{i \in \Omega_i} \int \mathbf{C}_i f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i, \quad i \in S.$$

En utilisant la relation (I.42e), $\Psi_i^{D_j} = (\delta_{ij} - \rho_i/\rho) \mathbf{C}_i/p_i$, on obtient

$$\mathbf{V}_i = k_B T \langle \langle \Psi_i^{D_j}, f^0 \phi \rangle \rangle + \frac{k_B T}{\rho} \sum_{\substack{j \in S \\ j \in \Omega_j}} \int \mathbf{m}_j \mathbf{C}_j f_j^0 \phi_j d\mathbf{c}_j.$$

La famille $(\mathbf{m}_j \mathbf{C}_j)_{j \in S}$ étant un invariant de collision vectoriel, le deuxième terme de cette expression disparaît. La vitesse de diffusion peut alors se récrire

$$\mathbf{V}_i = k_B T \langle \langle \Psi_i^{D_i}, f^0 \phi \rangle \rangle, \quad i \in S. \quad (\text{I.87})$$

On substitue alors le développement (I.43) des fonctions ϕ_i dans l'expression précédente. Les fonctions $\Psi_j^{D_i}$ pour $i, j \in S$ sont des vecteurs de $\mathbb{R}^3$, ainsi que les fonctions $\phi_j^{D_i}$ et $\phi_j^{\hat{\lambda}}$, tandis que les fonctions ϕ_j^η sont des tenseurs d'ordre deux à trace nulle et les fonctions ϕ_j^κ et ϕ_j^r des fonctions scalaires isotropes. Il en résulte que le produit scalaire de ϕ avec Ψ^{D_i} ne fait intervenir que les fonctions $\phi_j^{D_i}$ et $\phi_j^{\hat{\lambda}}$. La vérification ne présente pas de difficulté et pourra être trouvée dans le livre [FK72] en annexe. On obtient donc

$$\mathbf{V}_i = -k_B T \sum_{j \in S} \langle \langle \Psi_i^{D_i}, p f^0 \phi^{D_j} \cdot \mathbf{d}_j \rangle \rangle - k_B T \langle \langle \Psi_i^{D_i}, f^0 \phi^{\hat{\lambda}} \cdot \partial_x (\frac{1}{k_B T}) \rangle \rangle.$$

En utilisant les équations (I.63) pour les variables $\varphi^{D_i(1)}$ et $\varphi^{D_i(2)}$ et la relation (I.62) liant les fonctions ϕ^{D_j} et $\varphi^{D_j(1)}$ et $\varphi^{D_j(2)}$, on obtient

$$\begin{aligned} \langle \langle \Psi_i^{D_i}, f^0 \phi^{D_j} \cdot \mathbf{d}_j \rangle \rangle &= \left[\sum_{k \in S} \int f_k^0 \mathcal{F}_k^{\mathcal{S}} (\varphi^{D_i(1)})_{\otimes} \mathbf{M}^{\parallel} \varphi_k^{D_j(1)} d\mathbf{c}_k \right] \mathbf{d}_j \\ &+ \Re \left[\sum_{k \in S} \int f_k^0 (\mathcal{F}_k^{\mathcal{S}} + \mathbf{i} B \mathcal{F}_k^{q^1}) (\varphi^{D_i(2)})_{\otimes} (\mathbf{M}^{\perp} - \mathbf{i} \mathbf{M}^{\odot}) \varphi_k^{D_j(2)} d\mathbf{c}_k \right] \mathbf{d}_j, \end{aligned}$$

où les matrices $\mathbf{M}^{\parallel}$, $\mathbf{M}^{\perp}$ et $\mathbf{M}^{\odot}$ sont les matrices carrées de taille trois définies par

$$\mathbf{M}^{\parallel} = \mathcal{B}_{\otimes} \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^{\perp} = \mathbb{I} - \mathcal{B}_{\otimes} \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^{\odot} = \mathbf{R}(\mathcal{B}),$$

on renvoie à l'annexe I.10 pour plus de détails. Enfin, l'isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé, $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$, Annexe I.9, et celle de l'opérateur $\mathcal{F}^{q^1}$, permettent de récrire les termes $\langle\langle \Psi^{D_i}, f^0 \phi^{D_j} \cdot \mathbf{d}_j \rangle\rangle$, $i, j \in S$, sous la forme

$$\begin{aligned} \langle\langle \Psi^{D_i}, f^0 \phi^{D_j} \cdot \mathbf{d}_j \rangle\rangle &= \frac{1}{3} \Re \left(\llbracket \varphi^{D_i(1)}, \varphi^{D_j(1)} \rrbracket \mathbf{M}^{\parallel} + \right. \\ &\quad \left. (\llbracket \varphi^{D_i(2)}, \varphi^{D_j(2)} \rrbracket + \mathbf{i} (\langle\langle \varphi^{D_i(2)}, \varphi^{D_j(2)} \rangle\rangle)) (\mathbf{M}^{\perp} - \mathbf{i} \mathbf{M}^{\odot}) \right) \mathbf{d}_j, \end{aligned}$$

où l'on a défini le produit $((.,.))$ par

$$((\xi, \zeta)) = B \sum_{i \in S} z_i \int f_i^0 \xi_i \odot \bar{\zeta}_i d\mathbf{c}_i, \quad (\text{I.88})$$

pour $\xi = (\xi_i)_{i \in S}$ et $\zeta = (\zeta_i)_{i \in S}$ des fonctions de $\mathbf{c}_i$ et de $\mathbf{l}$.

En effectuant le même calcul sur le terme $\langle\langle \Psi^{D_i}, f^0 \phi^{\hat{\lambda}} \cdot \partial_{\mathbf{x}} (\frac{1}{k_B T}) \rangle\rangle$, on récrit les vitesses de diffusion $\mathbf{V}_i$, $i \in S$, sous la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_i &= - \sum_{j \in S} \left(D_{ij}^{\parallel} \mathbf{d}_j^{\parallel} + D_{ij}^{\perp} \mathbf{d}_j^{\perp} + D_{ij}^{\odot} \mathbf{d}_j^{\odot} \right) \\ &\quad - \left(\theta_i^{\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\parallel} + \theta_i^{\perp} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\perp} + \theta_i^{\odot} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\odot} \right), \quad (\text{I.89}) \end{aligned}$$

où les coefficients de transport $D_{ij}^{\parallel}$, $D_{ij}^{\perp}$, $D_{ij}^{\odot}$, $i, j \in S$, $\theta_i^{\parallel}$, $\theta_i^{\perp}$ et $\theta_i^{\odot}$, $i \in S$, sont définis par

$$D_{ij}^{\parallel} = \frac{1}{3} p k_B T \llbracket \varphi^{D_i(1)}, \varphi^{D_j(1)} \rrbracket, \quad (\text{I.90a})$$

$$D_{ij}^{\perp} + \mathbf{i} D_{ij}^{\odot} = \frac{1}{3} p k_B T (\llbracket \varphi^{D_i(2)}, \varphi^{D_j(2)} \rrbracket + \mathbf{i} (\langle\langle \varphi^{D_i(2)}, \varphi^{D_j(2)} \rangle\rangle)), \quad (\text{I.90b})$$

et

$$\theta_i^{\parallel} = -\frac{1}{3} \llbracket \varphi^{D_i(1)}, \varphi^{\hat{\lambda}(1)} \rrbracket, \quad (\text{I.90c})$$

$$\theta_i^{\perp} + \mathbf{i} \theta_i^{\odot} = -\frac{1}{3} (\llbracket \varphi^{D_i(2)}, \varphi^{\hat{\lambda}(2)} \rrbracket + \mathbf{i} (\langle\langle \varphi^{D_i(2)}, \varphi^{\hat{\lambda}(2)} \rangle\rangle)), \quad (\text{I.90d})$$

et les vecteurs $\mathbf{d}_j^{\parallel}$, $\mathbf{d}_j^{\perp}$ et $\mathbf{d}_j^{\odot}$, $j \in S$, sont définis à partir des vecteurs $\mathbf{d}_j$, $j \in S$, par

$$\mathbf{d}_j^{\parallel} = \mathcal{B} \cdot \mathbf{d}_j \mathcal{B}, \quad \mathbf{d}_j^{\perp} = \mathbf{d}_j - \mathcal{B} \cdot \mathbf{d}_j \mathcal{B}, \quad \mathbf{d}_j^{\odot} = \mathcal{B} \wedge \mathbf{d}_j.$$

On note que la contribution due au produit scalaire $((.,.))$ dans les expressions des coefficients de transport $D^{\perp}$, $D^{\odot}$, $\theta^{\perp}$ et $\theta^{\odot}$ n'apparaît pas dans [FK72]. En séparant partie réelle et partie imaginaire dans les expressions (I.90b) et (I.90d), et en

effectuant le produit scalaire $\langle\langle f^0, \cdot \rangle\rangle$ de la partie imaginaire des équations (I.54b) et (I.63b) avec la famille de fonctions $\varphi^{D_i(2)}$, $i \in S$, ce qui fournit les relations

$$\begin{aligned} \llbracket \Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Re \varphi^{D_i(2)} \rrbracket + ((\Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Re \varphi^{D_i(2)})) &= 0, & i \in S, \\ \llbracket \Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Im \varphi^{D_i(2)} \rrbracket + ((\Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Im \varphi^{D_i(2)})) &= 0, & i \in S, \\ \llbracket \Im \varphi^{D_j(2)}, \Re \varphi^{D_i(2)} \rrbracket + ((\Re \varphi^{D_j(2)}, \Re \varphi^{D_i(2)})) &= 0, & i, j \in S, \\ \llbracket \Im \varphi^{D_j(2)}, \Im \varphi^{D_i(2)} \rrbracket + ((\Re \varphi^{D_j(2)}, \Im \varphi^{D_i(2)})) &= 0, & i, j \in S, \end{aligned}$$

on obtient

$$D_{ij}^\perp = \frac{1}{3} p k_B T \left(\llbracket \Re \varphi^{D_i(2)}, \Re \varphi^{D_j(2)} \rrbracket + \llbracket \Im \varphi^{D_i(2)}, \Im \varphi^{D_j(2)} \rrbracket \right), \quad (\text{I.90e})$$

$$D_{ij}^\odot = \frac{1}{3} p k_B T \left(((\Re \varphi^{D_i(2)}, \Re \varphi^{D_j(2)})) + ((\Im \varphi^{D_i(2)}, \Im \varphi^{D_j(2)})) \right), \quad (\text{I.90f})$$

et

$$\theta_i^\perp = -\frac{1}{3} \left(\llbracket \Re \varphi^{D_i(2)}, \Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)} \rrbracket + \llbracket \Im \varphi^{D_i(2)}, \Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)} \rrbracket \right), \quad (\text{I.90g})$$

$$\theta_i^\odot = -\frac{1}{3} \left(((\Re \varphi^{D_i(2)}, \Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)})) + ((\Im \varphi^{D_i(2)}, \Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)})) \right). \quad (\text{I.90h})$$

En définissant les coefficients de transport tensoriels D_{ij} , $i, j \in S$, et θ_i , $i \in S$, par

$$D_{ij} = D_{ij}^\parallel M^\parallel + D_{ij}^\perp M^\perp + D_{ij}^\odot M^\odot, \quad (\text{I.91a})$$

$$\theta_i = \theta_i^\parallel M^\parallel + \theta_i^\perp M^\perp + \theta_i^\odot M^\odot, \quad (\text{I.91b})$$

on obtient une formulation compacte des vitesses de diffusion

$$V_i = - \sum_{j \in S} D_{ij} d_j - \theta_i \partial_x \log T. \quad (\text{I.92})$$

On remarque qu'il est également possible de donner des formulations des vitesses de diffusion utilisant les nombres complexes. Ces formulations sont plus compactes mais alourdissent les notations. Comme elles ne sont pas indispensables à la compréhension des calculs, on a choisi de les mettre dans l'annexe I.10.

On s'intéresse à présent aux propriétés des matrices de diffusion multiespèces $D^\parallel = (D_{ij}^\parallel)_{i,j \in S}$, $D^\perp = (D_{ij}^\perp)_{i,j \in S}$ et $D^\odot = (D_{ij}^\odot)_{i,j \in S}$. Ces propriétés sont fondamentales pour établir la positivité de la production d'entropie macroscopique ainsi que pour évaluer efficacement les coefficients de transport lors de simulations numériques multiespèces.

On notera $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$ le produit scalaire euclidien des deux vecteurs $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n^s}$, ou plus généralement le produit scalaire hermitien des deux vecteurs $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^{n^s}$ et on introduit le vecteur masse $\varrho = (\rho_i)_{i \in S}$. En utilisant les propriétés de l'opérateur crochet, les contraintes linéaires (I.68) sur les fonctions $\varphi^{D_j(1)}$, $\varphi^{D_j(2)}$, $j \in S$, et les relations

$$\langle D^{\parallel} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{3} p k_B T \left[\sum_{i \in S} \varphi^{D_i(1)} \mathbf{x}_i, \sum_{i \in S} \varphi^{D_i(1)} \mathbf{x}_i \right], \quad (\text{I.93a})$$

$$\langle D^{\perp} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{3} p k_B T \left(\left[\sum_{i \in S} \Re \varphi^{D_i(2)} \mathbf{x}_i, \sum_{i \in S} \Re \varphi^{D_i(2)} \mathbf{x}_i \right] + \left[\sum_{i \in S} \Im \varphi^{D_i(2)} \mathbf{x}_i, \sum_{i \in S} \Im \varphi^{D_i(2)} \mathbf{x}_i \right] \right), \quad (\text{I.93b})$$

pour $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n^s}$, on établit, comme dans le cas non ionisé [Gio99], que les matrices $D^{\parallel}$ et $D^{\perp}$ sont symétriques réelles semi-définies positives et leur noyau sont engendrés par le vecteur $\varrho \in \mathbb{R}^{n^s}$. Par ailleurs, la matrice $D^{\odot}$ est une matrice symétrique et son noyau contient le vecteur $\varrho \in \mathbb{R}^{n^s}$. On en déduit que le noyau de la matrice complexe $D^{\perp} + iD^{\odot}$ est engendré par le vecteur $\varrho \in \mathbb{C}^{n^s}$ et que son image est le sous-espace de $\mathbb{C}^{n^s}$ orthogonal, au sens hermitien, à ϱ . On remarque que la matrice $D^{\odot}$ ne possède pas de propriété de positivité particulière, et seule les matrices $D^{\parallel}$ et $D^{\perp}$ sont utilisées pour établir la positivité de la production d'entropie.

Finalement, en utilisant à nouveau les contraintes scalaires (I.68) et la définition des coefficients de diffusion thermique (I.90c), (I.90d), on obtient facilement que

$$\langle \theta^{\parallel}, \varrho \rangle = 0, \quad \langle \theta^{\perp}, \varrho \rangle = 0, \quad \langle \theta^{\odot}, \varrho \rangle = 0, \quad (\text{I.94})$$

où l'on a défini les vecteurs $\theta^{\parallel} = (\theta_i^{\parallel})_{i \in S}$, $\theta^{\perp} = (\theta_i^{\perp})_{i \in S}$ et $\theta^{\odot} = (\theta_i^{\odot})_{i \in S}$.

On déduit de ces propriétés sur les coefficients de transport que

$$\sum_{i \in S} \rho_i \mathbf{V}_i = 0. \quad (\text{I.95})$$

On introduit alors les taux de diffusion thermique $\chi^{\parallel} = (\chi_i^{\parallel})_{i \in S}$, $\chi^{\perp} = (\chi_i^{\perp})_{i \in S}$ et $\chi^{\odot} = (\chi_i^{\odot})_{i \in S}$, définis à partir des systèmes linéaires

$$\begin{cases} D^{\parallel} \chi^{\parallel} = \theta^{\parallel}, \\ \langle \chi^{\parallel}, \mathbf{u} \rangle = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} (D^{\perp} + iD^{\odot}) (\chi^{\perp} + i\chi^{\odot}) = \theta^{\perp} + i\theta^{\odot}, \\ \langle \chi^{\perp} + i\chi^{\odot}, \mathbf{u} \rangle = 0, \end{cases} \quad (\text{I.96})$$

où $\mathbf{u}$ est le vecteur unitaire de taille n^s , $\mathbf{u} = (1)_{i \in S}$. A partir de ces définitions, on obtient après quelques calculs une nouvelle expression des vitesses de diffusion $\mathbf{V}_i$,

$i \in S$,

$$\begin{aligned}
V_i = & - \sum_{j \in S} D_{ij}^{\parallel} \left(\mathbf{d}_j^{\parallel} + \chi_j^{\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\parallel} \right) \\
& - \sum_{j \in S} D_{ij}^{\perp} \left(\mathbf{d}_j^{\perp} + \chi_j^{\perp} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\perp} + \chi_j^{\odot} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\odot} \right) \\
& - \sum_{j \in S} D_{ij}^{\odot} \left(\mathbf{d}_j^{\odot} + \chi_j^{\perp} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\odot} - \chi_j^{\odot} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\perp} \right). \tag{I.97}
\end{aligned}$$

Une autre définition des taux de diffusion thermique $\chi^{\perp}$ et $\chi^{\odot}$ est proposée par Ferziger et Kaper [FK72]. Cette définition est de la forme

$$\begin{cases} D^{\perp} \chi^{\perp} = \theta^{\perp}, & D^{\odot} \chi^{\odot} = \theta^{\odot}, \\ \langle \chi^{\perp}, \mathbf{u} \rangle = 0, & \langle \chi^{\odot}, \mathbf{u} \rangle = 0. \end{cases}$$

Il y a cependant plusieurs difficultés associées à cette définition. Tout d'abord, le système linéaire $D^{\odot} \mathbf{x} = 0$, $\langle \mathbf{x}, \mathbf{u} \rangle = 0$ n'est pas toujours bien posé. Par exemple, lorsque le champ magnétique $\mathbf{B}$ tend vers zéro, la matrice $D^{\odot}$ tend vers la matrice nulle et la contrainte $\langle \chi^{\odot}, \mathbf{u} \rangle = 0$ est insuffisante pour déterminer que $\chi^{\odot} = 0$. De plus, les projections $\mathbf{d}_i^{\perp}$ et $(\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\perp}$ des vecteurs $\mathbf{d}_i$ et $\partial_{\mathbf{x}} \log T$ ne sont pas nécessairement colinéaires, il semble donc artificiel d'essayer de les regrouper avec un même coefficient. En revanche, les systèmes (I.96) sont toujours bien posés puisque le vecteur $\theta^{\parallel}$, respectivement $\theta^{\perp} + \mathbf{i} \theta^{\odot}$, est dans l'image de la matrice $D^{\parallel}$, respectivement $D^{\perp} + \mathbf{i} D^{\odot}$, et le vecteur $\mathbf{u}$ est dans le complémentaire du noyau de la matrice $D^{\parallel}$, respectivement $D^{\perp} + \mathbf{i} D^{\odot}$. Par exemple, lorsque le champ magnétique $\mathbf{B}$ tend vers zéro, on obtient $\Im(\varphi^{\hat{\lambda}(2)}) = 0$ et $\Im(\varphi^{D_i(2)}) = 0$, et donc $\theta^{\odot} = 0$ et $D^{\odot} = 0$, ce qui implique directement que $D^{\perp} \chi^{\odot} = 0$ et enfin que $\chi^{\odot} = 0$ grâce à la relation $\langle \chi^{\odot}, \mathbf{u} \rangle = 0$.

On s'intéresse à présent à la dépendance des coefficients de transport vis à vis du champ magnétique. En utilisant les développements (I.65) des fonctions $\varphi_i^{D_j(2)}$, on peut développer les coefficients de transport $D_{ij}^{\parallel}$, $D_{ij}^{\perp}$, $D_{ij}^{\odot}$, $i, j \in S$, sous la forme

$$D_{ij}^{\parallel} = D_{ij}^0, \tag{I.98a}$$

$$D_{ij}^{\perp} = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N} D_{ij}^{2N}, \tag{I.98b}$$

$$D_{ij}^{\odot} = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N+1} D_{ij}^{2N+1}, \tag{I.98c}$$

où les coefficients D_{ij}^N , $i, j \in S$, $N \in \mathbb{N}$, sont définis par

$$D_{ij}^{2N} = (-1)^N \frac{1}{3} p_{\text{KB}} T \left(\sum_{n+m=2N} (-1)^m [\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{D_j}] + \sum_{n+m=2N-1} (-1)^m ((\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{D_j})) \right),$$

$$D_{ij}^{2N+1} = (-1)^N \frac{1}{3} p_{\text{KB}} T \left(\sum_{n+m=2N+1} (-1)^m [\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{D_j}] + \sum_{n+m=2N} (-1)^m ((\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{D_j})) \right),$$

où les fonctions $\varphi_{.,n}^{D_j}$, $j \in S$, $n \in \mathbb{N}$, ne dépendent pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. On en déduit qu'il existe des fonctions régulières $\phi_{ij}^\perp$, $\phi_{ij}^\odot$, $i, j \in S$, telles que

$$D_{ij}^\perp - D_{ij}^\parallel = B^2 \phi_{ij}^\perp(B^2), \quad D_{ij}^\odot = B \phi_{ij}^\odot(B^2).$$

De même, en utilisant les développements (I.56) des fonctions $\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)}$, on peut développer les coefficients de transport $\theta_i^\parallel$, $\theta_i^\perp$, $\theta_i^\odot$, $i \in S$, sous la forme

$$\theta_i^\parallel = \theta_i^0, \quad (\text{I.99a})$$

$$\theta_i^\perp = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N} \theta_i^{2N}, \quad (\text{I.99b})$$

$$\theta_i^\odot = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N+1} \theta_i^{2N+1}, \quad (\text{I.99c})$$

où les coefficients θ_i^N , $i \in S$, $N \in \mathbb{N}$, sont définis par

$$\theta_i^{2N} = \frac{1}{3} (-1)^{N+1} \left(\sum_{n+m=2N} (-1)^m [\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{\hat{\lambda}}] + \sum_{n+m=2N-1} (-1)^m ((\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{\hat{\lambda}})) \right),$$

$$\theta_i^{2N+1} = \frac{1}{3} (-1)^{N+1} \left(\sum_{n+m=2N+1} (-1)^m [\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{\hat{\lambda}}] + \sum_{n+m=2N} (-1)^m ((\varphi_{.,n}^{D_i}, \varphi_{.,m}^{\hat{\lambda}})) \right),$$

où les fonctions $\varphi_{.,n}^{D_i}$, $i \in S$, $\varphi_{.,n}^{\hat{\lambda}}$, $n \in \mathbb{N}$, ne dépendent pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. On en déduit qu'il existe des fonctions régulières $\vartheta_i^\perp$, $\vartheta_i^\odot$, $i \in S$, telles que

$$\theta_i^\perp - \theta_i^\parallel = B^2 \vartheta_i^\perp(B^2), \quad \theta_i^\odot = B \vartheta_i^\odot(B^2).$$

En utilisant ces développements des coefficients de transport et les systèmes linéaires (I.96) définissant les coefficients $\chi_i^\parallel$, $\chi_i^\perp$, $\chi_i^\odot$, $i \in S$, on obtient le développement suivant

$$\chi_i^\parallel = \chi_i^0, \quad (\text{I.100a})$$

$$\chi_i^\perp = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N} \chi_i^{2N}, \quad (\text{I.100b})$$

$$\chi_i^\odot = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N+1} \chi_i^{2N+1}, \quad (\text{I.100c})$$

où les coefficients χ_i^N , $i \in S$, $N \in \mathbb{N}$, sont définis par les systèmes récurrents

$$\begin{cases} \sum_{j \in S} D_{ij}^0 \chi_j^N = \theta_i^N - \sum_{n=0}^{N-1} (-1)^{n(N+1)} \sum_{j \in S} D_{ij}^{N-n} \chi_j^n, \\ \sum_{j \in S} \chi_j^N = 0. \end{cases}$$

Ces systèmes définissent les coefficients χ_i^N , $i \in S$, $N \in \mathbb{N}$, de manière unique d'après l'étude de la matrice $D^0 = D^\parallel$ et on obtient de plus qu'ils ne dépendent pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. On en déduit enfin qu'il existe des fonctions régulières $\psi_i^\perp$, $\psi_i^\odot$, $i \in S$, telles que

$$\chi_i^\perp - \chi_i^\parallel = B^2 \psi_i^\perp(B^2), \quad \chi_i^\odot = B \psi_i^\odot(B^2).$$

Finalement, à partir des expressions des vitesses de diffusion, on peut directement exprimer la densité de courant de conduction du premier ordre $\mathbf{j}$ en fonction des gradients des variables macroscopiques, du champ électrique et du champ magnétique. Après quelques calculs, on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & - \sum_{i \in S} (\sigma_i^\parallel \mathbf{d}_i'^\parallel + \sigma_i^\perp \mathbf{d}_i'^\perp + \sigma_i^\odot \mathbf{d}_i'^\odot) \\ & + \sigma^\parallel (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})^\parallel + \sigma^\perp (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})^\perp + \sigma^\odot (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})^\odot \\ & - \sigma_T^\parallel (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^\parallel - \sigma_T^\perp (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^\perp - \sigma_T^\odot (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^\odot, \end{aligned} \quad (\text{I.101})$$

où l'on a défini les vecteurs $\mathbf{d}_i' = (\partial_{\mathbf{x}} p_i - \rho_i \mathbf{g})/p$ et les conductivités électriques $\sigma^\diamond$, $\diamond \in \{\parallel, \perp, \odot\}$, les conductivités électro-thermiques $\sigma_T^\diamond$, et les conductivités d'électro-diffusion $\sigma_i^\diamond$, $i \in S$, $\diamond \in \{\parallel, \perp, \odot\}$, par

$$\sigma^\diamond = \frac{1}{p} \sum_{i,j \in S} D_{ij}^\diamond q_i q_j, \quad \sigma_T^\diamond = \sum_{i \in S} \theta_i^\diamond q_i, \quad \sigma_i^\diamond = \sum_{j \in S} D_{ji}^\diamond q_j.$$

I.6.5.3 Expression du flux de chaleur $\mathcal{Q}$

En utilisant la définition (I.85h) du flux de chaleur

$$\mathcal{Q} = \sum_{\substack{i \in S \\ 1 \in \Omega_i}} \int \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \varepsilon_{ii} \right) \mathbf{c}_i f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i,$$

et l'expression (I.42f) de $\Psi^{\hat{\lambda}}$, on obtient

$$\mathcal{Q} = -\langle \Psi^{\hat{\lambda}}, f_i^0 \phi \rangle + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}_i} \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i.$$

Le même calcul que dans la section consacrée aux vitesses de diffusion $\mathbf{V}_i$, $i \in S$, permet de mettre le flux de chaleur $\mathcal{Q}$ sous la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} = & -\hat{\lambda}^{\parallel} (\partial_x T)^{\parallel} - \hat{\lambda}^{\perp} (\partial_x T)^{\perp} - \hat{\lambda}^{\odot} (\partial_x T)^{\odot} \\ & - p \sum_{i \in S} (\theta_i^{\parallel} \mathbf{d}_i^{\parallel} + \theta_i^{\perp} \mathbf{d}_i^{\perp} + \theta_i^{\odot} \mathbf{d}_i^{\odot}) + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}_i} \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i, \end{aligned} \quad (\text{I.102})$$

où les coefficients de transport $\hat{\lambda}^{\parallel}$, $\hat{\lambda}^{\perp}$, $\hat{\lambda}^{\odot}$, sont donnés par les relations

$$\hat{\lambda}^{\parallel} = \frac{1}{3k_B T^2} [\![\varphi^{\hat{\lambda}(1)}, \varphi^{\hat{\lambda}(1)}]\!], \quad (\text{I.103a})$$

$$\hat{\lambda}^{\perp} + \mathbf{i} \hat{\lambda}^{\odot} = \frac{1}{3k_B T^2} \left([\![\varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \varphi^{\hat{\lambda}(2)}]\!] + \mathbf{i} ([\![\varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \varphi^{\hat{\lambda}(2)}]\!]) \right). \quad (\text{I.103b})$$

En séparant partie réelle et partie imaginaire, on obtient les nouvelles expressions suivantes

$$\hat{\lambda}^{\perp} = \frac{1}{3k_B T^2} \left([\![\Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)}]\!] + [\![\Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)}]\!] \right), \quad (\text{I.103c})$$

$$\hat{\lambda}^{\odot} = \frac{1}{3k_B T^2} \left(([\![\Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Re \varphi^{\hat{\lambda}(2)}]\!]) + ([\![\Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \Im \varphi^{\hat{\lambda}(2)}]\!]) \right). \quad (\text{I.103d})$$

On note que la contribution due au produit scalaire $(\cdot, \cdot)$ dans les expressions des coefficients de transport $\hat{\lambda}^{\perp}$ et $\hat{\lambda}^{\odot}$ n'apparaît pas dans [FK72].

En définissant le coefficient de transport tensoriel $\hat{\lambda}$ par

$$\hat{\lambda} = \hat{\lambda}^{\parallel} \mathbf{M}^{\parallel} + \hat{\lambda}^{\perp} \mathbf{M}^{\perp} + \hat{\lambda}^{\odot} \mathbf{M}^{\odot}, \quad (\text{I.104a})$$

et en utilisant l'expression (I.91b) de θ_k obtient une formulation compacte du flux de chaleur

$$\mathcal{Q} = -\hat{\lambda} \partial_x T - p \sum_{i \in S} \theta_i \mathbf{d}_i + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}_i} \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i. \quad (\text{I.105})$$

Les propriétés de positivité associées au flux de chaleur et aux vitesses de diffusion peuvent s'écrire à l'aide des matrices de transport chaleur-masse

$$A^{\parallel} = \begin{pmatrix} \frac{T}{p} \hat{\lambda}^{\parallel} & \theta^{\parallel \top} \\ \theta^{\parallel} & D^{\parallel} \end{pmatrix}, \quad A^{\perp} + \mathbf{i} A^{\odot} = \begin{pmatrix} \frac{T}{p} \hat{\lambda}^{\perp} & \theta^{\perp \top} \\ \theta^{\perp} & D^{\perp} \end{pmatrix} + \mathbf{i} \begin{pmatrix} \frac{T}{p} \hat{\lambda}^{\odot} & \theta^{\odot \top} \\ \theta^{\odot} & D^{\odot} \end{pmatrix}, \quad (\text{I.106})$$

où l'exposant T indique une transposition. En procédant comme pour les matrices de diffusion multiespèces, et en utilisant la relation

$$\langle A^{\parallel} \mathbf{x}', \mathbf{x}' \rangle = \frac{1}{3} p k_B T \left[\sum_{i \in S} \mathbf{x}_i \boldsymbol{\varphi}^{D_i(1)} - \frac{\mathbf{x}_0}{p k_B T} \boldsymbol{\varphi}^{\hat{\lambda}(1)}, \sum_{i \in S} \mathbf{x}_i \boldsymbol{\varphi}^{D_i(1)} - \frac{\mathbf{x}_0}{p k_B T} \boldsymbol{\varphi}^{\hat{\lambda}(1)} \right],$$

où $\mathbf{x}' = (\mathbf{x}_0, \mathbf{x}^T)^T \in \mathbb{R}^{n^s+1}$, on peut alors établir que la matrice $A^{\parallel}$ est une matrice symétrique réelle semi-définie positive et que son noyau est un espace de dimension un engendré par le vecteur $(0, \varrho^T)^T$. De même, on obtient

$$\begin{aligned} \langle A^{\perp} \mathbf{x}', \mathbf{x}' \rangle + &= \frac{1}{3} p k_B T \left[\sum_{i \in S} \mathbf{x}_i \Re \boldsymbol{\varphi}^{D_i(2)} - \frac{\mathbf{x}_0}{p k_B T} \Re \boldsymbol{\varphi}^{\hat{\lambda}(2)}, \sum_{i \in S} \mathbf{x}_i \Re \boldsymbol{\varphi}^{D_i(2)} - \frac{\mathbf{x}_0}{p k_B T} \Re \boldsymbol{\varphi}^{\hat{\lambda}(2)} \right] \\ &+ \frac{1}{3} p k_B T \left[\sum_{i \in S} \mathbf{x}_i \Im \boldsymbol{\varphi}^{D_i(2)} - \frac{\mathbf{x}_0}{p k_B T} \Im \boldsymbol{\varphi}^{\hat{\lambda}(2)}, \sum_{i \in S} \mathbf{x}_i \Im \boldsymbol{\varphi}^{D_i(2)} - \frac{\mathbf{x}_0}{p k_B T} \Im \boldsymbol{\varphi}^{\hat{\lambda}(2)} \right]. \end{aligned}$$

On en conclut que la matrice $A^{\perp}$ est une matrice symétrique réelle semi-définie positive et que son noyau est un espace de dimension un engendré par le vecteur $(0, \varrho^T)^T$. Par ailleurs, la matrice $A^{\odot}$ est symétrique réelle et on peut ajouter que le noyau de la matrice $A^{\perp} + i A^{\odot}$ est engendré par le vecteur $(0, \varrho^T)^T$ dans $\mathbb{C}^{n^s+1}$ tandis que son image est l'orthogonal (au sens hermitien) du vecteur $(0, \varrho^T)^T$ dans $\mathbb{C}^{n^s+1}$.

En utilisant les taux de diffusion thermique $\chi^{\parallel}$, $\chi^{\perp}$, $\chi^{\odot}$, on obtient une nouvelle expression du flux de chaleur $\mathcal{Q}$,

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} = & -\lambda^{\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\parallel} - \lambda^{\perp} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\perp} - \lambda^{\odot} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\odot} \\ & - p \sum_{i \in S} (\chi_i^{\parallel} \mathbf{V}_i^{\parallel} + \chi_i^{\perp} \mathbf{V}_i^{\perp} + \chi_i^{\odot} \mathbf{V}_i^{\odot}) + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_i \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i, \quad (\text{I.107}) \end{aligned}$$

où l'on a défini les conductivités thermiques $\lambda^{\parallel}$, $\lambda^{\perp}$ et $\lambda^{\odot}$ par

$$\lambda^{\parallel} = \hat{\lambda}^{\parallel} - \frac{p}{T} \sum_{i,j \in S} D_{ij}^{\parallel} \chi_j^{\parallel} \chi_i^{\parallel}, \quad (\text{I.108a})$$

$$\lambda^{\perp} + i \lambda^{\odot} = \hat{\lambda}^{\perp} + i \lambda^{\odot} - \frac{p}{T} \sum_{i,j \in S} (D_{ij}^{\perp} + i D_{ij}^{\odot}) (\chi_j^{\perp} + i \chi_j^{\odot}) (\chi_i^{\perp} + i \chi_i^{\odot}). \quad (\text{I.108b})$$

On remarque que J.H. Ferziger et H.G. Kaper n'obtiennent pas exactement la même expression pour le flux de chaleur [FK72]. Leur formulation contient en effet un terme erroné $(\frac{5}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_i) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i^{\odot}$.

On s'intéresse à présent à la dépendance des coefficients de transport vis à vis du champ magnétique $\mathbf{B}$. En utilisant les développements (I.65) et (I.56) des fonctions

$\varphi_i^{D_j(2)}$, $i, j \in S$, et $\varphi_i^{\hat{\lambda}(2)}$, $i \in S$, on peut développer les coefficients de transport $\hat{\lambda}^\parallel$, $\hat{\lambda}^\perp$, $\hat{\lambda}^\odot$, sous la forme

$$\hat{\lambda}^\parallel = \hat{\lambda}^0, \quad (\text{I.109a})$$

$$\hat{\lambda}^\perp = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N} \hat{\lambda}^{2N}, \quad (\text{I.109b})$$

$$\hat{\lambda}^\odot = \sum_{N \in \mathbb{N}} B^{2N+1} \hat{\lambda}^{2N+1}, \quad (\text{I.109c})$$

où les coefficients $\hat{\lambda}^N$, $N \in \mathbb{N}$, sont définis par

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}^{2N} &= (-1)^N \frac{1}{3k_B T^2} \left(\sum_{n+m=2N} (-1)^m [\varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}}, \varphi_{\cdot,m}^{\hat{\lambda}}] + \sum_{n+m=2N-1} (-1)^m ((\varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}}, \varphi_{\cdot,m}^{\hat{\lambda}})) \right), \\ \hat{\lambda}^{2N+1} &= (-1)^N \frac{1}{3k_B T^2} \left(\sum_{n+m=2N+1} (-1)^m [\varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}}, \varphi_{\cdot,m}^{\hat{\lambda}}] + \sum_{n+m=2N} (-1)^m ((\varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}}, \varphi_{\cdot,m}^{\hat{\lambda}})) \right), \end{aligned}$$

où les fonctions $\varphi_{\cdot,n}^{\hat{\lambda}}$, $n \in \mathbb{N}$, ne dépendent pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. On en déduit qu'il existe des fonctions régulières $\hat{\varsigma}^\perp$, $\hat{\varsigma}^\odot$, telles que

$$\hat{\lambda}^\perp - \hat{\lambda}^\parallel = B^2 \hat{\varsigma}^\perp(B^2), \quad \hat{\lambda}^\odot = B \hat{\varsigma}^\odot(B^2).$$

D'après les définitions (I.108a) et (I.108b) des conductivités thermiques $\lambda^\parallel$, $\lambda^\perp$ et $\lambda^\odot$, on obtient les développements suivants

$$\lambda^\parallel = \lambda^0, \quad (\text{I.110a})$$

$$\lambda^\perp = \sum_{n \in \mathbb{N}} B^{2n} \lambda^{2n}, \quad (\text{I.110b})$$

$$\lambda^\odot = \sum_{n \in \mathbb{N}} B^{2n+1} \lambda^{2n+1}, \quad (\text{I.110c})$$

où les coefficients λ^N , $N \in \mathbb{N}$, sont définis par

$$\lambda^N = \hat{\lambda}^N - \frac{p}{T} \sum_{i,j \in S} \sum_{n+m+p=N} (-1)^{mp+mn+np} D_{ij}^n \chi_j^m \chi_i^p.$$

On en déduit alors l'existence de fonctions régulières $\varsigma^\perp$, $\varsigma^\odot$, telles que

$$\lambda^\perp - \lambda^\parallel = B^2 \varsigma^\perp(B^2), \quad \lambda^\odot = B \varsigma^\odot(B^2).$$

I.6.5.4 Expression du tenseur de viscosité Π

D'après l'équation (I.85e), on a

$$\Pi = \sum_{\substack{i \in \mathcal{S} \\ I \in \Omega_i}} \int \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i.$$

En utilisant les expressions suivantes de Ψ_i^η et de Ψ_i^κ ,

$$\begin{aligned} \Psi_i^\eta &= \frac{\mathbf{m}_i}{k_B T} \left(\mathbf{C}_i \otimes \mathbf{C}_i - \frac{1}{3} \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i \mathbb{I} \right), \\ \Psi_i^\kappa &= \frac{2\mathbf{c}_v^{\text{int}}}{\mathbf{c}_v k_B T} \left(\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - \frac{3}{2} k_B T \right) + \frac{2\mathbf{c}_v^{\text{tr}}}{\mathbf{c}_v k_B T} (\bar{\mathcal{E}}_i - \mathcal{E}_{il}), \end{aligned}$$

ainsi que la relation $\mathbf{c}_v = \mathbf{c}_v^{\text{int}} + \mathbf{c}_v^{\text{tr}}$, le tenseur de viscosité Π s'écrit

$$\begin{aligned} \Pi &= k_B T \langle \langle \Psi^\eta, f_i^0 \phi \rangle \rangle + \frac{1}{3} k_B T \langle \langle \Psi^\kappa, f_i^0 \phi \rangle \rangle \mathbb{I} + \sum_{\substack{i \in \mathcal{S} \\ I \in \Omega_i}} \int f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i \\ &\quad - \frac{2\mathbf{c}_v^{\text{tr}}}{3\mathbf{c}_v} \sum_{\substack{i \in \mathcal{S} \\ I \in \Omega_i}} \left((\bar{\mathcal{E}}_i + \frac{3}{2} k_B T) \int f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i - \int (\frac{1}{2} \mathbf{m}_i \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \mathcal{E}_{il}) f_i^0 \phi_i d\mathbf{c}_i \right). \end{aligned}$$

Or toutes les intégrales sont nulles car la famille de fonctions ϕ vérifie les contraintes scalaires $\langle \langle f^0 \phi, \psi^l \rangle \rangle = 0$, $l \in \{1, \dots, n^s + 4\}$, ce qui permet de réduire l'expression du tenseur de viscosité

$$\Pi = k_B T \langle \langle \Psi^\eta, f_i^0 \phi \rangle \rangle + \frac{1}{3} k_B T \langle \langle \Psi^\kappa, f_i^0 \phi \rangle \rangle \mathbb{I}. \quad (\text{I.111})$$

Le terme $\langle \langle \Psi^\kappa, f_i^0 \phi \rangle \rangle$ se calcule facilement et se met sous la forme

$$\langle \langle \Psi^\kappa, f_i^0 \phi \rangle \rangle = -\frac{1}{3} \langle \langle \Psi^\kappa, f_i^0 \phi^\kappa \rangle \rangle \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \delta_{a0} \sum_{r \in \mathcal{R}} \langle \langle \Psi^\kappa, f_i^0 \phi^r \rangle \rangle \bar{\tau}_r,$$

car la fonction Ψ^κ est une fonction scalaire. En utilisant l'étude sur les fonctions ϕ^κ et ϕ^r , et plus particulièrement les équations (I.80) et (I.82), on obtient

$$\Pi = k_B T \langle \langle \Psi^\eta, f_i^0 \phi \rangle \rangle + \delta_{a0} p^{\text{reac}} \mathbb{I} - \kappa \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} \mathbb{I},$$

en définissant la viscosité volumique κ par

$$\kappa = \frac{1}{9} k_B T [\phi^\kappa, \phi^\kappa], \quad (\text{I.112})$$

et la pression réactive p^{reac} par

$$p^{\text{reac}} = \frac{1}{3}k_B T \sum_{r \in \mathfrak{R}} [\phi^\kappa, \phi^r] \bar{\tau}_r. \quad (\text{I.113})$$

On doit alors calculer le terme $\langle\langle \Psi^\eta, f_i^0 \phi \rangle\rangle$. Comme la fonction Ψ^η est un tenseur d'ordre deux à trace nulle, on a

$$\langle\langle \Psi^\eta, f_i^0 \phi \rangle\rangle = -\langle\langle \Psi^\eta, f_i^0 \phi^\eta : \partial_x \mathbf{v} \rangle\rangle.$$

On évalue ce terme en substituant l'expression (I.71) de ϕ^η et en utilisant l'isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé $\mathcal{F}^\mathcal{S}$. En définissant les cinq viscosités de cisaillement $\eta_1, \dots, \eta_5$ par

$$\eta_1 = \frac{1}{20}k_B T ([\varphi^{\eta(1)}, \varphi^{\eta(1)}] + [\varphi^{\eta(2)}, \varphi^{\eta(2)}]), \quad (\text{I.114a})$$

$$\eta_2 = -\frac{1}{10}k_B T ((\varphi^{\eta(2)}, \varphi^{\eta(2)})), \quad (\text{I.114b})$$

$$\eta_3 = \frac{1}{20}k_B T ([\varphi^{\eta(1)}, \varphi^{\eta(1)}] - [\varphi^{\eta(2)}, \varphi^{\eta(2)}]), \quad (\text{I.114c})$$

$$\eta_4 = \frac{1}{10}k_B T ([\varphi^{\eta(3)}, \varphi^{\eta(3)}] - \frac{1}{2}[\varphi^{\eta(1)}, \varphi^{\eta(1)}] - \frac{1}{2}[\varphi^{\eta(2)}, \varphi^{\eta(2)}]), \quad (\text{I.114d})$$

$$\eta_5 = \frac{1}{10}k_B T ((\varphi^{\eta(2)}, \varphi^{\eta(2)}) - ((\varphi^{\eta(3)}, \varphi^{\eta(3)}))), \quad (\text{I.114e})$$

on obtient, après un long calcul, l'expression suivante du tenseur de viscosité $\mathbf{\Pi}$

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi} = & \delta_{a0} p^{\text{reac}} \mathbb{I} - \kappa \partial_x \cdot \mathbf{v} \mathbb{I} - \eta_1 \mathbf{S} - \eta_2 (\mathbf{M}^\odot \mathbf{S} - \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot) \\ & - \eta_3 (\mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel - \mathbf{M}^\odot \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot) - \eta_4 (\mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel + \mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} - 2 \mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel) \\ & - \eta_5 (\mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot - \mathbf{M}^\odot \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel), \end{aligned} \quad (\text{I.115})$$

où le tenseur des taux de déformation $\mathbf{S}$ est donné par

$$\mathbf{S} = (\partial_x \mathbf{v} + \partial_x \mathbf{v}^T) - \frac{2}{3} \partial_x \cdot \mathbf{v} \mathbb{I}. \quad (\text{I.116})$$

On rappelle que les matrices $\mathbf{M}^\parallel$, $\mathbf{M}^\perp$ et $\mathbf{M}^\odot$ sont des matrices de projection définies par

$$\mathbf{M}^\parallel = \mathcal{B}_\otimes \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^\perp = \mathbb{I} - \mathcal{B}_\otimes \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^\odot = \mathbf{R}(\mathcal{B}).$$

Le tenseur visqueux $\mathbf{\Pi}$ s'écrit donc comme une combinaison linéaire de tous les tenseurs symétriques d'ordre deux que l'on peut construire à l'aide de la matrice $\mathbb{I}$, du tenseur des taux de déformation $\mathbf{S}$ et du champ magnétique renormé $\mathcal{B}$, et qui dépendent linéairement de $\mathbf{S}$.

Dans la suite du document, on négligera p^{reac} . En effet, il semble que le système obtenu n'ait une bonne structure que dans ce cas (voir par exemple [Gio99]) et, de plus, ce terme est très largement ignoré dans toutes les applications actuelles.

On s'intéresse à présent à la dépendance des viscosités de cisaillement vis à vis du champ magnétique $\mathbf{B}$, la viscosité volumique κ ne dépendant pas de $\mathbf{B}$. En utilisant les développements (I.76a) et (I.76b) des fonctions $\varphi^{\eta(2)}$ et $\varphi^{\eta(3)}$, on obtient les développements suivants pour les viscosités de cisaillement.

$$\eta_1 = \frac{1}{10}k_B T [\varphi_{.,0}^\eta, \varphi_{.,0}^\eta] + \frac{1}{20}k_B T \sum_{N \in \mathbb{N}^*} (-1)^N 2^{2N} B^{2N} \sum_{n+m=2N} (-1)^m [\varphi_{.,n}^\eta, \varphi_{.,m}^\eta], \quad (\text{I.117a})$$

$$\eta_2 = -\frac{1}{10}k_B T \sum_{N \in \mathbb{N}} (-1)^N 2^{2N} B^{2N+1} \sum_{n+m=2N} (-1)^m ((\varphi_{.,n}^\eta, \varphi_{.,m}^\eta)), \quad (\text{I.117b})$$

$$\eta_3 = -\frac{1}{20}k_B T \sum_{N \in \mathbb{N}^*} (-1)^N 2^{2N} B^{2N} \sum_{n+m=2N} (-1)^m [\varphi_{.,n}^\eta, \varphi_{.,m}^\eta], \quad (\text{I.117c})$$

$$\eta_4 = -\frac{1}{20}k_B T \sum_{N \in \mathbb{N}^*} (-1)^N (2^{2N} - 2) B^{2N} \sum_{n+m=2N} (-1)^m [\varphi_{.,n}^\eta, \varphi_{.,m}^\eta], \quad (\text{I.117d})$$

$$\eta_5 = \frac{1}{10}k_B T \sum_{N \in \mathbb{N}^*} (-1)^N (2^{2N} - 1) B^{2N+1} \sum_{n+m=2N} (-1)^m ((\varphi_{.,n}^\eta, \varphi_{.,m}^\eta)), \quad (\text{I.117e})$$

où les fonctions $\varphi_{.,N}^\eta$, $N \in \mathbb{N}$, ne dépendent pas du champ magnétique $\mathbf{B}$. On en déduit qu'il existe des fonctions régulières $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \varphi_5, \varphi_6$, telles que

$$\begin{aligned} \eta_1 &= \varphi_1(B^2), & \eta_2 &= B\varphi_2(B^2), & \eta_3 &= B^2\varphi_3(B^2), & \eta_4 &= B^2\varphi_4(B^2), \\ \eta_5 &= B^3\varphi_5(B^2), & 2\eta_4 - \eta_3 &= B^4\varphi_6(B^2). \end{aligned}$$

I.6.5.5 Expression du terme source chimique $\overline{\omega}_i$

Cette sous-section est consacrée au taux de production de masse macroscopique $\overline{\omega}_i$, $i \in \mathbb{S}$, qui apparaît dans l'équation (I.85a) de conservation de la masse. On a par définition de $\overline{\omega}_i$ en (I.85c),

$$\overline{\omega}_i = \sum_{i \in \Omega_i} \int (\mathcal{C}_i(f^0) + \delta_{a0} \partial_{f_i} \mathcal{C}_i(f^0) f_i^0 \phi) d\mathbf{c}_i, \quad i \in \mathbb{S}.$$

En rappelant la définition (I.22b) de $\overline{\omega}_i^0$,

$$\overline{\omega}_i^0 = \langle \langle \psi^i, \mathcal{C}(f^0) \rangle \rangle = \sum_{i \in \Omega_i} \int \mathcal{C}_i(f^0) d\mathbf{c}_i,$$

et en définissant $\mathfrak{w}_i$ par

$$\mathfrak{w}_i = \delta_{a0} \sum_{i \in \Omega_i} \int \partial_{f_i} \mathcal{C}_i(f^0) f_i^0 \phi \, d\mathbf{c}_i, \quad i \in S,$$

on met $\overline{\omega}_i$ sous la forme

$$\overline{\omega}_i = \overline{\omega}_i^0 + \mathfrak{w}_i, \quad i \in S. \quad (\text{I.118})$$

On s'intéresse uniquement à $\mathfrak{w}_i$ puisque l'étude de $\overline{\omega}_i^0$ a déjà été faite dans le cadre de l'approximation d'ordre zéro. Pour cela, on définit les taux de production chimique direct et inverse

$$\overline{\tau}_r^f = \mathcal{K}_r \prod_{k \in S} \left(\frac{\mathbf{n}_k}{Q_k} \right)^{\nu_{kr}^f}, \quad \overline{\tau}_r^b = \mathcal{K}_r \prod_{k \in S} \left(\frac{\mathbf{n}_k}{Q_k} \right)^{\nu_{kr}^b}, \quad r \in \mathfrak{R},$$

de sorte que l'on a la relation $\overline{\tau}_r = \overline{\tau}_r^f - \overline{\tau}_r^b$ pour $r \in \mathfrak{R}$. On introduit les fonctions

$$\begin{aligned} \Psi_i^{rb} &= \frac{\nu_{ir}^f}{\mathcal{K}_r} \frac{1}{f_i^0} \sum_{\mathbf{F}_i^r, \mathbf{B}^r} \int \mathfrak{D}_r \prod_{j \in \mathcal{F}_i^r} d\mathbf{c}_j \prod_{k \in \mathcal{B}^r} d\mathbf{c}_k, \\ \Psi_i^{rf} &= \frac{\nu_{ir}^b}{\mathcal{K}_r} \frac{1}{f_i^0} \sum_{\mathbf{F}^r, \mathbf{B}_i^r} \int \mathfrak{D}_r \prod_{j \in \mathcal{F}^r} d\mathbf{c}_j \prod_{k \in \mathcal{B}_i^r} d\mathbf{c}_k, \end{aligned}$$

de sorte que la famille de fonctions $\Psi_i^r + \Psi_i^{rb} - \Psi_i^{rf}$ est un invariant de collisions. Le terme de perturbation $\mathfrak{w}_i$ peut alors être réécrit sous la forme

$$\mathfrak{w}_i = \delta_{a0} \sum_{r \in \mathfrak{R}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) (\overline{\tau}_r^f \langle \Psi_i^{rb}, f_i^0 \phi \rangle - \overline{\tau}_r^b \langle \Psi_i^{rf}, f_i^0 \phi \rangle), \quad i \in S.$$

Comme Ψ_i^{rb} et Ψ_i^{rf} sont des fonctions scalaires, on a

$$\langle \Psi_i^{rb}, f_i^0 \phi \rangle = -\frac{1}{3} \langle \Psi_i^{rb}, f_i^0 \phi^\kappa \rangle \boldsymbol{\partial}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \delta_{a0} \sum_{s \in \mathfrak{R}} \langle \Psi_i^{rb}, f_i^0 \phi^s \rangle \overline{\tau}_s$$

et

$$\langle \Psi_i^{rf}, f_i^0 \phi \rangle = -\frac{1}{3} \langle \Psi_i^{rf}, f_i^0 \phi^\kappa \rangle \boldsymbol{\partial}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \delta_{a0} \sum_{s \in \mathfrak{R}} \langle \Psi_i^{rf}, f_i^0 \phi^s \rangle \overline{\tau}_s.$$

On peut alors écrire

$$\begin{aligned} \mathfrak{w}_i &= \delta_{a0} \sum_{r, s \in \mathfrak{R}} \left[\langle \Psi_i^{rb}, f_i^0 \phi^s \rangle (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \overline{\tau}_r^f (\overline{\tau}_s^f - \overline{\tau}_s^b) - \langle \Psi_i^{rf}, f_i^0 \phi^s \rangle (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \overline{\tau}_r^b (\overline{\tau}_s^f - \overline{\tau}_s^b) \right] \\ &\quad + \frac{1}{3} \delta_{a0} \sum_{r \in \mathfrak{R}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \left[\overline{\tau}_r^b \langle \Psi_i^{rf}, f_i^0 \phi^\kappa \rangle - \overline{\tau}_r^f \langle \Psi_i^{rb}, f_i^0 \phi^\kappa \rangle \right] \boldsymbol{\partial}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}. \end{aligned}$$

On renvoie le lecteur à l'ouvrage de V. Giovangigli [Gio99] pour plus de détails sur ce terme $\mathbf{w}_i$. Le terme source $\mathbf{w}_i$ est donc la somme d'une forme quadratique et d'une partie linéaire en $\bar{\tau}_r^f$ et en $\bar{\tau}_r^b$ multipliée par $\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}$. Les premiers à s'être intéressés au terme de perturbation $\mathbf{w}_i$ ont été I. Prigogine et E. Xhrouet [PX49] dans le cas d'espèces monoatomiques, puis G. Ludwig et M. Heil [LH60] dans le cas d'espèces polyatomiques. Les nombreuses estimations qui ont pu être faites dans des cas simples ont généralement montré que sa contribution est faible devant celle de $\bar{\omega}_i^0$, voir par exemple [PX49, PM50, Tak51, Pre59, SK70, SK71a, SK71b].

C'est pourquoi on considérera dans la suite que le taux de production de masse $\bar{\omega}_i$ est réduit au taux de production de masse à l'ordre zéro, $\bar{\omega}_i^0$. Comme on néglige à la fois p^{reac} et $\mathbf{w}_i$, on obtient les mêmes équations que l'on prenne $a = 0$ ou $a = 1$.

I.6.6 Bilan entropique

Cette section est consacrée à l'étude de l'entropie macroscopique. Dans un premier temps, on donne une formulation de l'entropie macroscopique volumique, notée $\mathcal{S}$, puis on détermine son équation de conservation et on étudie le terme de production d'entropie pour montrer qu'il est positif.

I.6.6.1 Entropie macroscopique volumique

L'entropie cinétique est définie en (I.10) par

$$\mathcal{S}^{\text{kin}} = -k_B \sum_{\substack{i \in \mathcal{S} \\ i \in \Omega_i}} \int f_i [\log(\beta_{ii} f_i) - 1] d\mathbf{c}_i.$$

Comme $\log(\beta_{ii} f_i^0)$ est un invariant de collisions, le développement limité

$$f_i [\log(\beta_{ii} f_i) - 1] = f_i^0 [\log(\beta_{ii} f_i^0) - 1] + \epsilon f_i^0 \phi_i \log(\beta_{ii} f_i^0) + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

permet de montrer la formule suivante

$$\mathcal{S}^{\text{kin}} = -k_B \sum_{\substack{i \in \mathcal{S} \\ i \in \Omega_i}} \int f_i^0 [\log(\beta_{ii} f_i^0) - 1] d\mathbf{c}_i + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

On en déduit alors que

$$\mathcal{S}^{\text{kin}} = \sum_{i \in \mathcal{S}} \mathbf{n}_i \mathcal{S}_i^{\text{molec}} + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (\text{I.119})$$

avec

$$\mathcal{S}_i^{\text{molec}} = -k_B \sum_{\substack{i \in S \\ \mathbf{l} \in \Omega_i}} \int f_i^0 [\log(\beta_{\mathbf{l}} f_i^0) - 1] d\mathbf{c}_i.$$

En utilisant l'expression (I.21) de f_i^0 , on obtient une formulation intégrée de l'entropie moléculaire de l'espèce i :

$$\mathcal{S}_i^{\text{molec}} = \frac{5}{2}k_B + \frac{\overline{\mathcal{E}}_i}{T} - k_B \log \left(\frac{\mathbf{n}_i}{Q_i} \right), \quad i \in S. \quad (\text{I.120})$$

On définit alors l'entropie macroscopique par unité de volume, notée $\mathcal{S}$, par

$$\mathcal{S} = \sum_{i \in S} \mathbf{n}_i \mathcal{S}_i^{\text{molec}} = \sum_{i \in S} \rho_i s_i, \quad (\text{I.121})$$

où $s_i = \mathcal{S}_i^{\text{molec}}/\mathbf{m}_i$ est l'entropie par unité de masse de l'espèce i d'ordre zéro. On a donc

$$\mathcal{S}^{\text{kin}} = \mathcal{S} + \mathcal{O}(\epsilon^2).$$

On définit de même l'enthalpie macroscopique volumique, notée $\mathcal{H}$, l'enthalpie macroscopique massique de l'espèce i , notée h_i , l'énergie libre macroscopique volumique, notée $\mathcal{G}$, l'énergie libre massique de l'espèce i , notée g_i et on rappelle la définition de l'énergie interne macroscopique volumique, notée $\mathcal{E}$ et l'énergie interne macroscopique massique de l'espèce i :

$$\mathcal{E} = \sum_{i \in S} \rho_i e_i, \quad e_i = \frac{3}{2} \frac{k_B T}{\mathbf{m}_i} + \frac{\overline{\mathcal{E}}_i}{\mathbf{m}_i}, \quad (\text{I.122a})$$

$$\mathcal{H} = \sum_{i \in S} \rho_i h_i, \quad h_i = \frac{5}{2} \frac{k_B T}{\mathbf{m}_i} + \frac{\overline{\mathcal{E}}_i}{\mathbf{m}_i}, \quad (\text{I.122b})$$

$$\mathcal{G} = \sum_{i \in S} \rho_i g_i, \quad g_i = \frac{k_B T}{\mathbf{m}_i} \log \left(\frac{\mathbf{n}_i}{Q_i} \right). \quad (\text{I.122c})$$

La définition de toutes ces quantités macroscopiques fournit une thermodynamique macroscopique hors équilibre pour les mélanges multiespèces ionisés. La température T peut également être identifiée à la température macroscopique du mélange [Cer88].

I.6.6.2 Equation de conservation de l'entropie

D'après la formulation (I.120) de l'entropie macroscopique, on peut écrire sa différentielle selon les variables $(\rho_1, \dots, \rho_{n^e}, T)$ par

$$dS = \frac{n\mathbf{c}_v}{T}dT + \sum_{i \in S} \left(s_i - \frac{k_B}{m_i} \right) d\rho_i. \quad (\text{I.123})$$

Comme l'énergie interne volumique $\mathcal{E}$ est une fonction strictement croissante de la température, le changement de variables $(\rho_1, \dots, \rho_{n^e}, T) \mapsto (\rho_1, \dots, \rho_{n^e}, \mathcal{E})$ est admissible. De plus, la différentielle de $\mathcal{E}$ étant $d\mathcal{E} = n\mathbf{c}_v dT + \sum_{i \in S} e_i d\rho_i$, celle de l'entropie selon les variables $(\rho_1, \dots, \rho_{n^e}, \mathcal{E})$ s'écrit (relation de Gibbs)

$$dS = \frac{1}{T}d\mathcal{E} - \sum_{i \in S} \frac{g_i}{T}d\rho_i. \quad (\text{I.124})$$

Pour utiliser ces nouvelles variables, l'équation de conservation de l'énergie interne est nécessaire. On l'obtient en combinant les équations macroscopiques d'ordre un (I.85) et en utilisant les relations de conservation de la masse (I.30) et les relations entre les vitesses de diffusion (I.95)

$$\partial_t \mathcal{E} + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{E} \mathbf{v}) + p \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} + \Pi : \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{j} \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}). \quad (\text{I.125})$$

Un long calcul algébrique permet alors de déterminer l'équation de conservation de l'entropie macroscopique. En notant $\mathcal{F}_i^d = \rho_i \mathbf{V}_i$ le flux diffusif de la i^e espèce, on peut l'écrire sous la forme

$$\partial_t S + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (S \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{1}{T} \mathbf{Q} - \sum_{i \in S} \frac{g_i}{T} \mathcal{F}_i^d \right) = \Upsilon, \quad (\text{I.126a})$$

où le terme de production d'entropie est donné par

$$\Upsilon = - \sum_{i \in S} \frac{g_i m_i \bar{\omega}_i}{T} - \frac{\Pi : \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}}{T} - \frac{1}{T^2} \left(\mathbf{Q} - \sum_{i \in S} \rho_i h_i \mathbf{V}_i \right) \cdot \partial_{\mathbf{x}} T - \sum_{i \in S} \frac{p}{T} \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{d}_i. \quad (\text{I.126b})$$

I.6.6.3 Positivité de la production d'entropie

Dans cette section, on montre que le terme de production d'entropie Υ est une somme de termes positifs. Cette propriété est importante pour de multiples raisons.

Tout d'abord, du point de vue thermodynamique, elle montre que le modèle macroscopique satisfait le second principe hérité du modèle cinétique. Puis, d'un point de vue mathématique, l'entropie joue un rôle central pour établir le caractère bien posé du système d'équations aux dérivées partielles résultant. Elle peut également être utilisée pour dériver une forme symétrique du système de loi de conservation, forme qui peut être utile pour des problèmes théoriques comme les simulations numériques à l'aide d'éléments finis [Gio99]. Pour établir que la production d'entropie est une somme de termes positifs, on utilise en particulier les propriétés de structure des matrices de transport chaleur-masse.

On scinde le terme de production d'entropie en trois termes $\Upsilon = \Upsilon_1 + \Upsilon_2 + \Upsilon_3$, où Υ_1 est la production d'entropie due à la chimie, Υ_2 la production d'entropie correspondant aux effets de la viscosité et Υ_3 la production d'entropie concernant le flux de chaleur et les vitesses de diffusion. Ces termes s'écrivent sous la forme

$$\Upsilon_1 = -\frac{1}{T} \sum_{i \in \mathcal{S}} g_i \mathbf{m}_i \overline{\omega}_i, \quad (\text{I.127a})$$

$$\Upsilon_2 = -\frac{1}{T} \boldsymbol{\Pi} : \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}, \quad (\text{I.127b})$$

$$\Upsilon_3 = -\frac{1}{T^2} \left(\mathcal{Q} - \sum_{i \in \mathcal{S}} \rho_i h_i \mathbf{V}_i \right) \cdot \partial_{\mathbf{x}} T - \frac{p}{T} \sum_{i \in \mathcal{S}} \mathbf{V}_i \cdot \mathbf{d}_i. \quad (\text{I.127c})$$

On montre que chacun de ces trois termes est positif.

Positivité de Υ_1 . Comme on l'a signalé dans la sous-section consacrée au terme source chimique d'ordre un, on néglige le terme $\mathbf{w}_i$, c'est-à-dire qu'on prend $\overline{\omega}_i = \overline{\omega}_i^0$. L'étude à l'ordre zéro a permis de donner l'expression (I.23) de $\overline{\omega}_i^0$

$$\overline{\omega}_i^0 = \sum_{r \in \mathfrak{R}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \overline{\tau}_r.$$

Donc d'après la définition de l'énergie libre massique g_i donnée en (I.122c), on peut mettre le terme Υ_1 sous la forme

$$\Upsilon_1 = -k_B \sum_{r \in \mathfrak{R}} \left[\sum_{i \in \mathcal{S}} (\nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f) \log \left(\frac{\mathbf{n}_i}{Q_i} \right) \right] \overline{\tau}_r.$$

En utilisant l'expression (I.24) de $\overline{\tau}_r$, $r \in \mathfrak{R}$, on obtient ensuite

$$\Upsilon_1 = k_B \sum_{r \in \mathfrak{R}} \mathcal{K}_r \mathfrak{P} \left(\prod_{i \in \mathcal{S}} \left(\frac{\mathbf{n}_i}{Q_i} \right)^{\nu_{ir}^f}, \prod_{i \in \mathcal{S}} \left(\frac{\mathbf{n}_i}{Q_i} \right)^{\nu_{ir}^b} \right),$$

où $\mathfrak{P}(x, y) = (x - y) \log(x/y)$ est une fonction positive. Comme k_B et $\mathcal{K}_r$ sont positifs, on en conclut que Υ_1 est positif.

Pour montrer que le terme Υ_1 est positif, on a négligé le terme $\mathfrak{w}_i$. Pour une étude détaillée de ce terme, on renvoie le lecteur au livre de V. Giovangigli [Gio99], où il est établi que le terme source n'a pas un signe constant et que le seul cas bien posé formellement est $a = 1$.

Positivité de Υ_2 . Lorsque $a = 1$, ou lorsque l'on néglige p^{reac} , le tenseur de viscosité Π se met sous la forme (I.115)

$$\begin{aligned} \Pi = & -\kappa \partial_x \cdot \mathbf{v} \mathbb{I} - \eta_1 \mathbf{S} - \eta_2 (\mathbf{M}^\odot \mathbf{S} - \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot) \\ & - \eta_3 (\mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel - \mathbf{M}^\odot \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot) - \eta_4 (\mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel + \mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} - 2 \mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel) \\ & - \eta_5 (\mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot - \mathbf{M}^\odot \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel). \end{aligned}$$

On commence par récrire la production d'entropie due à la viscosité Υ_2 sous une forme intrinsèque, c'est-à-dire indépendante de la base choisie. On établit après de long calculs que

$$\begin{aligned} \Upsilon_2 = & \frac{\kappa}{T} (\partial_x \cdot \mathbf{v})^2 + 2 \frac{\eta_1 + \eta_4}{T} \left[\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S}^2 \mathbf{B} - (\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S} \mathbf{B})^2 \right] + \frac{3}{2} \frac{\eta_1 + \eta_3}{T} (\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S} \mathbf{B})^2 \\ & + \frac{3}{2} \frac{\eta_1 - \eta_3}{T} \left[\text{Trace}(\mathbf{S}^2) - 2 \mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S}^2 \mathbf{B} + \frac{1}{2} (\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S} \mathbf{B})^2 \right], \end{aligned}$$

où $\text{Trace}(A)$ désigne la trace du tenseur A . En outre, en utilisant l'expression (I.112) de la viscosité volumique et les expressions (I.114) des cinq viscosités de cisaillement, on a les relations suivantes de positivité

$$\kappa \geq 0, \quad \eta_1 + \eta_4 > 0, \quad \eta_1 + \eta_3 > 0, \quad \eta_1 - \eta_3 > 0.$$

Il est donc suffisant de montrer que les deux termes

$$\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S}^2 \mathbf{B} - (\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S} \mathbf{B})^2, \quad \text{Trace}(\mathbf{S}^2) - 2 \mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S}^2 \mathbf{B} + \frac{1}{2} (\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S} \mathbf{B})^2,$$

sont positifs ou nuls. Comme ces termes sont invariants par changement de base, on choisit une base orthonormée $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ telle que $\mathbf{e}_1$ est proportionnel au vecteur $\mathbf{B}$. On obtient alors

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S}^2 \mathbf{B} - (\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S} \mathbf{B})^2 &= S_{12}^2 + S_{13}^2 \geq 0, \\ \text{Trace}(\mathbf{S}^2) - 2 \mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S}^2 \mathbf{B} + \frac{1}{2} (\mathbf{B}^\text{T} \mathbf{S} \mathbf{B})^2 &= 2 S_{23}^2 + \frac{1}{2} (S_{22} - S_{33})^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Ainsi, la production d'entropie due à la viscosité Υ_2 est positive.

Positivité de Υ_3 . On montre finalement que le terme de production d'entropie dû au flux de chaleur et aux vitesses de diffusion Υ_3 est positif. En utilisant les expressions (I.89) et (I.102) des vitesses de diffusion $\mathbf{V}_i$, $i \in S$, et du flux de chaleur $\mathcal{Q}$, on récrit Υ_3 sous la forme

$$\begin{aligned} \Upsilon_3 = & \frac{1}{T^2} \hat{\lambda}^{\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\parallel} \cdot (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\parallel} + \frac{p}{T} \sum_{i,j \in S} D_{ij}^{\parallel} \mathbf{d}_j^{\parallel} \cdot \mathbf{d}_i^{\parallel} + 2 \frac{p}{T^2} \sum_{i \in S} \theta_i^{\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\parallel} \cdot \mathbf{d}_i^{\parallel} \\ & + \frac{1}{T^2} \hat{\lambda}^{\perp} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\perp} \cdot (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\perp} + \frac{p}{T} \sum_{i,j \in S} D_{ij}^{\perp} \mathbf{d}_j^{\perp} \cdot \mathbf{d}_i^{\perp} + 2 \frac{p}{T^2} \sum_{i \in S} \theta_i^{\perp} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{\perp} \cdot \mathbf{d}_i^{\perp}. \end{aligned}$$

En définissant les vecteurs $\mathbf{x}_i^{\diamond} = \left(\frac{1}{T} ((\partial_{\mathbf{x}} T)^{\diamond})_i, (\mathbf{d}_1^{\diamond})_i, \dots, (\mathbf{d}_{n^s}^{\diamond})_i \right)^T$, pour $\diamond \in \{\parallel, \perp\}$ et $i \in S$, on obtient

$$\Upsilon_3 = \frac{p}{T} \sum_{i \in S} \left(\langle A^{\parallel} \mathbf{x}_i^{\parallel}, \mathbf{x}_i^{\parallel} \rangle + \langle A^{\perp} \mathbf{x}_i^{\perp}, \mathbf{x}_i^{\perp} \rangle \right),$$

où les matrices $A^{\parallel}$ et $A^{\perp}$ sont définies en (I.106). Les propriétés de positivité de ces matrices montrent alors immédiatement que la contribution des vitesses de diffusion et du flux de chaleur Υ_3 est positive.

I.6.7 Relations de réciprocité de Onsager

Les relations de Onsager sont des contraintes de symétries que les coefficients de transport doivent vérifier. Ces propriétés expriment l'invariance des phénomènes lorsque l'on renverse le temps, c'est-à-dire que les équations du mouvement des particules sont symétriques par rapport au temps. En présence d'un champ magnétique, cela implique que les particules suivent le même chemin en sens inverse lorsque l'on inverse toutes les vitesses ainsi que le champ magnétique. Dans le cas des mélanges gazeux, il est possible de déduire directement ces propriétés de symétrie de la théorie cinétique des gaz [dGM84]. Dans cette section, on montre que les relations de Onsager sont satisfaites aussi bien par les coefficients de diffusion que les coefficients de viscosité.

En ce qui concerne la diffusion, les relations de Onsager s'écrivent

$$D_{ij}(-\mathbf{B}) = D_{ji}(\mathbf{B})^T, \quad \theta_i(-\mathbf{B}) = \theta_i(\mathbf{B})^T, \quad \hat{\lambda}(-\mathbf{B}) = \hat{\lambda}(\mathbf{B})^T, \quad i, j \in S,$$

où l'on a utilisé les expressions tensorielles des flux de transport en fonction des gradients des variables macroscopiques données dans les sections précédentes. Comme les matrices $\mathbf{M}^{\parallel}$ et $\mathbf{M}^{\perp}$ sont des matrices symétriques et des fonctions paires du

champ magnétique $\mathbf{B}$, comme la matrice $\mathbf{M}^\odot$ est une matrice antisymétrique et une fonction impaire de $\mathbf{B}$, et comme les coefficients de transport $D_{ij}^\parallel, D_{ij}^\perp, D_{ij}^\odot, i, j \in S$, $\theta_i^\parallel, \theta_i^\perp, \theta_i^\odot, i \in S$, $\hat{\lambda}^\parallel, \hat{\lambda}^\perp$ et $\hat{\lambda}^\odot$ sont des fonctions paires de $\mathbf{B}$, les relations sont immédiatement vérifiées pour les coefficients $\theta_i, i \in S$ et $\hat{\lambda}$. Par ailleurs, les relations tensorielles sur les coefficients $D_{ij}, i, j \in S$, se traduisent sous la forme

$$D_{ij}^\parallel = D_{ji}^\parallel, \quad D_{ij}^\perp = D_{ji}^\perp, \quad D_{ij}^\odot = D_{ji}^\odot, \quad i, j \in S.$$

Comme les matrices $D^\parallel, D^\perp$ et $D^\odot$ sont symétriques, on conclut que les relations de Onsager sont vérifiées par les coefficients de diffusion.

En ce qui concerne les coefficients de viscosité, on récrit l'expression (I.115) du tenseur de viscosité Π sous la forme

$$\Pi_i = - \sum_{j \in C} \left(\kappa \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^\kappa + \eta_1 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_1} + \eta_2 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_2} + \eta_3 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_3} + \eta_4 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_4} + \eta_5 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_5} \right) \partial_i \mathbf{v}, \quad i \in C,$$

où C est l'ensemble $\{1, 2, 3\}$, Π_i la i^e colonne du tenseur Π pour $i \in C$ et où les matrices $\hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^\kappa, \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_\alpha}, \alpha \in \{1, 2, 3, 4, 5\}, i, j \in C$, sont définies par

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^\kappa &= \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_1} &= \delta_{ij} \mathbb{I} + \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i - \frac{2}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_2} &= 2\delta_{ij} \mathbf{R}(\mathbf{B}) + \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) + 2\mathbf{e}_i^T \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathbb{I}, \\ \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_3} &= 2\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} - \frac{2}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j + 2\mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \mathbf{R}(\mathbf{B}), \\ \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_4} &= -4\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbb{I} + \delta_{ij} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + \mathcal{B}_i \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{B} + \mathcal{B}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{e}_i, \\ \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_5} &= -2\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) - 2\mathbf{e}_i^T \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}. \end{aligned}$$

En utilisant ces notations, les relations de Onsager concernant les coefficients de viscosité s'écrivent

$$\begin{aligned} \left(\kappa \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^\kappa + \eta_1 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_1} + \eta_2 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_2} + \eta_3 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_3} + \eta_4 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_4} + \eta_5 \hat{\mathbf{B}}_{ij,v}^{\eta_5} \right) (-\mathbf{B}) = \\ \left(\kappa \hat{\mathbf{B}}_{ji,v}^\kappa + \eta_1 \hat{\mathbf{B}}_{ji,v}^{\eta_1} + \eta_2 \hat{\mathbf{B}}_{ji,v}^{\eta_2} + \eta_3 \hat{\mathbf{B}}_{ji,v}^{\eta_3} + \eta_4 \hat{\mathbf{B}}_{ji,v}^{\eta_4} + \eta_5 \hat{\mathbf{B}}_{ji,v}^{\eta_5} \right)^T (\mathbf{B}), \quad i, j \in C, \end{aligned}$$

relations qui sont clairement vérifiées en utilisant le fait que la matrice $\mathbf{R}(\mathbf{B})$ est antisymétrique et impaire par rapport à $\mathbf{B}$.

I.7 Structure des systèmes linéaires de transport

Pour évaluer en pratique les coefficients de transport, les équations intégrales de Boltzmann linéarisées sont résolues approximativement en utilisant une approche variationnelle. Les coefficients de transport des mélanges multiespèces peuvent donc être évalués en résolvant de grands systèmes linéaires [EG94]. Bien qu'une inversion directe de ces systèmes soit théoriquement imaginable, celle-ci est extrêmement coûteuse dans la plupart des applications pratiques concernant les mélanges multidimensionnels [EG95]. Poursuivant les travaux précédents sur les mélanges non ionisés [EG94, EG95, EG96, Gio99], on étudie maintenant la structure mathématique des systèmes linéaires de transport résultant du cadre cinétique décrit dans les sections précédentes. On donne en particulier un développement en série convergente des coefficients de transport, ce qui fournit, par troncature, des expressions approchées de précision arbitraire de ces coefficients.

I.7.1 Formulation variationnelle

On doit résoudre différentes équations intégrales linéaires. Pour déterminer les coefficients de transport $\lambda^\parallel, \lambda^\perp, \lambda^\odot, D_{ij}^\parallel, D_{ij}^\perp, D_{ij}^\odot, i, j \in S, \theta_i^\parallel, \theta_i^\perp, \theta_i^\odot, \theta_i^\parallel, \theta_i^\perp, \theta_i^\odot, i \in S$, on doit résoudre les deux systèmes correspondant à $\hat{\lambda}$,

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi^{\hat{\lambda}(1)}) = \Psi^{\hat{\lambda}}, \quad (\text{I.54a})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\hat{\lambda}(1)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.55a})$$

et

$$\left(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + iB\mathcal{F}^{q^1} \right) (\varphi^{\hat{\lambda}(2)}) = \Psi^{\hat{\lambda}}, \quad (\text{I.54b})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\hat{\lambda}(2)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.55b})$$

et les systèmes correspondant à $D_j, j \in S$,

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi^{D_j(1)}) = \Psi^{D_j}, \quad j \in S, \quad (\text{I.63a})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{D_j(1)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad j \in S, \quad (\text{I.64a})$$

et

$$(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + iB\mathcal{F}^{q^1})(\varphi^{D_j(2)}) = \Psi^{D_j}, \quad j \in S, \quad (\text{I.63b})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{D_j(2)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad j \in S. \quad (\text{I.64b})$$

En ce qui concerne la viscosité volumique κ et les viscosités de cisaillement $\eta_1, \dots, \eta_5$, on doit résoudre le système correspondant à κ

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\phi^{\kappa}) = \Psi^{\kappa}, \quad (\text{I.80})$$

$$\langle\langle f^0 \phi^{\kappa}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.79b})$$

et les trois systèmes correspondants à η

$$\mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\varphi^{\eta(1)}) = \Psi^{\eta}, \quad (\text{I.74a})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\eta(1)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.75a})$$

$$(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + 2iB\mathcal{F}^{q^2})(\varphi^{\eta(2)}) = \Psi^{\eta}, \quad (\text{I.74b})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\eta(2)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}, \quad (\text{I.75b})$$

et

$$(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + iB\mathcal{F}^{q^2})(\varphi^{\eta(3)}) = \Psi^{\eta}, \quad (\text{I.74c})$$

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\eta(3)}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.75c})$$

On introduit alors un problème générique qui contient tous les problèmes précédents : pour un coefficient de transport μ , on cherche à résoudre une équation intégrale linéaire qui peut s'écrire sous la forme

$$(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + i\mathcal{F}^{\mathcal{B}})\varphi^{\mu} = \Psi^{\mu}, \quad (\text{I.128})$$

où $\mathcal{F}^{\mathcal{B}}$ désigne soit l'opérateur nul, soit l'opérateur $B\mathcal{F}^{q^1}$, soit l'opérateur $B\mathcal{F}^{q^2}$, soit enfin l'opérateur $2B\mathcal{F}^{q^2}$. Cette équation intégrale doit être complétée par les contraintes scalaires

$$\langle\langle f^0 \varphi^{\mu}, \psi^l \rangle\rangle = 0, \quad l \in \{1, \dots, n^s + 4\}. \quad (\text{I.129})$$

Le coefficient de transport μ est généralement obtenu par un produit scalaire de la forme $\mu = \langle\langle f^0 \varphi^{\mu}, \Psi^{\mu} \rangle\rangle$. Les équations intégrales linéaires (I.128) et (I.129) peuvent se résoudre à l'aide d'une méthode variationnelle.

On commence par choisir un espace de dimension finie

$$\mathcal{A} = \text{Vect}\{\xi^{rk}, (r, k) \in \mathcal{B}\},$$

où les fonctions ξ^{rk} , $(r, k) \in \mathcal{B}$, sont les fonctions de base et $\mathcal{B}$ l'ensemble des indices de ces fonctions. L'ensemble des indices des fonctions de base vérifie $\mathcal{B} \subset F \times S$, où F

désigne un ensemble d'indices de fonctions types. On notera alors ω la dimension de l'espace $\mathcal{A}$. Les fonctions de base ξ^{rk} , $(r, k) \in \mathcal{B}$, sont généralement choisies comme des combinaisons linéaires des fonctions ϕ^{a0cdk} définies par

$$\phi^{a0cdk}(\mathbf{C}_k, \mathbf{K}) = \left(S_{a+1/2}^c(\mathbf{C}_k \cdot \mathbf{C}_k) W_k^d(\mathcal{E}_{k\mathbf{K}}) \overline{\otimes^a \mathbf{C}_k} \delta_{ki} \right)_{i \in \mathbf{S}},$$

où a , c et d sont des entiers, $S_{a+1/2}^c$ est le polynôme de Sonine d'ordre c et de paramètre $a + 1/2$, W_k^d est le polynôme de Wang Chang et Uhlenbeck d'ordre d pour la k^e espèce et $\overline{\otimes^a \mathbf{C}_k}$ le tenseur d'ordre a donné par

$$\overline{\otimes^0 \mathbf{C}_k} = 1, \quad \overline{\otimes^1 \mathbf{C}_k} = \mathbf{C}_k, \quad \overline{\otimes^2 \mathbf{C}_k} = \mathbf{C}_k \otimes \mathbf{C}_k - \frac{1}{3} \mathbf{C}_k \cdot \mathbf{C}_k \mathbb{I},$$

et on rappelle que les vecteurs $\mathbf{C}_k$ sont définis par

$$\mathbf{C}_k = \sqrt{\frac{\mathbf{m}_k}{2k_B T}} \mathbf{C}_k, \quad k \in \mathbf{S}.$$

Les polynômes de Sonine sont définis par

$$S_\alpha^c(x) = \frac{1}{c!} x^{-\alpha} e^x \frac{d^c}{dx^c} (x^{c+\alpha} e^{-x}) = \sum_{i=0}^c \frac{(-1)^i}{i!} \binom{c+\alpha}{c-i} x^i.$$

Pour définir les polynômes de Wang Chang et Uhlenbeck pour la k^e espèce, on commence par considérer l'ensemble fini des énergies internes réduites $\{\mathcal{E}_{k\mathbf{K}}, \mathbf{K} \in \mathfrak{Q}_k\}$ et les dégénérescences positives associées $\{\alpha_{k\mathbf{K}}, \mathbf{K} \in \mathfrak{Q}_k\}$. Pour P et Q deux polynômes, on définit le produit scalaire de Wang Chang et Uhlenbeck par

$$\langle P, Q \rangle_{\text{WCU}} = \frac{1}{\sum_{\mathbf{K} \in \mathfrak{Q}_k} \alpha_{k\mathbf{K}} e^{-\mathcal{E}_{k\mathbf{K}}}} \sum_{\mathbf{K} \in \mathfrak{Q}_k} \alpha_{k\mathbf{K}} P(\mathcal{E}_{k\mathbf{K}}) Q(\mathcal{E}_{k\mathbf{K}}) e^{-\mathcal{E}_{k\mathbf{K}}}.$$

Le produit $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\text{WCU}}$ est une forme bilinéaire symétrique définie positive sur l'ensemble des polynômes de degré $d < \#\mathfrak{Q}_k$, où $\#\mathfrak{Q}_k$ est le nombre d'états énergétiques distincts. On définit alors les polynômes de Wang Chang et Uhlenbeck de degré $d < \#\mathfrak{Q}_k$ comme l'orthonormalisée pour le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\text{WCU}}$ de la base canonique de $\mathbb{R}^{\#\mathfrak{Q}_k-1}$. On note que les fonctions ϕ^{a0cdk} ne sont alors définies que pour $d < \#\mathfrak{Q}_k$.

Les fonctions φ^μ peuvent alors se développer sous la forme

$$\varphi^\mu = \sum_{(r,k) \in \mathcal{B}} \alpha_k^r \xi^{rk}, \quad (\text{I.130})$$

où les coefficients α_k^r sont des scalaires complexes. On utilise une approche de Galerkin (hermitienne) dans le sens où l'on demande à ce que la différence entre l'approximation de $(\mathcal{F}^{\mathcal{S}} + \mathbf{i}\mathcal{F}^{\mathcal{B}})\varphi^\mu$ et Ψ^μ soit dans l'orthogonal de l'espace $\mathcal{A}$. Si on considère une fonction quelconque de l'espace $\mathcal{A}$, que l'on notera ξ et qui se développe $\xi = \sum_{(r,k) \in \mathcal{B}} x_k^r \xi^{rk}$ dans la base $\mathcal{B}$, les composantes $x = (x_k^r)_{(k,r) \in \mathcal{B}}$ forment un vecteur de $\mathbb{C}^\omega$ et l'ensemble $\mathcal{B}$ peut naturellement être utilisé comme un ensemble d'indices. Pour $x, y \in \mathbb{C}^\omega$, le produit scalaire $\langle x, y \rangle$ est donné par la formule $\langle x, y \rangle = \sum_{(r,k) \in \mathcal{B}} x_k^r \bar{y}_k^r$, où $\bar{}$ désigne la prise de conjugué. Une matrice A de $\mathbb{C}^{\omega, \omega}$ s'écrira $A = (A_{kl}^{rs})_{(r,k), (s,l) \in \mathcal{B}}$. En utilisant ces notations, les coefficients α_k^r , $(r, k) \in \mathcal{B}$, forment un vecteur noté $\alpha = (\alpha_k^r)_{(r,k) \in \mathcal{B}} \in \mathbb{C}^\omega$ qui est solution d'un système linéaire sous contrainte s'écrivant sous la forme

$$\begin{cases} (G^{\mathcal{S}} + \mathbf{i}\tilde{G}^{\mathcal{B}})\alpha = \beta, \\ \alpha \in \mathcal{C}, \end{cases} \quad (\text{I.131})$$

où on a défini

$$\begin{aligned} (G^{\mathcal{S}})_{kl}^{rs} &= \langle f^0 \mathcal{F}^{\mathcal{S}}(\xi^{sl}), \xi^{rk} \rangle = \llbracket \xi^{sl}, \xi^{rk} \rrbracket, \\ (\tilde{G}^{\mathcal{B}})_{kl}^{rs} &= \langle f^0 \mathcal{F}^{\mathcal{B}}(\xi^{sl}), \xi^{rk} \rangle, \\ \beta_k^r &= \langle f^0 \Psi^\mu, \xi^{rk} \rangle. \end{aligned}$$

De plus, on a introduit l'espace vectoriel des contraintes $\mathcal{C}$ par

$$\mathcal{C} = (\text{Vect}\{\mathcal{G}^{l\nu}, l \in \{1, \dots, n^s+4\}, \nu \in \{1, \dots, n^\tau\}\})^\perp,$$

où les vecteurs des contraintes ont pour composantes

$$\mathcal{G}_k^{r\nu} = \langle f^0 \xi^{rk}, \mathcal{T}_\nu \psi^l \rangle, \quad l \in \{1, \dots, n^s+4\}, \nu \in \{1, \dots, n^\tau\}.$$

Ici, les vecteurs ψ^l , $l \in \{1, \dots, n^s+4\}$, sont les invariants scalaires de collision tandis que la famille des vecteurs $\mathcal{T}_\nu$, $\nu \in \{1, \dots, n^\tau\}$ est la base canonique des tenseurs du même type que φ^μ , et n^τ est la dimension de l'espace tensoriel correspondant. C'est-à-dire que $n^\tau = 1$ dans le cas scalaire, $n^\tau = 3$ dans le cas vectoriel et $n^\tau = 9$ dans le cas matriciel. On peut remarquer que, grâce à l'isotropie, l'espace des contraintes est en pratique au plus de dimension un [EG94]. Finalement, les coefficients de transport sont évalués par de simples produits scalaires de la forme

$$\mu = \langle \alpha, \beta' \rangle,$$

où β' désigne un vecteur de $\mathbb{C}^\omega$.

Il semble alors judicieux de choisir comme base de fonctions les polynômes réels usuels. Dans cette situation, la matrice $G^{\mathcal{J}}$ est la même que celle obtenue pour un gaz neutre, sans champ magnétique et la matrice $\tilde{G}^{\mathbf{B}}$ est une matrice réelle qui n'a pas de structure simple. En particulier, on peut utiliser la totalité du formalisme développé en [EG94, EG96] pour la matrice $G^{\mathcal{J}}$, car cette matrice est symétrique semi-définie positive et $\beta \in R(G^{\mathcal{J}}) = N(G^{\mathcal{J}})^{\perp}$. La propriété du caractère bien posé $N(G^{\mathcal{J}})_{\oplus} \mathcal{C} = \mathbb{R}^{\omega}$ (associée au système pour lequel $\tilde{G}^{\mathbf{B}} = 0$) est réalisée si l'espace d'approximation variationnelle de Galerkin $\mathcal{A}$ est orthogonal au sous-espace vectoriel de l'espace $\mathcal{J}$ des invariants de collisions qui ont le même rang tensoriel [EG94, EG96], c'est-à-dire sous la condition

$$\mathcal{J} = (\mathcal{J} \cap \mathcal{A})_{\oplus} (\mathcal{J} \cap \mathcal{A}^{\perp}),$$

où $\mathcal{J} \cap \mathcal{A}^{\perp}$ représente les éléments de $\mathcal{J}$ orthogonaux à $\mathcal{A}$ pour la forme bilinéaire $\langle\langle f^0, \cdot, \cdot \rangle\rangle$.

Une analyse minutieuse révèle alors que le système écrit sous sa forme initiale (I.131) n'est pas bien structuré. En particulier, le noyau $N(G^{\mathcal{J}} + i\tilde{G}^{\mathbf{B}})$ n'est pas connu explicitement, il n'y a pas de propriété simple de positivité associée à la matrice $G^{\mathcal{J}} + i\tilde{G}^{\mathbf{B}}$ et la convergence des techniques itératives n'est pas garantie. Par conséquent, on récrit ce système sous une nouvelle forme dont on verra qu'elle possède une meilleure structure mathématique et dont l'unique solution sera encore α . Dans ce but, on introduit la matrice

$$G^{\mathbf{B}} = \tilde{G}^{\mathbf{B}} P_{\mathcal{C}, N(G^{\mathcal{J}})},$$

où pour deux sous-espaces supplémentaires $A_{\oplus} B = \mathbb{C}^{\omega}$, on note $P_{A,B}$ le projecteur sur A le long de B . Le système modifié correspondant s'écrit alors

$$\begin{cases} (G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})\alpha = \beta, \\ \alpha \in \mathcal{C}, \end{cases} \quad (\text{I.132})$$

et ce système est strictement équivalent au système (I.131) puisque $\alpha = P_{\mathcal{C}, N(G^{\mathcal{J}})}\alpha$. La structure de la matrice $G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}}$ peut être étudiée en utilisant essentiellement les mêmes techniques que celles utilisées pour la matrice $G^{\mathcal{J}}$ dans le cas non ionisé [EG94].

Parmi les propriétés importantes on peut donner les relations $\overline{G^{\mathbf{B}}}^{\text{T}} = G^{\mathbf{B}}$, $N(G^{\mathcal{J}}) \subset N(G^{\mathbf{B}})$ et $R(G^{\mathbf{B}}) \subset N(G^{\mathcal{J}})^{\perp}$. De plus, on peut voir que le noyau $N(G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})$ est engendré dans $\mathbb{C}^{\omega}$ par les mêmes vecteurs réels que ceux qui engendrent $N(G^{\mathcal{J}})$ dans $\mathbb{R}^{\omega}$, et que $R(G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})$ est l'orthogonal au sens hermitien de $N(G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})$ même si la matrice $G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}}$ n'est pas hermitienne. Ainsi, la propriété du caractère bien posé

$$N(G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})_{\oplus} \mathcal{C} = \mathbb{C}^{\omega},$$

est une conséquence directe du résultat similaire dans $\mathbb{R}^\omega$ sur $G^\mathcal{S}$ et comme on a $\beta \in R(G^\mathcal{S} + \mathbf{i}G^\mathbf{B})$, on obtient que le système linéaire (I.132) est bien posé.

I.7.2 Techniques itératives

On introduit la matrice de transport creuse $db(G^\mathcal{S}) \in \mathbb{R}^{\omega, \omega}$ associée à la partie non perturbée du système linéaire de transport [EG94]

$$db(G^\mathcal{S})_{kl}^{rs} = (G^\mathcal{S})_{kl}^{rs} \delta_{kl}, \quad (r, k), (s, l) \in \mathcal{B}.$$

La matrice $db(G^\mathcal{S})$ joue un rôle fondamental dans le développement asymptotique des coefficients de transport [EG94]. On peut établir que la matrice $2db(G^\mathcal{S}) - G^\mathcal{S}$ est une matrice symétrique semi-définie positive pour $n^s \geq 1$ et définie positive pour $n^s \geq 3$, le noyau de cette matrice étant facilement identifié dans le cas $n^s \leq 2$. La structure de cette matrice montre ainsi que le cas général pour les mélanges est $n^s \geq 3$ et que les mélanges binaires ne sont qu'un cas dégénéré en inadéquation avec la théorie générale [EG94]. Pour obtenir les développements asymptotiques des coefficients de transport, on utilise à présent la théorie des méthodes itératives projetées pour les systèmes linéaires singuliers sous contraintes. De nombreux résultats mathématiques ont été obtenus dans le cadre du transport multiespèces [EG94, EG97].

On introduit une décomposition matricielle

$$G^\mathcal{S} + \mathbf{i}G^\mathbf{B} = M - Z$$

et la matrice d'itération correspondante

$$T = M^{-1}Z = I - M^{-1}(G^\mathcal{S} + \mathbf{i}G^\mathbf{B}).$$

Soit $P = P_{\mathcal{C}, N(G^\mathcal{S})}$ le projecteur oblique sur $\mathcal{C}$ le long de $N(G^\mathcal{S})$ et soit $\beta \in R(G^\mathcal{S} + \mathbf{i}G^\mathbf{B})$, $x_0 \in \mathbb{C}^\omega$ et $y_0 = Px_0$. On considère pour $i \geq 0$ les itérés

$$x_{i+1} = Tx_i + M^{-1}\beta, \quad y_{i+1} = PTy_i + PM^{-1}\beta.$$

La matrice de projection P assure qu'à chaque itération l'approximation des fonctions de distribution perturbées satisfait les contraintes physiques. Le but est de choisir M de façon à ce que les puissances de la matrice T convergent [EG94]. Dans cette situation, le produit PT a un rayon spectral strictement inférieur à 1, les itérés x_i , $i \geq 1$, et y_i , $i \geq 1$, convergent et

$$\lim_{i \rightarrow \infty} y_i = P(\lim_{i \rightarrow \infty} x_i) = \alpha,$$

où α est l'unique solution du système linéaire de transport (I.132). En définissant les coefficients de transport approximatés

$$\mu_{[i]} = \left\langle \sum_{j=0}^i (PT)^j PM^{-1} P^T \beta, \beta' \right\rangle,$$

on obtient

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \mu_{[i]} = \left\langle \sum_{j=0}^{\infty} (PT)^j PM^{-1} P^T \beta, \beta' \right\rangle = \mu,$$

et tous les coefficients de transport s'expriment comme des séries convergentes.

Un premier choix approprié pour la matrice M est $M = db(G^{\mathcal{J}})$ dans le cas général $n^s \geq 3$, tandis que dans les cas particuliers $n^s \leq 2$, la diagonale principale de la matrice $db(G^{\mathcal{J}})$ doit être pondérée par des coefficients positifs. En effet, pour $M = db(G^{\mathcal{J}})$, il a été établi que le rayon spectral de la matrice $PM^{-1}(M - G^{\mathcal{J}})$ est strictement inférieur à 1 car la matrice $2M - G^{\mathcal{J}}$ est définie positive [EG94]. Par conséquent, comme $PT = PM^{-1}(M - G^{\mathcal{J}}) - iPM^{-1}G^{\mathcal{B}}$, le rayon spectral de la matrice PT est strictement inférieur à 1 lorsque $G^{\mathcal{B}}$ est suffisamment petit, c'est-à-dire pourvu que le champ magnétique soit suffisamment petit.

Pour obtenir un algorithme convergent dans le cas général, il est nécessaire d'inclure la matrice $iG^{\mathcal{B}}$ dans la matrice M . Plus précisément, on considère le choix $M = db(G^{\mathcal{J}}) + iG^{\mathcal{B}}$ dans le cas général $n^s \geq 3$ et les modifications nécessaires à la diagonale de $db(G^{\mathcal{J}})$ lorsque $n^s \leq 2$. Il est encore simple d'inverser la matrice $M = db(G^{\mathcal{J}}) + iG^{\mathcal{B}}$ en pratique car la partie complexe $iG^{\mathcal{B}}$ est soit une matrice diagonale, soit une perturbation de rang un d'une matrice diagonale [FK72]. En définissant $M = db(G^{\mathcal{J}}) + iG^{\mathcal{B}}$, on obtient $T = (db(G^{\mathcal{J}}) + iG^{\mathcal{B}})^{-1}(db(G^{\mathcal{J}}) - G^{\mathcal{J}})$ et on considère x un vecteur propre de la matrice T associé à la valeur propre λ , ce qui implique que

$$\langle (db(G^{\mathcal{J}}) - G^{\mathcal{J}})x, x \rangle = \lambda \langle (db(G^{\mathcal{J}}) + iG^{\mathcal{B}})x, x \rangle.$$

Si $x \in N(G^{\mathcal{J}})$ alors $\lambda = 1$, et si $x \notin N(G^{\mathcal{J}})$ alors $\lambda \neq 1$ et on doit montrer que $|\lambda| < 1$. En utilisant que la matrice $2db(G^{\mathcal{J}}) - G^{\mathcal{J}}$ est définie positive et que le produit scalaire $\langle G^{\mathcal{J}}x, x \rangle$ est strictement positif car $x \notin N(G^{\mathcal{J}})$, on obtient la majoration

$$\langle db(G^{\mathcal{J}})x, x \rangle > |\langle (db(G^{\mathcal{J}}) - G^{\mathcal{J}})x, x \rangle|. \quad (\text{I.133})$$

Nous déduisons de l'inégalité

$$|\langle db(G^{\mathcal{J}})x, x \rangle + i\langle G^{\mathcal{B}}x, x \rangle| = |\langle db(G^{\mathcal{J}})x, x \rangle| + |\langle G^{\mathcal{B}}x, x \rangle| \geq |\langle db(G^{\mathcal{J}})x, x \rangle|,$$

que

$$|\langle (db(G^{\mathcal{J}}) - G^{\mathcal{J}})x, x \rangle| \geq |\lambda| |\langle db(G^{\mathcal{J}})x, x \rangle|. \quad (\text{I.134})$$

En combinant les inégalités (I.133) et (I.134), on conclut que $|\lambda| < 1$ si $x \notin N(G^{\mathcal{J}})$.

Enfin, on montre que $R(\mathbb{I} - T) \cap N(\mathbb{I} - T) = \{0\}$. On considère un élément x dans cet espace. On a donc la relation $x = Tx$ et l'existence d'un élément y tel que $y - Ty = x$. Les éléments x et y vérifient alors le système

$$\begin{cases} (G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})x = 0, \\ (G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})y = -(db(G^{\mathcal{J}}) + iG^{\mathbf{B}})x. \end{cases}$$

En prenant la produit scalaire $\langle (G^{\mathcal{J}} + iG^{\mathbf{B}})y, x \rangle$, on déduit que $\langle db(G^{\mathcal{J}})x, x \rangle = 0$, ce qui implique que $x = 0$. Ceci montre donc que les puissances de la matrice T convergent, ce qui implique que les suites (x_i) et (y_i) convergent vers α .

Le choix $M = db(G^{\mathcal{J}}) + iG^{\mathbf{B}}$ conduit ainsi à des développements asymptotiques convergents des coefficients de transport et cela pour n'importe quel champ magnétique, ce qui généralise les résultats précédemment obtenus pour les mélanges non ionisés [EG94, EG95, EG96].

I.8 Approximation d'ordre un dans le cas $b = 0$

Dans cette section, on s'intéresse au régime correspondant à un champ magnétique peu intense, c'est-à-dire $b = 0$. Ce cas est plus simple que le cas précédent $b = 1$ car il n'y a plus d'anisotropie du milieu : on n'a plus besoin de distinguer les composantes parallèles, orthogonales et transverses. De plus, on ne détaillera pas les calculs car ils sont identiques au cas sans champ magnétique [Gio99].

I.8.1 Equations macroscopiques d'ordre un

Pour le régime $b = 0$, on obtient les équations macroscopiques du premier ordre suivantes

$$\partial_t \rho_i + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_i \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_i \mathbf{V}_i) = \mathbf{m}_i \overline{\omega}_i, \quad i \in \mathbf{S}, \quad (\text{I.135a})$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbb{I}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{\Pi} = \rho \mathbf{g} + q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}) + \mathbf{j} \wedge \mathbf{B}, \quad (\text{I.135b})$$

$$\begin{aligned} \partial_t \left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E} \right) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\left(\frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \mathcal{E} + p \right) \mathbf{v} \right] + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{Q} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v}) \\ = [\rho \mathbf{g} + q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})] \cdot \mathbf{v} + \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (\text{I.135c})$$

Ces équations macroscopiques d'ordre un apparaissent comme des équations de Navier Stokes réactives compressibles contenant des termes exprimant les effets de la force de Lorentz sur le gaz dans son ensemble et ceux de l'échauffement Ohmique.

I.8.2 Flux et coefficients de transport

Pour le régime $b = 0$, les vitesses de diffusion $\mathbf{V}_i$, $i \in S$, s'écrivent

$$\mathbf{V}_i = -\theta_i \partial_{\mathbf{x}} \log T - \sum_{j \in S} D_{ij} \mathbf{d}_j, \quad i \in S, \quad (\text{I.136})$$

avec

$$D_{ij} = \frac{1}{3} p k_B T [\phi^{D_i}, \phi^{D_j}], \quad \theta_i = -\frac{1}{3} [\phi^{D_i}, \phi^{\hat{\lambda}}].$$

On peut alors définir les taux de diffusion thermiques $\chi = (\chi_i)_{i \in S}$, par le système linéaire

$$\begin{cases} D\chi = \theta, \\ \langle \chi, \mathbf{u} \rangle = 0, \end{cases} \quad (\text{I.137})$$

et on obtient une expression alternative des vitesses de diffusion des espèces

$$\mathbf{V}_i = - \sum_{j \in S} D_{ij} (\mathbf{d}_j + \chi_j \partial_{\mathbf{x}} \log T), \quad i \in S. \quad (\text{I.138})$$

Le flux de chaleur $\mathcal{Q}$ est donné par

$$\mathcal{Q} = -\hat{\lambda} \partial_{\mathbf{x}} T - p \sum_{i \in S} \theta_i \mathbf{d}_i + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \bar{\mathcal{E}}_i \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i, \quad (\text{I.139})$$

avec

$$\hat{\lambda} = \frac{1}{3 k_B T^2} [\phi^{\hat{\lambda}}, \phi^{\hat{\lambda}}].$$

En introduisant le nouveau coefficient

$$\lambda = \hat{\lambda} - \frac{p}{T} \sum_{i,j \in S} D_{ij} \chi_i \chi_j,$$

on obtient une autre expression du flux de chaleur

$$\mathcal{Q} = -\lambda \partial_{\mathbf{x}} T + p \sum_{i \in S} \chi_i \mathbf{V}_i + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \bar{\mathcal{E}}_i \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i. \quad (\text{I.140})$$

De plus, pour le régime $a = 1$, l'expression du tenseur de viscosité est la suivante

$$\mathbf{\Pi} = -\kappa \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} \mathbb{I} - \eta \mathbf{S}, \quad (\text{I.141})$$

avec

$$\kappa = \frac{1}{9}k_B T \llbracket \phi^\kappa, \phi^\kappa \rrbracket, \quad \eta = \frac{1}{10}k_B T \llbracket \phi^\eta, \phi^\eta \rrbracket.$$

Finalement, la structure mathématique des systèmes linéaires de transport devant être résolus pour évaluer les coefficients de transport a déjà été étudiée par A. Ern et V. Giovangigli [EG94].

I.8.3 Production d'entropie

L'équation de conservation de l'entropie est similaire à l'équation (I.126a) mais le terme source devient

$$\begin{aligned} \Upsilon = & \kappa (\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v})^2 + \eta \mathbf{S} : \mathbf{S} + \frac{\lambda}{T^2} \partial_{\mathbf{x}} T \cdot \partial_{\mathbf{x}} T \\ & + p \sum_{i,j \in \mathcal{S}} D_{ij} (\mathbf{d}_i + \chi_i \partial_{\mathbf{x}} \log T) \cdot (\mathbf{d}_i + \chi_i \partial_{\mathbf{x}} \log T). \end{aligned} \quad (\text{I.142})$$

La production d'entropie est donc clairement positive.

I.9 Annexe : Isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé

Dans cette annexe, on étudiera certaines propriétés de l'opérateur de Boltzmann linéarisé, noté $\mathcal{F}$ défini en (I.37) page 41. Ces propriétés sont les suivantes : $\mathcal{F}$ transforme toute famille de fonctions du type $(\mathbf{u}_i)_{i \in S}$ où $\mathbf{u}_i$ est une fonction scalaire des variables $\mathbf{C}_i, (\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}_i)^2$ et $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$ multipliée par un vecteur ou un tenseur construit à partir des vecteurs $\mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B}$ en une famille de fonctions du même type. On parlera alors d'isotropie de l'opérateur de Boltzmann linéarisé.

Pour démontrer ces propriétés, on commencera par l'étude des collisions non réactives, puis on traitera le cas des fonctions du type $\mathbf{u}_i = u_i \mathbf{C}_i$ et enfin on expliquera comment généraliser ces propriétés aux autres cas.

I.9.1 Etude des collisions non réactives

On renvoie au livre de J.H. Ferziger et H.G. Kaper [FK72] pour l'étude dans le cas de particules monoatomiques et aux articles de E.A. Mason et L. Monchrick [MM63] et de L. Waldmann [Wal58] dans le cas de particules polyatomiques.

On considère une collision entre deux particules d'indices respectifs i et j , de masses m_i et m_j , de vitesses pré-collisionnelles $\mathbf{c}_i$ et $\mathbf{c}_j$, d'énergies internes pré-collisionnelles $\mathcal{E}_{iI}$ et $\mathcal{E}_{jJ}$, de vitesses post-collisionnelles $\mathbf{c}'_i$ et $\mathbf{c}'_j$ et d'énergies internes post-collisionnelles $\mathcal{E}_{iI'}$ et $\mathcal{E}_{jJ'}$.

On notera $m_{ij} = (m_i m_j) / (m_i + m_j)$ la masse réduite, $\hat{m}_i = m_i / (m_i + m_j)$ et $\hat{m}_j = m_j / (m_i + m_j)$ les masses relatives, $\mathbf{g} = \mathbf{c}_j - \mathbf{c}_i$ et $\mathbf{g}' = \mathbf{c}'_j - \mathbf{c}'_i$ les vitesses relatives et g et g' les normes des vecteurs $\mathbf{g}$ et $\mathbf{g}'$.

La conservation de la quantité de mouvement lors de la collision s'écrit

$$m_i \mathbf{c}_i + m_j \mathbf{c}_j = m_i \mathbf{c}'_i + m_j \mathbf{c}'_j,$$

la conservation de l'énergie

$$\frac{1}{2} m_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{c}_i + \frac{1}{2} m_j \mathbf{c}_j \cdot \mathbf{c}_j + \mathcal{E}_{iI} + \mathcal{E}_{jJ} = \frac{1}{2} m_i \mathbf{c}'_i \cdot \mathbf{c}'_i + \frac{1}{2} m_j \mathbf{c}'_j \cdot \mathbf{c}'_j + \mathcal{E}_{iI'} + \mathcal{E}_{jJ'}.$$

La combinaison de ces deux dernières équations permet d'établir la relation suivante

$$\frac{1}{2} m_{ij} (g^2 - g'^2) = \mathcal{E}_{iI'} + \mathcal{E}_{jJ'} - \mathcal{E}_{iI} - \mathcal{E}_{jJ}. \quad (\text{I.143})$$

De plus, on peut écrire les systèmes d'équations linéaires

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{c}'_i = \widehat{\mathbf{m}}_i \mathbf{c}_i + \widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{c}_j - \widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{g}' \\ \mathbf{c}'_j = \widehat{\mathbf{m}}_i \mathbf{c}_i + \widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{c}_j + \widehat{\mathbf{m}}_i \mathbf{g}' \\ \mathbf{g} = \mathbf{c}_j - \mathbf{c}_i \end{array} \right. \quad \text{et} \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{c}_i = \widehat{\mathbf{m}}_i \mathbf{c}'_i + \widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{c}'_j - \widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{g} \\ \mathbf{c}_j = \widehat{\mathbf{m}}_i \mathbf{c}'_i + \widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{c}'_j + \widehat{\mathbf{m}}_i \mathbf{g} \\ \mathbf{g}' = \mathbf{c}'_j - \mathbf{c}'_i \end{array} \right. ,$$

dont on déduit la relation

$$d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\mathbf{g}' = d\mathbf{c}'_i d\mathbf{c}'_j d\mathbf{g}, \quad (\text{I.144})$$

en observant que l'application qui à $(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_j, \mathbf{g}')$ associe $(\mathbf{c}'_i, \mathbf{c}'_j, \mathbf{g})$ est involutive.

En notant $\mathbf{g} = g\widehat{\mathbf{g}}$ et $\mathbf{g}' = g'\widehat{\mathbf{g}}'$, où $\widehat{\mathbf{g}}$ et $\widehat{\mathbf{g}}'$ sont des vecteurs unitaires, on obtient en utilisant les équations (I.143) et (I.144)

$$\frac{1}{g} d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\widehat{\mathbf{g}}' = \frac{1}{g'} d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\widehat{\mathbf{g}}. \quad (\text{I.145})$$

Le nombre de collisions dans le volume $d\mathbf{x}$ autour de $\mathbf{x}$, pendant l'intervalle de temps dt entre des particules de type i et j dont les indices d'états quantiques sont I et J et dont les vitesses sont dans $d\mathbf{c}_i$ et $d\mathbf{c}_j$ autour de $\mathbf{c}_i$ et de $\mathbf{c}_j$, avec des paramètres géométriques de collisions dans $d\chi$ et $d\varepsilon$ autour de χ et de ε , peut se mettre sous la forme

$$f_i(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}_i, \text{I}) f_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}_j, \text{J}) \sigma_{ij}^{\text{IJ}'\text{J}'} g \sin(\chi) d\mathbf{c}_i d\mathbf{c}_j d\mathbf{x} dt d\chi d\varepsilon,$$

où $\sigma_{ij}^{\text{IJ}'\text{J}'}$ est la section efficace. Celle-ci dépend des particules considérées, mais en toute généralité, $\sigma_{ij}^{\text{IJ}'\text{J}'}$ est une fonction de g et de χ .

De même, on obtient que le nombre de collisions dans le volume $d\mathbf{x}$ autour de $\mathbf{x}$, pendant l'intervalle de temps dt , qui donnent des particules de type i et j dont les indices d'états quantiques sont I' et J', et dont les vitesses sont dans $d\mathbf{c}'_i$ et $d\mathbf{c}'_j$ autour de $\mathbf{c}'_i$ et de $\mathbf{c}'_j$, avec des paramètres géométriques de collisions dans $d\chi$ et $d\varepsilon$ autour de χ et de ε , est

$$f_i(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}'_i, \text{I}') f_j(t, \mathbf{x}, \mathbf{c}'_j, \text{J}') \sigma_{ij}^{\text{I}'\text{J}'\text{IJ}} g' \sin(\chi) d\mathbf{c}'_i d\mathbf{c}'_j d\mathbf{x} dt d\chi d\varepsilon.$$

Or la mécanique quantique théorique permet de déterminer une relation, appelée propriété de symétrie de la section efficace, qu'on peut écrire sous la forme

$$\alpha_{i\text{I}} \alpha_{j\text{J}} g^2 \sigma_{ij}^{\text{IJ}'\text{J}'} = \alpha_{i\text{I}'} \alpha_{j\text{J}'} g'^2 \sigma_{ij}^{\text{I}'\text{J}'\text{IJ}}. \quad (\text{I.146})$$

où $\alpha_{i\mathbf{l}}$ est la dégénérescence de l'état $\mathbf{l}$ de l'espèce i . Cette propriété se trouve dans l'article [MM63] et plus précisément dans la discussion de L. Waldmann à la fin de cet article, ou bien dans l'article [Wal58].

On obtient alors en combinant les relations (I.145) et (I.146)

$$\alpha_{i\mathbf{l}}\alpha_{j,\mathbf{j}}g\sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'}\mathbf{d}\mathbf{c}_i\mathbf{d}\mathbf{c}_j = \alpha_{i\mathbf{l}'}\alpha_{j,\mathbf{j}'}g'\sigma_{ij}^{\mathbf{l}'\mathbf{j}'\mathbf{l}\mathbf{j}}\mathbf{d}\mathbf{c}'_i\mathbf{d}\mathbf{c}'_j. \quad (\text{I.147})$$

Ainsi, le terme source non réactif se met sous la forme

$$\mathcal{S}(f) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int \left(f'_i f'_j \frac{\alpha_{i\mathbf{l}}\alpha_{j,\mathbf{j}}}{\alpha_{i\mathbf{l}'}\alpha_{j,\mathbf{j}'}} - f_i f_j \right) \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'}\mathbf{g} \sin(\chi) \mathbf{d}\mathbf{c}_j \mathbf{d}\chi \mathbf{d}\varepsilon. \quad (\text{I.148})$$

I.9.2 Cas des fonctions du type $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i$

Dans cette section, on montre que l'opérateur de Boltzmann linéarisé transforme une famille de fonctions de type $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i$ en une famille de fonctions du même type.

En utilisant l'expression (I.147) du terme source non réactif, on met l'opérateur de Boltzmann linéarisé $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}$ défini en (I.37) à la page 41 sous la forme

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_j^0(\mathbf{u}_i + \mathbf{u}_j - \mathbf{u}'_i - \mathbf{u}'_j) \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'}\mathbf{g} \sin(\chi) \mathbf{d}\chi \mathbf{d}\varepsilon \mathbf{d}\mathbf{c}_j, \quad i \in S. \quad (\text{I.149})$$

On s'intéresse dans les sous-sections suivantes à chacun des quatre termes suivants

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(1)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}_i \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'}\mathbf{g} \sin(\chi) \mathbf{d}\chi \mathbf{d}\varepsilon \mathbf{d}\mathbf{c}_j, \quad i \in S, \quad (\text{I.150a})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}_j \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'}\mathbf{g} \sin(\chi) \mathbf{d}\chi \mathbf{d}\varepsilon \mathbf{d}\mathbf{c}_j, \quad i \in S, \quad (\text{I.150b})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_i \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'}\mathbf{g} \sin(\chi) \mathbf{d}\chi \mathbf{d}\varepsilon \mathbf{d}\mathbf{c}_j, \quad i \in S, \quad (\text{I.150c})$$

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(4)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in S} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_j \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'}\mathbf{g} \sin(\chi) \mathbf{d}\chi \mathbf{d}\varepsilon \mathbf{d}\mathbf{c}_j, \quad i \in S. \quad (\text{I.150d})$$

Il est suffisant de montrer que chacun des opérateurs $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(1)}$, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)}$, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}$ et $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(4)}$ possède la propriété d'isotropie puisque l'on a $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}} = \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(1)} + \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)} - \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)} - \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(4)}$.

I.9.2.1 Etude du premier terme

On montre que l'opérateur $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(1)}$ transforme une famille de fonctions de type $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i$ en une famille du même type. On a d'après (I.150a)

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(1)}(\mathbf{u}) &= \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathfrak{Q}_i \\ j, j' \in \mathfrak{Q}_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i \sigma_{ij}^{\mathbf{I}\mathbf{I}'\mathbf{J}\mathbf{J}'} \mathbf{g} \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{c}_j \\ &= \left(\sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathfrak{Q}_i \\ j, j' \in \mathfrak{Q}_j}} \int f_j^0 \sigma_{ij}^{\mathbf{I}\mathbf{I}'\mathbf{J}\mathbf{J}'} \mathbf{g} \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{c}_j \right) \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i. \end{aligned}$$

Or f_j^0 , d'après l'expression donnée en (I.21), est une fonction de

$$\mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j = \mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i.$$

En posant

$$\begin{aligned} f_{\text{pre}}^{(1)} &= \frac{1}{2} [f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) + f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i)], \\ f_{\text{imp}}^{(1)} &= \frac{1}{2} [f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) - f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i)], \end{aligned}$$

on obtient $f_j^0 = f_{\text{pre}}^{(1)} + f_{\text{imp}}^{(1)}$ où $f_{\text{pre}}^{(1)}$ est une fonction paire de $\mathbf{g}$ et $f_{\text{imp}}^{(1)}$ une fonction impaire de $\mathbf{g}$.

Or $f_{\text{imp}}^{(1)} \sigma_{ij}^{\mathbf{I}\mathbf{I}'\mathbf{J}\mathbf{J}'} \mathbf{g}$ est une fonction impaire de $\mathbf{g}$ donc son intégrale sur $\mathbb{R}^3$ est nulle. On obtient donc

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(1)}(\mathbf{u}) = \left(\sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathfrak{Q}_i \\ j, j' \in \mathfrak{Q}_j}} \int f_{\text{pre}}^{(1)} \sigma_{ij}^{\mathbf{I}\mathbf{I}'\mathbf{J}\mathbf{J}'} \mathbf{g} \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g} \right) \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i.$$

Enfin, si on fait une rotation de l'espace, comme les produits scalaires se conservent, on remarque que l'intégrale est invariante. Elle ne dépend donc pas de $\mathbf{C}_i$ mais uniquement de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$. Ainsi, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(1)}(\mathbf{u}) = \mathbf{v}_i^{(1)} \mathbf{C}_i$ où $\mathbf{v}_i^{(1)}$ est une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$.

I.9.2.2 Etude du deuxième terme

On étudie à présent le deuxième terme, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)}(\mathbf{u})$. On a d'après (I.150b)

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathcal{Q}_i \\ j, j' \in \mathcal{Q}_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}_j \mathbf{C}_j \sigma_{ij}^{i'j'} \mathbf{g} \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{c}_j.$$

Or $f_j^0 \mathbf{u}_j$, d'après l'expression donnée en (I.21) est une fonction de

$$\mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j = \mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i.$$

En posant

$$\begin{aligned} f_{\text{pre}}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \mathbf{u}_j (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \right. \\ &\quad \left. + f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \mathbf{u}_j (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \right], \\ f_{\text{imp}}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left[f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \mathbf{u}_j (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \right. \\ &\quad \left. - f_j^0 (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \mathbf{u}_j (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i - 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i) \right], \end{aligned}$$

on obtient $f_j^0 \mathbf{u}_j = f_{\text{pre}}^{(2)} + f_{\text{imp}}^{(2)}$ où $f_{\text{pre}}^{(2)}$ est une fonction paire de $\mathbf{g}$ et $f_{\text{imp}}^{(2)}$ une fonction impaire de $\mathbf{g}$.

Or $f_{\text{imp}}^{(2)} \sigma_{ij}^{i'j'} \mathbf{g}$ et $f_{\text{pre}}^{(2)} \mathbf{g} \sigma_{ij}^{i'j'} \mathbf{g}$ sont des fonctions impaires de $\mathbf{g}$ donc leur intégrale sur $\mathbb{R}^3$ sont nulles. On obtient donc

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathcal{Q}_i \\ j, j' \in \mathcal{Q}_j}} \int (f_{\text{pre}}^{(2)} \mathbf{C}_i + f_{\text{imp}}^{(2)} \mathbf{g}) \sigma_{ij}^{i'j'} \mathbf{g} \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g}.$$

Le même raisonnement que pour le premier terme montre que

$$\sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathcal{Q}_i \\ j, j' \in \mathcal{Q}_j}} \int f_{\text{pre}}^{(2)} \sigma_{ij}^{i'j'} \mathbf{g} \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g}$$

est une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$. Il ne reste donc plus qu'à montrer que

$$\sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathcal{Q}_i \\ j, j' \in \mathcal{Q}_j}} \int f_{\text{imp}}^{(2)} \mathbf{g} \sigma_{ij}^{i'j'} \mathbf{g} \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g}$$

est de la forme voulue.

On supposera que les fonctions $f_{\text{imp}}^{(2)}$ sont analytiques. C'est à dire que les fonctions $f_j^0 \mathbf{u}_j$ sont analytiques. Dans ce cas, on peut écrire

$$\begin{aligned} f_{\text{imp}}^{(2)} &= \sum_{n \in \mathbb{N}} a_n (\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i)^n \\ &= \sum_{k_1, \dots, k_9} b_{k_1, \dots, k_9} g_1^{2k_1+k_7} g_2^{2k_2+k_8} g_3^{2k_3+k_9} C_{i1}^{2k_4+k_7} C_{i2}^{2k_5+k_8} C_{i3}^{2k_6+k_9}, \end{aligned}$$

où g_ν et $C_{i\nu}$ sont les $\nu^{\text{ièmes}}$ composantes des vecteurs $\mathbf{g}$ et $\mathbf{C}_i$ pour $\nu \in \{1, 2, 3\}$ et où l'on a posé $b_{k_1, \dots, k_9} = 2^{k_7+k_8+k_9} (k_1 + \dots + k_9)! a_{k_1+\dots+k_9} / (k_1! \dots k_9!)$. Quand on intègre après avoir multiplié par $\mathbf{g}$, les seuls termes non nuls sont les termes pairs en tous les g_ν . Il est alors nécessaire que les entiers k_7 , k_8 et k_9 vérifient les relations de parités qui sont résumées dans le tableau TAB. I.2

	1 ^{ère} composante	2 ^e composante	3 ^e composante
k_7	impair	pair	pair
k_8	pair	impair	pair
k_9	pair	pair	impair

TAB. I.2 – Relations de parité pour le deuxième terme.

On obtient donc une fonction de $C_{i1}^2, C_{i2}^2, C_{i3}^2$ multipliée par le vecteur $\mathbf{C}_i$. Or cette fonction est invariante par permutation des $C_{i\nu}$, c'est donc une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$. Ainsi, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)}(\mathbf{u}) = v_i^{(2)} \mathbf{C}_i$ où $v_i^{(2)}$ est une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$.

I.9.2.3 Etude du troisième terme

On étudie à présent le troisième terme, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}(\mathbf{u})$. On a d'après (I.150c)

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \Omega_i \\ j, j' \in \Omega_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_i \mathbf{C}'_i \sigma_{ij}^{\text{III}'} g \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{c}_j.$$

D'après l'équation (I.143), on peut écrire $\mathbf{g}' = \sqrt{g^2 + \delta g^2} \hat{\mathbf{g}}'$, où $\hat{\mathbf{g}}'$ est le vecteur unitaire de même direction que $\mathbf{g}'$, qui ne dépend que de χ et de ε , et δg^2 est la constante définie par

$$\delta g^2 = \frac{2}{m_{ij}} (\mathcal{E}_{ii'} + \mathcal{E}_{jj'} - \mathcal{E}_{ii} - \mathcal{E}_{jj}).$$

On en déduit l'expression de $\mathbf{C}'_i$ suivante

$$\mathbf{C}'_i = \mathbf{C}_i + \widehat{\mathbf{m}}_j(\mathbf{g} - \sqrt{g^2 + \delta g^2} \widehat{\mathbf{g}}').$$

Ainsi, on peut écrire

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathfrak{Q}_i \\ j, j' \in \mathfrak{Q}_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_i(\mathbf{C}_i + \widehat{\mathbf{m}}_j(\mathbf{g} - \sqrt{g^2 + \delta g^2} \widehat{\mathbf{g}}')) \sigma_{ij}^{\mathbb{I}\mathbb{I}'j'} g \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g}.$$

Comme

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_j \cdot \mathbf{C}_j &= \mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + 2\mathbf{g} \cdot \mathbf{C}_i, \\ \mathbf{C}'_i \cdot \mathbf{C}'_i &= \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i + \widehat{\mathbf{m}}_j^2(2\mathbf{g} \cdot \mathbf{g} + \delta g^2) + 2\widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{C}_i \cdot \mathbf{g} - 2\sqrt{g^2 + \delta g^2}(\mathbf{C}_i \cdot \widehat{\mathbf{g}}' + \mathbf{g} \cdot \widehat{\mathbf{g}}'), \end{aligned}$$

l'intégrale

$$\sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathfrak{Q}_i \\ j, j' \in \mathfrak{Q}_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_i \sigma_{ij}^{\mathbb{I}\mathbb{I}'j'} g \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g}$$

est invariante par rotation de l'espace. Elle ne dépend donc pas des $C_{i\nu}$ mais uniquement de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$.

Pour le terme

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{i' \in \mathfrak{Q}_i \\ j, j' \in \mathfrak{Q}_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_i \mathbf{g} \sigma_{ij}^{\mathbb{I}\mathbb{I}'j'} g \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g},$$

on utilise la même méthode que pour le terme $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(2)}(\mathbf{u})$. On développe $f_j^0 \mathbf{u}'_i$ en série entière et on peut écrire

$$\begin{aligned} f_j^0 \mathbf{u}'_i &= \sum_{k_1, \dots, k_{24}} c_{k_1, \dots, k_{24}} \sqrt{g^2 + \delta g^2}^{k_{19} + \dots + k_{24}} \widehat{\mathbf{g}}_1^{k_{19} + k_{22} + k_{20} + k_{23}} \widehat{\mathbf{g}}_2^{k_{21} + k_{24}} \\ &\quad \widehat{\mathbf{g}}_3^{2k_1 + k_7 + 2k_{10} + k_{16} + k_{19}} \widehat{\mathbf{g}}_2^{2k_2 + k_8 + 2k_{11} + k_{17} + k_{20}} \widehat{\mathbf{g}}_3^{2k_3 + k_9 + 2k_{12} + k_{18} + k_{21}} \\ &\quad C_{i1}^{2k_4 + k_7 + 2k_{13} + k_{16} + k_{22}} C_{i2}^{2k_5 + k_8 + 2k_{14} + k_{17} + k_{23}} C_{i3}^{2k_6 + k_9 + 2k_{15} + k_{18} + k_{24}}, \end{aligned}$$

les seuls termes qui ont une contribution non nulle après intégration sont ceux pour lesquels les entiers k_n vérifient les relations de parités résumées dans le tableau TAB. I.3.

	1 ^{ère} composante	2 ^e composante	3 ^e composante
$k_7 + k_{16} + k_{22}$	impair	pair	pair
$k_8 + k_{17} + k_{23}$	pair	impair	pair
$k_9 + k_{18} + k_{24}$	pair	pair	impair

TAB. I.3 – Relations de parité pour le troisième terme.

Ainsi, il est possible de factoriser le vecteur $\mathbf{C}_i$ dans l'expression de $f_j^0 \mathbf{u}'_i$, la fonction scalaire multiplicatrice étant identique pour chaque composante et ne dépendant que de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, on obtient ainsi la forme voulue.

Enfin, on effectue le même développement pour le terme

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_i \sqrt{g^2 + \delta g^2} \widehat{\mathbf{g}}' \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'} g \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{g},$$

en échangeant les rôles de $\mathbf{g}$ et de $\widehat{\mathbf{g}}'$, ce qui permet de montrer que ce terme est également de la forme voulue.

Ainsi, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(3)}(\mathbf{u}) = \mathbf{v}_i^{(3)} \mathbf{C}_i$ où $\mathbf{v}_i^{(3)}$ est une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$.

I.9.2.4 Etude du quatrième terme

On étudie à présent le quatrième et dernier terme, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(4)}(\mathbf{u})$. On a d'après (I.150d)

$$\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(4)}(\mathbf{u}) = \sum_{j \in \mathcal{S}} \sum_{\substack{\mathbf{l}' \in \Omega_i \\ \mathbf{j}, \mathbf{j}' \in \Omega_j}} \int f_j^0 \mathbf{u}'_j \mathbf{C}'_j \sigma_{ij}^{\mathbf{l}\mathbf{l}'\mathbf{j}'} g \sin(\chi) d\chi d\varepsilon d\mathbf{C}_j.$$

Le même raisonnement que celui fait dans l'étude du troisième terme permet de conclure car on a la relation

$$\mathbf{C}'_j = \mathbf{C}_i + \widehat{\mathbf{m}}_j \mathbf{g} + \widehat{\mathbf{m}}_i \sqrt{g^2 + \delta g^2} \widehat{\mathbf{g}}'.$$

Ainsi, $\mathcal{F}_i^{\mathcal{S}(4)}(\mathbf{u}) = \mathbf{v}_i^{(4)} \mathbf{C}_i$ où $\mathbf{v}_i^{(4)}$ est une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$.

On a donc montré dans cette section que l'opérateur $\mathcal{F}^{\mathcal{S}}$ transforme une famille de fonctions de type $\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i \mathbf{C}_i$, où $\mathbf{u}_i$ est une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, en une famille de fonctions du même type.

I.9.3 Cas général

On ne détaillera pas les calculs nécessaires à la preuve de l'isotropie de l'opérateur $\mathcal{F}^{\mathcal{I}}$ dans toute sa généralité car ils sont extrêmement lourds à écrire et ne constituent pas l'objet principal de cette thèse. On désire uniquement mettre en lumière les mécanismes qui font que cet opérateur est bien isotrope, sans toutefois y consacrer un trop long chapitre. On exposera donc sous forme de remarques les modifications à apporter par rapport aux calculs précédents.

Remarque 1.

Si au lieu de prendre des fonctions du type $u_i \mathbf{C}_i$, on avait pris des fonctions du type $u_i \mathbf{T}_i$, où u_i est une fonction de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ et $\mathbf{T}_i$ est une constante, un vecteur ou bien un tenseur construit à partir des vecteurs $\mathbf{C}_i$ et $\mathbf{B}$, les mêmes calculs seraient valables car il suffit de sortir le vecteur $\mathbf{B}$ des intégrales puisqu'il ne dépend que de la position et du temps.

Remarque 2.

Si les fonctions u_i ne dépendaient plus uniquement de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$ mais également de $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ et de $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$, il faudrait utiliser une décomposition des fonctions u_i en produits de fonctions qui ne dépendraient chacune que de $\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{C}_i$, de $(\mathbf{C}_i \cdot \mathbf{B})^2$ ou de $\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}$. Les mêmes calculs permettent alors de conclure en exprimant $(\mathbf{C}_j \cdot \mathbf{B})^2$, $(\mathbf{C}'_i \cdot \mathbf{B})^2$ et $(\mathbf{C}'_j \cdot \mathbf{B})^2$ en fonction de $\mathbf{C}_i$, de $\mathbf{g}$ et de $\widehat{\mathbf{g}}$.

I.10 Annexe : Complexification et notations $\parallel$, $\perp$ et $\odot$ —

Dans les mélanges gazeux réactifs partiellement ionisés, la présence d'un champ magnétique provoque une anisotropie du milieu [FK72]. On introduit dans cette annexe une notation utilisant les nombres complexes qui permet de simplifier les calculs. Cette simplification est essentiellement due au fait que l'on passe de la coordonnée orthogonale au champ magnétique à la coordonnée transverse en multipliant par le nombre imaginaire i . On définira alors une complexification des flux et des coefficients de transport pour simplifier à la fois les calculs et la présentation des résultats. Cette complexification a été introduite par S. Chapman et T.G. Cowling [CC70] et réutilisée par J.H. Ferziger et H.G. Kaper [FK72], mais on l'utilisera de façon plus systématique, notamment pour étudier la production d'entropie.

I.10.1 Anisotropie et complexification

On introduit le vecteur du champ magnétique renormalisé $\mathcal{B} = \mathbf{B}/B$ et les tenseurs d'ordre deux $\mathbf{M}^\parallel$, $\mathbf{M}^\perp$ et $\mathbf{M}^\odot$ construits à partir de ce vecteur par les relations

$$\mathbf{M}^\parallel = \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^\perp = \mathbb{I} - \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^\odot = \mathbf{R}(\mathcal{B}), \quad (\text{I.151})$$

où $\mathbf{R}$ est l'opérateur qui transforme un vecteur $\mathbf{X} = (X_1, X_2, X_3)^T \in \mathbb{R}^3$ en la matrice

$$\mathbf{R}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} 0 & -X_3 & X_2 \\ X_3 & 0 & -X_1 \\ -X_2 & X_1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.152})$$

On remarque que la matrice $\mathbf{R}(\mathbf{X})$ agit sur un vecteur $\mathbf{Y}$ comme un produit vectoriel : $\mathbf{R}(\mathbf{X})\mathbf{Y} = \mathbf{X} \wedge \mathbf{Y} = -\mathbf{R}(\mathbf{Y})\mathbf{X}$, où $\mathbf{X}$ et $\mathbf{Y}$ sont deux vecteurs quelconques de $\mathbb{R}^3$.

Pour un vecteur $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^3$, on introduit alors trois vecteurs $\mathbf{X}^\parallel$, $\mathbf{X}^\perp$ et $\mathbf{X}^\odot$ définis par

$$\boxed{\mathbf{X}^\parallel = \mathbf{M}^\parallel \mathbf{X}, \quad \mathbf{X}^\perp = \mathbf{M}^\perp \mathbf{X}, \quad \mathbf{X}^\odot = \mathbf{M}^\odot \mathbf{X}.} \quad (\text{I.153})$$

En utilisant les définitions (I.151) des matrices $\mathbf{M}^\parallel$, $\mathbf{M}^\perp$ et $\mathbf{M}^\odot$, on peut récrire ces vecteurs ainsi

$$\mathbf{X}^\parallel = \mathcal{B} \cdot \mathbf{X} \mathcal{B}, \quad \mathbf{X}^\perp = \mathbf{X} - \mathcal{B} \cdot \mathbf{X} \mathcal{B}, \quad \mathbf{X}^\odot = \mathcal{B} \wedge \mathbf{X}.$$

On peut interpréter le vecteur $\mathbf{X}^\parallel$ comme la projection du vecteur $\mathbf{X}$ sur la droite engendrée par le champ magnétique $\mathbf{B}$, le vecteur $\mathbf{X}^\perp$ comme la projection du vecteur $\mathbf{X}$ sur la droite orthogonale au champ magnétique $\mathbf{B}$ dans le plan engendré par les vecteurs $\mathbf{X}$ et $\mathbf{B}$, et le vecteur $\mathbf{X}^\odot$ comme la projection du vecteur $\mathbf{X}$ sur la droite orthogonale au plan engendré par les vecteurs $\mathbf{X}$ et $\mathbf{B}$. Ces trois vecteurs sont alors orthogonaux deux à deux,

$$\mathbf{X}^\parallel \cdot \mathbf{X}^\perp = 0, \quad \mathbf{X}^\parallel \cdot \mathbf{X}^\odot = 0, \quad \mathbf{X}^\perp \cdot \mathbf{X}^\odot = 0. \quad (\text{I.154a})$$

En considérant $\mathbf{X}$ et $\mathbf{Y}$ deux vecteurs quelconques de $\mathbb{R}^3$, on obtient de plus les propriétés suivantes

$$\mathbf{X}^\parallel \cdot \mathbf{Y}^\perp = 0, \quad \mathbf{X}^\parallel \cdot \mathbf{Y}^\odot = 0, \quad \mathbf{X}^\perp \cdot \mathbf{Y}^\odot + \mathbf{X}^\odot \cdot \mathbf{Y}^\perp = 0, \quad \mathbf{X}^\perp \cdot \mathbf{Y}^\perp = \mathbf{X}^\odot \cdot \mathbf{Y}^\odot. \quad (\text{I.154b})$$

Pour un vecteur $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^3$, on introduit alors le vecteur complexe $\mathbf{X}^c \in \mathbb{C}^3$ par

$$\boxed{\mathbf{X}^c = \mathbf{X}^\parallel + \mathbf{X}^\perp - \mathbf{i} \mathbf{X}^\odot.} \quad (\text{I.155})$$

Le vecteur $\mathbf{X}^c \in \mathbb{C}^3$ étant donné, il est facile de retrouver le vecteur $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^3$ correspondant par la formule

$$\mathbf{X} = \Re(\mathbf{X}^c), \quad (\text{I.156})$$

où $\Re(\cdot)$ désigne la prise de partie réelle. On généralise alors la définition des vecteurs $\mathbf{X}^\parallel$, $\mathbf{X}^\perp$ et $\mathbf{X}^\odot$ dans le cas complexe en posant

$$\boxed{\mathbf{X}^{c\parallel} = M^\parallel \mathbf{X}^c, \quad \mathbf{X}^{c\perp} = M^\perp \mathbf{X}^c, \quad \mathbf{X}^{c\odot} = M^\odot \mathbf{X}^c.} \quad (\text{I.157})$$

Un calcul direct permet alors de montrer les propriétés suivantes.

$$\mathbf{X}^{c\parallel} = \mathbf{X}^\parallel, \quad \mathbf{X}^{c\perp} = \mathbf{X}^\perp - \mathbf{i} \mathbf{X}^\odot, \quad \mathbf{X}^{c\odot} = \mathbf{X}^\odot + \mathbf{i} \mathbf{X}^\perp = \mathbf{i} \mathbf{X}^{c\perp}, \quad (\text{I.158})$$

$$\mathbf{X}^\parallel = \mathbf{X}^{c\parallel}, \quad \mathbf{X}^\perp = \Re(\mathbf{X}^{c\perp}) = \Im(\mathbf{X}^{c\odot}), \quad \mathbf{X}^\odot = \Re(\mathbf{X}^{c\odot}) = -\Im(\mathbf{X}^{c\perp}), \quad (\text{I.159})$$

où $\Im(\cdot)$ désigne la prise de partie imaginaire.

I.10.2 Formulations complexes des flux de transport

En utilisant le formalisme complexe développé dans la section précédente, les vecteurs complexes $\mathbf{V}_i^c$, $i \in S$, correspondant aux complexifiés des vitesses de diffusion, se mettent sous la forme

$$\mathbf{V}_i^c = - \sum_{j \in S} \left(D_{ij}^{c\parallel} \mathbf{d}_k^{c\parallel} + D_{ij}^{c\perp} \mathbf{d}_k^{c\perp} \right) - \theta_k^{c\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{c\parallel} - \theta_k^{c\perp} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{c\perp}, \quad (\text{I.160})$$

où l'on introduit les coefficients de transport complexes $D_{ij}^{c\parallel}$, $D_{ij}^{c\perp}$, $i, j \in S$, $\theta_i^{c\parallel}$ et $\theta_i^{c\perp}$, $i \in S$,

$$D_{ij}^{c\parallel} = D_{ij}^{\parallel}, \quad D_{ij}^{c\perp} = D_{ij}^{\perp} + iD_{ij}^{\odot}, \quad \theta_i^{c\parallel} = \theta_i^{\parallel}, \quad \theta_i^{c\perp} = \theta_i^{\perp} + i\theta_i^{\odot}. \quad (\text{I.161})$$

De plus, ces vitesses de diffusion complexes vérifient la même relation linéaire (I.95),

$$\sum_{i \in S} \rho_i \mathbf{V}_i^c = 0. \quad (\text{I.162})$$

Les taux de diffusion thermique complexes $\chi^{c\parallel} = \chi^{\parallel}$ et $\chi^{c\perp} = \chi^{\perp} + i\chi^{\odot}$ vérifient quant à eux les systèmes linéaires

$$\begin{cases} D^{c\parallel} \chi^{c\parallel} = \theta^{c\parallel}, \\ \langle \chi^{c\parallel}, \mathbf{u} \rangle = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} D^{c\perp} \chi^{c\perp} = \theta^{c\perp}, \\ \langle \chi^{c\perp}, \mathbf{u} \rangle = 0. \end{cases} \quad (\text{I.163})$$

A partir de ces définitions, on obtient après quelques calculs une nouvelle expression des vitesses de diffusion complexifiées $\mathbf{V}_i^c$, $i \in S$,

$$\mathbf{V}_i^c = - \sum_{j \in S} D_{ij}^{c\parallel} (\mathbf{d}_j^{c\parallel} + \chi_j^{c\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{c\parallel}) - \sum_{j \in S} D_{ij}^{c\perp} (\mathbf{d}_j^{c\perp} + \chi_j^{c\perp} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{c\perp}). \quad (\text{I.164})$$

On remarque que les systèmes linéaires (I.163) qui définissent les taux de diffusion thermique complexes sont toujours bien posés puisque le vecteur $\theta^{c\parallel}$, respectivement $\theta^{c\perp}$, est dans l'image de la matrice $D^{c\parallel}$, respectivement $D^{c\perp}$, et le vecteur $\mathbf{u}$ est dans le complémentaire du noyau de la matrice $D^{c\parallel}$, respectivement $D^{c\perp}$.

On introduit de même le vecteur complexe $\mathbf{Q}^c$, correspondant au complexifié du flux de chaleur. Celui-ci se met sous la forme

$$\mathbf{Q}^c = -\hat{\lambda}^{c\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{c\parallel} - \hat{\lambda}^{c\perp} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{c\perp} - p \sum_{i \in S} (\theta_i^{c\parallel} \mathbf{d}_i^{c\parallel} + \theta_i^{c\perp} \mathbf{d}_i^{c\perp}) + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_i \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i, \quad (\text{I.165})$$

où l'on a défini les coefficients de transport complexes

$$\hat{\lambda}^{c\parallel} = \hat{\lambda}^{\parallel}, \quad \hat{\lambda}^{c\perp} = \hat{\lambda}^{\perp} + i\hat{\lambda}^{\odot}. \quad (\text{I.166})$$

Et en utilisant les taux de diffusion thermique complexes, on obtient une nouvelle expression du flux de chaleur complexifié

$$\mathbf{Q}^c = -\lambda^{c\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{c\parallel} - \lambda^{c\perp} (\partial_{\mathbf{x}} T)^{c\perp} - p \sum_{i \in S} (\chi_i^{c\parallel} \mathbf{V}_i^{c\parallel} + \chi_i^{c\perp} \mathbf{V}_i^{c\perp}) + \sum_{i \in S} \left(\frac{5}{2} k_B T + \overline{\mathcal{E}}_i \right) \mathbf{n}_i \mathbf{V}_i, \quad (\text{I.167})$$

avec $\lambda^{c\parallel} = \lambda^{\parallel}$ et $\lambda^{c\perp} = \lambda^{\perp} + i\lambda^{\odot}$.

Références bibliographiques

Chapitre I

- [ACG94] B.V. Alexeev, A. Chikhaoui and I.T. Grushin, “Application of the generalized Chapman-Enskog method to the transport-coefficient calculation in a reacting gas mixture”, *Physical review E* **49** (1994), no. 4, pp. 2809–2825.
- [Bra58] S.I. Braginskii, “Transport phenomena in a completely ionized two-temperature plasma”, *Soviet physics JETP* **6(33)** (1958), no. 2, pp. 358–369.
- [Bra65] ———, “Transport Processes in a Plasma”, M.A. Leontovich, editor, *Reviews of plasma physics* **1** (1965), pp. 205–311.
- [CC70] S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge Mathematical Library, third ed., 1970.
- [CD69] P.C. Clemmow and J.P. Dougherty, *Electrodynamics of particles and plasmas*, Addison-Wesley Pub. Comp. Inc., Redwood City, 1969.
- [Cer88] C. Cercignani, *The Boltzmann Equation and its Applications*, Springer, 1988.
- [CF67] R.M. Chmielewski and J.H. Ferziger, “Transport Properties of a Nonequilibrium Partially Ionized Gas”, *Phys. Fluids* **10** (1967), no. 2, pp. 364–371.
- [CS79] J.A.R. Coope and R.F. Snider, “On the contribution of angular momentum polarization to gas phase thermal conductivity”, *J. Chem. Phys.* **70** (1979), no. 03, pp. 1075–1077.
- [dGM84] S.R. de Groot and P. Mazur, *Non-Equilibrium Thermodynamics*, Dover Publications, inc., New York, 1984.
- [EG94] A. Ern and V. Giovangigli, *Multicomponent transport Algorithms*, Lectures Notes in Physics, Series monographs, m24, Springer, Berlin, 1994.
- [EG95] ———, “Fast and Accurate Multicomponent Property Evaluations”, *J. Comp. Physics* **120** (1995), pp. 105–116.

- [EG96] ———, “The Structure of Transport Linear Systems in Dilute Isotropic Gas Mixtures”, *Phys. Rev. E* **53** (1996), pp. 485–492.
- [EG97] ———, “Projected Iterative Algorithms with Application to Multicomponent Transport”, *Linear Algebra Appl.* **250** (1997), pp. 289–315.
- [EG98] ———, “The kinetic chemical equilibrium regime”, *Physica A* **260** (1998), pp. 49–72.
- [FK72] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [GG03] V. Giovangigli and B. Graille, “Kinetic theory of partially ionized reactive gas mixtures”, *Physica A* **327** (2003), pp. 313–348.
- [Gio99] V. Giovangigli, *Multicomponent Flow Modeling*, Birkhäuser, 1999.
- [Grü93] C.P. Grünfeld, “On a class of kinetic equations for reacting gas mixtures”, *Compte Rendus Acad. Sci. Paris A* **316** (1993), no. I, pp. 953–958.
- [KA61] Yu. Kagan and A.M. Afanas’ev, “On the kinetic theory of gases with rotational degrees of freedom”, *J. Exptl. Theoret. Phys.* **41** (1961), pp. 1096–1101.
- [Kan60] S. Kaneko, “Kinetic Theory in a Uniform Magnetic Field”, *J. Phys. Soc. Japan* **15** (1960), no. I, pp. 1685–1690.
- [KT78] S. Kaneko and M. Taguchi, “Electrical Conductivity of a High-Temperature Plasma in a Uniform Magnetic Field”, *J. Phys. Soc. Japan* **45** (1978), no. I, pp. 1380–1384.
- [KY80] S. Kaneko and A. Yamao, “Thermal Conductivities and Coefficients of Thermal Diffusion of a High-Temperature Plasma in a Uniform Magnetic Field”, *J. Phys. Soc. Japan* **48** (1980), no. I, pp. 2098–2103.
- [LH60] G. Ludwig and M. Heil, “Boundary-Layer Theory with Dissociation and Ionization”, In *Advances in Applied Mechanics*, Academic Press, New York **VI** (1960), pp. 39–118.
- [MM63] E.A. Mason and L. Monchick, “Theory of Transport Properties of Gases”, In *Ninth Symposium (International) on Combustion* (1963), pp. 713–724.
- [MM88] E.A. Mason and E.W. McDaniel, *Transport properties on ions in gases*, John Wiley & sons, New York, 1988.
- [PM50] I. Prigogine and M. Mathieu, “Sur la perturbation de la distribution de Maxwell par des réactions chimiques en phase gazeuse”, *Physica* **16** (1950), pp. 51–64.
- [Pre59] R.D. Present, “On the velocity distribution in a chemically reacting gas”, *J. Chem. Phys.* **31** (1959), pp. 747–750.

- [PX49] I. Prigogine and E. Xhrouet, “On the Perturbation of Maxwell Distribution Function by Chemical Reactions in Gases”, *Physica* **15** (1949), pp. 913–932.
- [Rai87] Y.P. Raizer, *Gas discharge physics*, Springer, Berlin, 1987.
- [SK70] B. Shizgal and M. Karplus, “Nonequilibrium Contributions to the Rate of Reaction. I. Perturbation of the Velocity Distribution Function”, *J. Chem. Phys.* **52** (1970), pp. 4262–4278.
- [SK71a] ———, “Nonequilibrium Contributions to the Rate of Reaction. II. Isolated Multicomponent Systems”, *J. Chem. Phys.* **54** (1971), pp. 4345–4356.
- [SK71b] ———, “Nonequilibrium Contributions to the Rate of Reaction. III. Isothermal Multicomponent Systems”, *J. Chem. Phys.* **54** (1971), pp. 4357–4362.
- [Tak51] K. Takayanagi, “On the Theory of Chemically Reacting Gas”, *Prog. Theor. Phys.* **VI** (1951), pp. 486–497.
- [VMS78] L.A. Viehland, E.A. Mason and S.I. Sandler, “Effect of spin polarization on the thermal conductivity of polyatomic gases”, *J. Chem. Phys.* **68** (1978), no. 11, pp. 5277–5282.
- [Wal58] L. Waldmann, “Transporterscheinungen in Gasen von mittlerem Druck”, *Handbuch der Physik* **12** (1958), pp. 295–514.
- [Wan70a] C.C. Wang, “A New Representation Theorem for Isotropic Functions : An Answer to Professor G.F. Smith’s Criticism of my Papers on Representations for Isotropic Functions Part I. Scalar-Valued Isotropic Functions”, *Arch. Rational Mech. Anal.* **36** (1970), no. 3, pp. 166–197.
- [Wan70b] ———, “A New Representation Theorem for Isotropic Functions : An Answer to Professor G.F. Smith’s Criticism of my Papers on Representations for Isotropic Functions Part II. Vector-Valued Isotropic Functions, Symmetric Tensor-Valued Isotropic Functions, and Skew-Symmetric Tensor-Valued Isotropic Functions”, *Arch. Rational Mech. Anal.* **36** (1970), no. 3, pp. 198–223.

Le problème de Cauchy local pour les plasmas dissipatifs

Ce chapitre reprend et détaille un article soumis à la revue *Mathematical Methods in the Applied Sciences*.

Résumé

On étudie un système d'équations aux dérivées partielles modélisant les mélanges gazeux réactifs ionisés magnétisés et dissipatifs. Dans ce modèle, les flux de transport s'écrivent comme des combinaisons linéaires anisotropes des gradients des variables macroscopiques et contiennent également les effets directs du champ électromagnétique. En utilisant les variables entropiques, on récrit le système de lois de conservation tout d'abord sous une forme partiellement symétrique conservative, puis sous une forme partiellement normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système quasi-linéaire partiellement symétrique hyperbolique-parabolique. En utilisant un résultats de Vol'Pert et Hudjaev, on démontre un théorème d'existence et d'unicité local en temps d'une solution bornée et régulière pour le problème de Cauchy.

II.1 Introduction

Les équations gouvernant les plasmas froids mono-températures à haute densité peuvent être dérivées de la théorie cinétique des mélanges gazeux réactifs ionisés et magnétisés comme on l'a vu dans le chapitre I. On étudie maintenant le système complet d'équations obtenues. Ces équations se décomposent en équations de conservation, expressions des flux de transport, relations thermochimiques et équations de Maxwell. Il est important de remarquer que le champ magnétique engendre une anisotropie dans les flux de diffusion de masse, dans le flux de chaleur et dans le tenseur de viscosité. En particulier, les flux de diffusion s'écrivent comme une combinaison linéaire anisotrope des gradients des variables macroscopiques et de termes d'ordre zéro dus à l'action des forces électromagnétiques. Concernant les propriétés de structure des coefficients de transport et de thermochimie, on utilise les hypothèses mathématiques dérivées de la théorie cinétique du chapitre I et qui sont des généralisations de celles des mélanges neutres [Gio99, GM98].

Les équations gouvernant les mélanges gazeux réactifs ionisés et magnétisés constituent un système de lois de conservation quasi-linéaire du second ordre. En utilisant les variables entropiques, on récrit dans un premier temps le système sous une forme partiellement symétrique conservative, puis sous une forme partiellement normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système quasi-linéaire partiellement symétrique hyperbolique-parabolique. On utilise le terme partiellement symétrique par opposition avec le régime neutre. Le système des mélanges gazeux neutres est en effet complètement symétrique dans le sens où les matrices de convection qui couplent les sous-systèmes hyperboliques et paraboliques sont symétriques [Gio99].

On démontre l'existence d'une unique solution locale en temps au problème de Cauchy constitué du système partiellement symétrique hyperbolique-parabolique résultant et de conditions initiales régulières, dans l'espace de Vol'Pert $V_l(\mathbb{R}^3)$. La preuve utilisée repose sur les résultats de Vol'Pert et Hudjaev concernant le problème de Cauchy pour les systèmes d'équations aux dérivées partielles composites symétriques quasi-linéaires hyperboliques-paraboliques [VH72].

Les équations gouvernant les mélanges gazeux réactifs ionisés et magnétisés sont présentées dans la deuxième section et la forme quasi-linéaire est obtenue dans la troisième section. Dans la quatrième section, on étudie un système abstrait d'équations aux dérivées partielles, en particulier la mise sous forme partiellement symétrique ainsi que la mise sous forme partiellement normale. Puis on établit un théorème d'existence local pour ce système abstrait. Finalement, dans la cinquième section, on applique ces résultats au système d'équations aux dérivées partielles modélisant

les mélanges gazeux réactifs ionisés et magnétisés.

II.2 Equations pour les mélanges gazeux réactifs ionisés et magnétisés

Les équations régissant les plasmas dissipatifs peuvent se décomposer en équations de conservation, flux de transport, relations thermochimiques et équations de Maxwell. Ces équations peuvent être dérivées de la théorie cinétique des gaz en utilisant un développement d'Enskog du premier ordre, ce qui a été fait au chapitre I [FK72, GG03].

II.2.1 Equations de conservation

On note S l'ensemble des indices des espèces $S = \{1, \dots, n^s\}$, n^s le nombre d'espèces dans le mélange, n_k le nombre de moles par unité de volume de la k^e espèce, ρ_k la masse par unité de volume de la k^e espèce, q_k la charge par unité de volume de la k^e espèce et m_k la masse molaire de la k^e espèce.

Les équations de conservation de la masse des espèces s'écrivent (I.85a)

$$\partial_t \rho_k + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_k \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathcal{F}_k^d = m_k \omega_k, \quad k \in S, \quad (\text{II.1})$$

où $\mathbf{v}$ est la vitesse macroscopique dans le mélange, $\mathcal{F}_k^d$ le flux de diffusion de la k^e espèce et ω_k le taux molaire de production de la k^e espèce par unité de volume.

L'équation suivante exprime la conservation de la quantité de mouvement (I.85d)

$$\partial_t (\rho \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbb{I}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \Pi = \rho \mathbf{g} + q \mathbf{E} + \mathbf{J} \wedge \mathbf{B}, \quad (\text{II.2})$$

où ρ est la masse totale par unité de volume, p la pression thermodynamique, $\mathbb{I}$ la matrice identité de $\mathbb{R}^3$, Π le tenseur de viscosité, q la charge volumique totale, $\mathbf{E}$ le champ électrique, $\mathbf{B}$ le champ magnétique, $\mathbf{g}$ une force externe qui ne dépend pas des espèces et $\mathbf{J}$ la densité de courant électrique définie par $\mathbf{J} = \mathbf{j} + q \mathbf{v}$ avec $\mathbf{j}$ la densité de courant de conduction.

On introduit l'énergie du fluide par unité de masse e^f définie par $e^f = e + \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}/2$, où e est l'énergie interne par unité de masse. L'équation de conservation de l'énergie (I.85g) écrite en la variable e^f devient

$$\partial_t (\rho e^f) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot [(\rho e^f + p) \mathbf{v}] + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{Q} + \Pi \cdot \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}, \quad (\text{II.3})$$

où $\mathcal{Q}$ est le flux de chaleur.

II.2.2 Flux de transport

On a vu au chapitre I que l'anisotropie des flux de transport est une des particularités des plasmas dissipatifs lorsque le champ magnétique est intense [CC70, FK72, GG03]. Pour exprimer cette anisotropie, on rappelle quelques notations introduites au chapitre I. Pour une présentation plus complète des notations et de diverses propriétés concernant l'anisotropie, on pourra se référer au chapitre I. On définit le vecteur unitaire $\mathcal{B}$ par $\mathcal{B} = \mathbf{B}/B$, où B est la norme du champ magnétique $\mathbf{B}$. Pour un vecteur $\mathbf{X}$ de $\mathbb{R}^3$, on introduit les trois vecteurs associés aux trois directions spatiales

$$\mathbf{X}^{\parallel} = (\mathcal{B} \cdot \mathbf{X})\mathcal{B}, \quad \mathbf{X}^{\perp} = \mathbf{X} - \mathbf{X}^{\parallel} \quad \text{et} \quad \mathbf{X}^{\odot} = \mathcal{B} \wedge \mathbf{X}.$$

Ces trois vecteurs sont deux à deux orthogonaux,

$$\mathbf{X}^{\perp} \cdot \mathbf{X}^{\parallel} = 0, \quad \mathbf{X}^{\odot} \cdot \mathbf{X}^{\parallel} = 0, \quad \mathbf{X}^{\perp} \cdot \mathbf{X}^{\odot} = 0,$$

et de plus, pour tous vecteurs $\mathbf{X}$ et $\mathbf{Y}$ de $\mathbb{R}^3$, on a les relations

$$\mathbf{X}^{\perp} \cdot \mathbf{Y}^{\odot} + \mathbf{X}^{\odot} \cdot \mathbf{Y}^{\perp} = 0, \quad \mathbf{X}^{\perp} \cdot \mathbf{Y}^{\perp} = \mathbf{X}^{\odot} \cdot \mathbf{Y}^{\odot}.$$

D'après l'étude faite au chapitre I, les flux de diffusion $\mathcal{F}_k^{\text{d}}$, $k \in \text{S}$, sont donnés par

$$\mathcal{F}_k^{\text{d}} = \rho_k \mathbf{V}_k, \quad k \in \text{S}, \quad (\text{II.4})$$

où la vitesse de diffusion de la k^{e} espèce $\mathbf{V}_k$, $k \in \text{S}$, a pour expression (I.97)

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_k = & - \sum_{l \in \text{S}} D_{kl}^{\parallel} \left(\mathbf{d}_l^{\parallel} + \chi_l^{\parallel} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\parallel} \right) \\ & - \sum_{l \in \text{S}} D_{kl}^{\perp} \left(\mathbf{d}_l^{\perp} + \chi_l^{\perp} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\perp} + \chi_l^{\odot} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\odot} \right) \\ & - \sum_{l \in \text{S}} D_{kl}^{\odot} \left(\mathbf{d}_l^{\odot} + \chi_l^{\odot} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\odot} - \chi_l^{\odot} (\partial_{\mathbf{x}} \log T)^{\perp} \right), \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

et où la force de diffusion de la k^{e} espèce $\mathbf{d}_k$, $k \in \text{S}$, s'écrit

$$\mathbf{d}_k = \frac{1}{p} [\partial_{\mathbf{x}} p_k - \rho_k \mathbf{g} - q_k (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})]. \quad (\text{II.6})$$

Dans ces expressions, les coefficients $D_{kl}^{\parallel}$, $D_{kl}^{\perp}$ et $D_{kl}^{\odot}$, $k, l \in \text{S}$, sont les coefficients de diffusion multiespèces, les coefficients $\chi_k^{\parallel}$, $\chi_k^{\perp}$ et $\chi_k^{\odot}$, $k \in \text{S}$, les taux de diffusion

thermique, T la température absolue et p_k , $k \in S$, la pression partielle de la k^e espèce. La densité de courant de conduction correspondante $\mathbf{j}$ s'écrit

$$\mathbf{j} = \sum_{k \in S} q_k \mathbf{V}_k, \quad (\text{II.7})$$

dont l'expression développée se trouve en (I.101).

Remarque - Pour les gaz non ionisés, on retrouve les formules classiques. En effet, on a $D_{kl}^{\parallel} = D_{kl}^{\perp}$, $D_{kl}^{\odot} = 0$, $k, l \in S$, $\chi_k^{\parallel} = \chi_k^{\perp}$, $\chi_k^{\odot} = 0$, $k \in S$, lorsque les charges volumiques q_k , $k \in S$, s'annulent. Les vitesses de diffusion $\mathbf{V}_k$, $k \in S$, s'écrivent alors bien [Gio99]

$$\mathbf{V}_k = - \sum_{l \in S} D_{kl} (\mathbf{d}_l + \chi_l \partial_{\mathbf{x}} \log T).$$

En revanche, pour le cas général des gaz ionisés, les coefficients de diffusion sont différents selon les trois directions spatiales, ce qui est une conséquence de l'anisotropie créée par le champ magnétique. De plus, on observe que les forces de diffusion des espèces $\mathbf{d}_k$, $k \in S$, contiennent un terme supplémentaire dû à la force électromagnétique macroscopique $q_k(\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})$. Enfin, bien que le formalisme choisi utilise le vecteur unitaire $\mathbf{B} = \mathbf{B}/B$, on remarque que les vitesses de diffusion $\mathbf{V}_k$, $k \in S$, sont régulières même lorsque le champ magnétique tend vers zéro. On établira ces propriétés dans les sections suivantes grâce aux propriétés concernant les coefficients de transport.

L'expression du flux de chaleur $\mathcal{Q}$ est donnée en (I.107) et s'écrit

$$\begin{aligned} \mathcal{Q} = & -\lambda^{\parallel}(\partial_{\mathbf{x}} T)^{\parallel} - \lambda^{\perp}(\partial_{\mathbf{x}} T)^{\perp} - \lambda^{\odot}(\partial_{\mathbf{x}} T)^{\odot} \\ & + p \sum_{k \in S} \left(\chi_k^{\parallel} \mathbf{V}_k^{\parallel} + \chi_k^{\perp} \mathbf{V}_k^{\perp} + \chi_k^{\odot} \mathbf{V}_k^{\odot} \right) + \sum_{k \in S} \rho_k h_k \mathbf{V}_k, \quad (\text{II.8}) \end{aligned}$$

où h_k est l'enthalpie par unité de masse de la k^e espèce, les coefficients $\lambda^{\parallel}$, $\lambda^{\perp}$ et $\lambda^{\odot}$ sont les conductivités thermiques et les coefficients $\chi_k^{\parallel}$, $\chi_k^{\perp}$ et $\chi_k^{\odot}$ les taux de diffusion thermique, où l'on a également distingué les trois directions spatiales.

Remarque - Cette expression du flux de chaleur est compatible avec celle donnée pour les gaz non ionisés [Gio99]. En effet, lorsque les charges volumiques q_k , $k \in S$, sont nulles, on a également $\chi_k^{\parallel} = \chi_k^{\perp}$, $\chi_k^{\odot} = 0$, $k \in S$ et $\lambda^{\parallel} = \lambda^{\perp}$, $\lambda^{\odot} = 0$. D'après la remarque précédente, on obtient que le flux de chaleur s'écrit alors

$$\mathcal{Q} = -\lambda \partial_{\mathbf{x}} T + \sum_{k \in S} (p \chi_k + \rho_k h_k) \mathbf{V}_k.$$

De plus, on établira que le flux de chaleur $\mathcal{Q}$ est régulier lorsque le champ magnétique tend vers zéro grâce aux propriétés des coefficients de transport.

On rappelle à présent quelques notations introduites dans le chapitre I lors de l'étude des flux de transport. On définit les matrices réelles $D^\parallel$, $D^\perp$, $D^\odot$ et les vecteurs réels $\chi^\parallel$, $\chi^\perp$, $\chi^\odot$ par

$$\begin{aligned} D^\parallel &= (D_{kl}^\parallel)_{k,l \in \mathbb{S}}, & D^\perp &= (D_{kl}^\perp)_{k,l \in \mathbb{S}}, & D^\odot &= (D_{kl}^\odot)_{k,l \in \mathbb{S}}, \\ \chi^\parallel &= (\chi_k^\parallel)_{k \in \mathbb{S}}, & \chi^\perp &= (\chi_k^\perp)_{k \in \mathbb{S}}, & \chi^\odot &= (\chi_k^\odot)_{k \in \mathbb{S}}. \end{aligned}$$

On rappelle que les vecteurs réels $\theta^\parallel$, $\theta^\perp$, $\theta^\odot$, vérifient les systèmes linéaires suivants

$$\theta^\parallel = D^\parallel \chi^\parallel, \quad \theta^\perp + \mathbf{i} \theta^\odot = (D^\perp + \mathbf{i} D^\odot)(\chi^\perp + \mathbf{i} \chi^\odot),$$

et les coefficients réels $\hat{\lambda}^\parallel$, $\hat{\lambda}^\perp$, $\hat{\lambda}^\odot$ sont définis par

$$\begin{aligned} \hat{\lambda}^\parallel &= \lambda^\parallel + \frac{p}{T} \chi^{\parallel \text{T}} D^\parallel \chi^\parallel, \\ \hat{\lambda}^\perp + \mathbf{i} \hat{\lambda}^\odot &= \lambda^\perp + \mathbf{i} \lambda^\odot + \frac{p}{T} (\chi^\perp + \mathbf{i} \chi^\odot)^{\text{T}} (D^\perp + \mathbf{i} D^\odot) (\chi^\perp + \mathbf{i} \chi^\odot). \end{aligned}$$

Le tenseur de viscosité $\mathbf{\Pi}$ peut s'écrire sous la forme (I.115)

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi} &= -\kappa \partial_x \cdot \mathbf{v} \mathbb{I} - \eta_1 \mathbf{S} - \eta_2 (\mathbf{M}^\odot \mathbf{S} - \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot) \\ &\quad - \eta_3 (\mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel - \mathbf{M}^\odot \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot) \\ &\quad - \eta_4 (\mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel + \mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} - 2 \mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel) \\ &\quad - \eta_5 (\mathbf{M}^\parallel \mathbf{S} \mathbf{M}^\odot - \mathbf{M}^\odot \mathbf{S} \mathbf{M}^\parallel), \end{aligned} \tag{II.9}$$

où le coefficient κ est la viscosité volumique et les coefficients η_1 , η_2 , η_3 , η_4 et η_5 sont les viscosités de cisaillement. Dans cette expression, on a noté $\mathbf{S}$ le tenseur des taux de déformation qui est un tenseur symétrique d'ordre deux à trace nulle s'écrivant

$$\mathbf{S} = (\partial_x \mathbf{v} + \partial_x \mathbf{v}^{\text{T}}) - \frac{2}{3} \partial_x \cdot \mathbf{v} \mathbb{I},$$

et $\mathbf{M}^\parallel$, $\mathbf{M}^\perp$ et $\mathbf{M}^\odot$ les matrices qui décrivent l'anisotropie dont les expressions sont

$$\mathbf{M}^\parallel = \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^\perp = \mathbb{I} - \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}, \quad \mathbf{M}^\odot = \mathbf{R}(\mathcal{B}),$$

où $\mathbf{R}$ est l'opérateur qui transforme un vecteur $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)^{\text{T}}$ de $\mathbb{R}^3$ en la matrice antisymétrique

$$\mathbf{R}(\mathbf{a}) = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

On définit également les vecteurs $\mathbf{R}_i(\mathbf{a})$, $i \in \mathbb{C}$, où $\mathbb{C}$ est l'ensemble $\{1, 2, 3\}$, comme la i^{e} colonne de la matrice $\mathbf{R}(\mathbf{a})$. C'est-à-dire

$$\mathbf{R}_1(\mathbf{a}) = (0, a_3, -a_2)^T, \quad \mathbf{R}_2(\mathbf{a}) = (-a_3, 0, a_1)^T, \quad \mathbf{R}_3(\mathbf{a}) = (a_2, -a_1, 0)^T.$$

Remarque - Pour les gaz non ionisés, l'expression (II.9) du tenseur de viscosité devient

$$\mathbf{\Pi} = -\kappa \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} \mathbb{I} - \eta \mathbf{S}$$

car lorsque les charges volumiques q_k , $k \in \mathbb{S}$, sont nulles, les viscosités de cisaillement $\eta_2, \eta_3, \eta_4, \eta_5$, sont toutes nulles. Le tenseur de viscosité s'écrit alors comme une combinaison linéaire de la matrice identité $\mathbb{I}$ et du tenseur des taux de déformation $\mathbf{S}$. Dans le cas des gaz ionisés, il s'écrit comme une combinaison linéaire de la matrice identité et de tous les tenseurs symétriques d'ordre deux à trace nulle construits à partir du tenseur des taux de déformation $\mathbf{S}$ et du tenseur de rotation antisymétrique $\mathbf{R}(\mathbf{B})$ associé au champ magnétique $\mathbf{B}$ et qui dépendent linéairement de $\mathbf{S}$. De plus, le tenseur de viscosité $\mathbf{\Pi}$ est régulier lorsque le champ magnétique $\mathbf{B}$ tend vers zéro comme on le verra dans la suite grâce aux propriétés des coefficients de transport.

II.2.3 Expression du terme source chimique

La théorie cinétique du chapitre I est valide quelque soit le schéma réactionnel envisagé. On considère n^r réactions chimiques entre les n^s espèces, ce qui peut s'écrire formellement sous la forme

$$\sum_{k \in \mathbb{S}} \nu_{kr}^f \mathfrak{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k \in \mathbb{S}} \nu_{kr}^b \mathfrak{M}_k, \quad r \in \mathfrak{R},$$

où $\mathfrak{M}_k$ est le symbole chimique de la k^{e} espèce, ν_{kr}^f et ν_{kr}^b les coefficients stœchiométriques direct et inverse de la k^{e} espèce dans la r^{e} réaction et $\mathfrak{R} = \{1, \dots, n^r\}$ est l'ensemble des indices des réactions.

Les taux de production moléculaires sont donnés par la théorie cinétique à la section I.6.5.5. On obtient

$$\omega_k = \sum_{r \in \mathfrak{R}} (\nu_{kr}^b - \nu_{kr}^f) \tau_r, \quad k \in \mathbb{S}, \quad (\text{II.10})$$

où τ_r est le taux d'avancement de la r^{e} réaction dont la formulation symétrique [Gio99] est

$$\tau_r = \mathcal{K}_r \left(\exp \langle \nu_r^f, \mathbf{M}\mu \rangle - \exp \langle \nu_r^b, \mathbf{M}\mu \rangle \right), \quad (\text{II.11})$$

où ν_r^f et ν_r^b , les vecteurs stœchiométriques direct et inverse, sont définis par

$$\nu_r^f = (\nu_{1r}^f, \dots, \nu_{n^s r}^f)^T, \quad \nu_r^b = (\nu_{1r}^b, \dots, \nu_{n^s r}^b)^T, \quad r \in \mathfrak{R},$$

et où μ le vecteur des potentiels chimiques réduits s'écrit

$$\mu = (\mu_1, \dots, \mu_{n^s})^T,$$

avec μ_k , $k \in S$, le potentiel chimique réduit de la k^e espèce. M la matrice diagonale des masses molaires est définie par $M = \text{Diag}(m_1, \dots, m_{n^s})$ et $\mathcal{K}_r$ est la constante de réaction symétrique de la r^e réaction. On rappelle les définitions des coefficients stœchiométriques $\nu_{kr} = \nu_{kr}^b - \nu_{kr}^f$, $k \in S$, $r \in \mathfrak{R}$, et des vecteurs stœchiométriques

$$\nu_r = (\nu_{1r}, \dots, \nu_{n^s r})^T, \quad r \in \mathfrak{R},$$

telles que $\nu_r = \nu_r^b - \nu_r^f$ et on note $\mathcal{R} = \text{Vect}\{\nu_r, r \in \mathfrak{R}\}$, l'espace vectoriel engendré par les vecteurs stœchiométriques ν_r , $r \in \mathfrak{R}$. Cette formulation symétrique des taux d'avancement est obtenue en utilisant la relation de réciprocity fondamentale entre les constantes de réaction directe et inverse [VH85] et peut également être déduite de la théorie cinétique [Gio99] comme on l'a vu au chapitre I.

II.2.4 Relations thermodynamiques

Les relations thermodynamiques obtenues dans le cadre de la théorie cinétique des gaz au chapitre I sont valides en dehors de l'équilibre thermodynamique et ont donc un espace de validité beaucoup plus grand que celles classiquement introduites pour les états d'équilibre homogènes et stationnaires. Le formalisme obtenu par la théorie cinétique coïncide encore avec le formalisme de Gibbs appliqué aux variables intensives [Gio99].

La masse totale par unité de volume ρ , la charge totale par unité de volume q et la pression totale p peuvent s'écrire sous la forme

$$\rho = \sum_{k \in S} \rho_k, \quad q = \sum_{k \in S} q_k, \quad p = \sum_{k \in S} p_k,$$

où la pression partielle correspondant à la k^e espèce p_k , $k \in S$, est donnée par la relation

$$p_k = r_k \rho_k T = n_k R T,$$

avec $r_k = R/m_k$ et R la constante des gaz parfaits.

L'énergie interne totale par unité de masse e et l'enthalpie totale par unité de masse h peuvent se décomposer en

$$\rho e = \sum_{k \in S} \rho_k e_k, \quad \rho h = \sum_{k \in S} \rho_k h_k = \sum_{k \in S} \rho_k (e_k + r_k T),$$

où e_k , $k \in S$, est l'énergie interne par unité de masse de la k^e espèce et h_k , $k \in S$, l'enthalpie par unité de masse de la k^e espèce. L'énergie interne ne dépend que de la température et son expression est la suivante

$$e_k(T) = e_k^{\text{st}} + \int_{T^{\text{st}}}^T c_{v,k}(\tau) d\tau,$$

où $e_k^{\text{st}} = e_k(T^{\text{st}})$, $k \in S$, est l'énergie de formation de la k^e espèce à la température strictement positive standard T^{st} et $c_{v,k}$, $k \in S$, est la chaleur spécifique à volume constant de la k^e espèce. Les chaleurs spécifiques à volume constant et à pression constante vérifient les relations

$$\rho c_v = \sum_{k \in S} \rho_k c_{v,k}, \quad \rho c_p = \sum_{k \in S} \rho_k c_{p,k} = \sum_{k \in S} \rho_k (c_{v,k} + r_k).$$

L'entropie par unité de masse s s'exprime également comme une somme des entropies par unité de masse des espèces s_k , $k \in S$, plus précisément, on a

$$\rho s = \sum_{k \in S} \rho_k s_k,$$

où s_k , $k \in S$, est une fonction de la température T et de la masse volumique de la k^e espèce ρ_k

$$s_k(T, \rho_k) = s_k^{\text{st}} + \int_{T^{\text{st}}}^T \frac{c_{v,k}(\tau)}{\tau} d\tau - r_k \log \left(\frac{\rho_k}{m_k \gamma^{\text{st}}} \right),$$

où $\gamma^{\text{st}} = p^{\text{st}}/(RT^{\text{st}})$ est la concentration standard, c'est-à-dire la concentration dans l'état standard à température standard T^{st} et sous la pression standard p^{st} . De même, on peut exprimer la fonction de Gibbs par unité de masse g selon les fonctions de Gibbs des espèces par unité de masse g_k , $k \in S$, grâce à la relation

$$\rho g = \sum_{k \in S} \rho_k g_k,$$

où g_k , $k \in S$, est donné par $g_k = h_k - Ts_k$. Finalement, on rappelle la définition du potentiel chimique réduit de la k^e espèce $\mu_k = g_k/(RT)$. La fonction de Gibbs de la

k^e espèce g_k , $k \in S$, et le potentiel chimique réduit de la k^e espèce μ_k , $k \in S$, sont des fonctions de la température T et de la masse volumique de la k^e espèce ρ_k . On a vu au chapitre I que l'on peut écrire

$$g_k(T, \rho_k) = g_k^u(T) + r_k T \log n_k, \quad \mu_k(T, \rho_k) = \mu_k^u(T) + \frac{1}{m_k} \log n_k,$$

avec g_k^u , $k \in S$, la fonction de Gibbs unitaire de la k^e espèce et μ_k^u , $k \in S$, le potentiel chimique réduit unitaire de la k^e espèce.

II.2.5 Equations de Maxwell

Le champ électromagnétique vérifie les quatre équations de Maxwell

$$\partial_x \cdot \mathbf{E} = q/\varepsilon_0, \quad (\text{II.12})$$

$$\partial_x \wedge \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}, \quad (\text{II.13})$$

$$\partial_x \cdot \mathbf{B} = 0, \quad (\text{II.14})$$

$$\partial_x \wedge \mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{J} + \varepsilon_0 \partial_t \mathbf{E}), \quad (\text{II.15})$$

où ε_0 est la constante diélectrique du vide et μ_0 la perméabilité magnétique du vide. Il est bien connu que si les première et troisième équations sont vérifiées à l'instant initial $t = 0$, elles le sont à tout instant si les deux autres équations sont vérifiées à tout instant. En effet, en prenant la divergence des équations (II.13) et (II.15), on obtient

$$\varepsilon_0 \partial_t (\partial_x \cdot \mathbf{E}) + \mu_0 \partial_x \cdot \mathbf{J} = 0, \quad \partial_t (\partial_x \cdot \mathbf{B}) = 0.$$

En utilisant l'équation de la charge

$$\partial_t q + \partial_x \cdot \mathbf{J} = 0,$$

on en déduit que

$$\partial_t (\partial_x \cdot \mathbf{E} - q/\varepsilon_0) = 0.$$

II.2.6 Hypothèses mathématiques

On décrit dans cette section les hypothèses mathématiques concernant les coefficients de thermoélectrochimie et de transport. Ces hypothèses sont obtenues à partir de la théorie cinétique des mélanges gazeux ionisés du chapitre I et ne sont pas suffisamment intuitives pour être devinées empiriquement.

On suppose que les espèces du mélange sont constituées d'atomes neutres et d'électrons. On note $\mathfrak{A} = \{1, \dots, n^a\}$ l'ensemble des indices des atomes, n^a le nombre d'atomes dans le mélange, $\tilde{m}_l$, $l \in \mathfrak{A}$, la masse atomique du l^e atome, $\mathbf{a}_{kl}$ le nombre de l^e atomes dans la k^e espèce et $\mathbf{a}_{k0}$ le nombre d'électrons dans la k^e espèces. De plus, pour alléger les expressions, on définit $\overline{\mathfrak{A}} = \{0\} \cup \mathfrak{A} = \{0, \dots, n^a\}$. On introduit également les vecteurs atomiques $\mathbf{a}_l$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, définis par $\mathbf{a}_l = (\mathbf{a}_{1l}, \dots, \mathbf{a}_{n^sl})^T$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$. Finalement, on définit α comme la valeur absolue de la charge d'une mole d'électrons.

On introduit également le vecteur des masses molaires $\mathbf{m}$, le vecteur des masses par unité de volume ϱ par

$$\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_{n^s})^T, \quad \varrho = (\rho_1, \dots, \rho_{n^s})^T,$$

puis le vecteur des charges par unité de masse $\mathbf{z}$ et le vecteur des charges par unité de volume $\mathbf{q}$

$$\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_{n^s})^T, \quad \mathbf{q} = (q_1, \dots, q_{n^s})^T,$$

et enfin le vecteur unitaire $\mathbf{u}$ de taille n^s , $\mathbf{u} = (1, \dots, 1)^T$. On a donc les relations $q_k = \rho_k z_k$, $k \in S$.

II.2.6.1 Hypothèses sur la thermoélectrochimie

Dans toute la suite de ce chapitre, on supposera que les hypothèses suivantes (Th₁-Th₄), dérivées de la théorie cinétique, sont satisfaites.

- (Th₁)** *Les masses molaires des espèces m_k , $k \in S$, et la constante des gaz parfaits R sont des constantes strictement positives. Les énergies de formation standard e_k^{st} , $k \in S$, et les entropies de formation standard s_k^{st} , $k \in S$, sont constantes. Les chaleurs spécifiques massiques $c_{v,k}$, $k \in S$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de la température $T \geq 0$. De plus, il existe des constantes strictement positives $\underline{c}_v$ et $\bar{c}_v$ telles que $0 < \underline{c}_v \leq c_{v,k}(T) \leq \bar{c}_v$, pour tout $k \in S$ et pour toute température $T \geq 0$.*
- (Th₂)** *Les coefficients stœchiométriques ν_{kr}^f et ν_{kr}^b , $k \in S$, $r \in \mathfrak{R}$, et les coefficients atomiques $\mathbf{a}_{kl}$, $k \in S$, $l \in \mathfrak{A}$, sont des entiers positifs. Le nombre d'électrons $\mathbf{a}_{k0}$, $k \in S$, est un entier. Les vecteurs atomiques $\mathbf{a}_l$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, et les vecteurs des coefficients stœchiométriques ν_r , $r \in \mathfrak{R}$, vérifient les relations de conservation $\langle \nu_r, \mathbf{a}_l \rangle = 0$, $r \in \mathfrak{R}$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$. Ces relations expriment la conservation des atomes pour $l \in \mathfrak{A}$ et la conservation de la charge pour $l = 0$ dans la r^e réaction.*

(Th₃) Les masses molaires atomiques $\tilde{m}_l$, $l \in \mathfrak{A}$, et la masse molaire électronique $\tilde{m}_0$ sont des constantes strictement positives. De plus, les masses molaires des espèces m_k , $k \in S$, sont données par les relations

$$m_k = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{m}_l \mathbf{a}_{kl} + \tilde{m}_0 \mathbf{a}_{k0}, \quad k \in S,$$

ces relations peuvent se récrire sous la forme vectorisée suivante

$$\mathbf{m} = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{m}_l \mathbf{a}_l + \tilde{m}_0 \mathbf{a}_0.$$

On a également la relation de proportionnalité entre la charge des espèces par unité de volume q_k , $k \in S$, et le nombre d'électrons de la k^e espèce, $q_k = -\alpha \mathbf{a}_{k0} n_k$, $k \in S$, où α est une constante strictement positive qui représente la valeur absolue de la charge d'une mole d'électrons. Cette relation de proportionnalité est équivalente à $z_k = -\alpha \mathbf{a}_{k0} / m_k$, $k \in S$.

(Th₄) Les constantes de réaction $\mathcal{K}_r$, $r \in \mathfrak{R}$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ positives de $T > 0$.

Ces hypothèses impliquent en particulier les propriétés vectorielles $\mathbf{a}_l \in \mathcal{R}^\perp$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, où $\mathcal{R} = \text{Vect}\{\nu_r, r \in \mathfrak{R}\}$. De plus, en utilisant la relation donnant la masse molaire et la charge volumique des espèces dans l'hypothèse (Th₃), on en déduit que les vecteurs $\mathbf{m}$ et $\mathbf{z}$ vérifient également $\mathbf{m} \in \mathcal{R}^\perp$ et $\mathbf{Mz} \in \mathcal{R}^\perp$, où $\mathbf{M}$ est la matrice diagonale des masses molaires $\mathbf{M} = \text{Diag}(m_1, \dots, m_{n^s})$.

II.2.6.2 Hypothèses sur les coefficients de transport

Dans cette sous-section, on introduit un ensemble d'hypothèses concernant les coefficients de transport qui sont dérivées de la théorie cinétique du chapitre I.

(Tr₁) Les coefficients de diffusion multiespèces $D_{kl}^\parallel$, $D_{kl}^\perp$ et $BD_{kl}^\odot$, $k, l \in S$, les taux de diffusion thermique $\chi_k^\parallel$, $\chi_k^\perp$ et $B\chi_k^\odot$, $k \in S$, la viscosité volumique κ , les viscosités de cisaillement η_1 , $B\eta_2$, η_3 , η_4 , $B\eta_5$ et les conductivités thermiques $\lambda^\parallel$, $\lambda^\perp$ et $B\lambda^\odot$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $(T, \varrho, \mathbf{B})$ pour $T > 0$, $\varrho > 0$ et $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^3$, où B est la norme du champ magnétique $\mathbf{B}$.

De plus, les coefficients $D_{kl}^\parallel$, $k, l \in S$, ne dépendent pas du champ magnétique $\mathbf{B}$ et on peut écrire $D_{kl}^\perp - D_{kl}^\parallel = B^2 \phi_{kl}^\perp(B^2)$ et $D_{kl}^\odot = B \phi_{kl}^\odot(B^2)$, où $\phi_{kl}^\perp$ et $\phi_{kl}^\odot$ sont des fonctions de $\mathcal{C}^\infty([0, \infty), \mathbb{R})$.

Les coefficients $\chi_k^\parallel$, $k \in S$, ne dépendent pas du champ magnétique $\mathbf{B}$ et on peut écrire $\chi_k^\perp - \chi_k^\parallel = B^2 \psi_k^\perp(B^2)$, et $\chi_k^\odot = B \psi_k^\odot(B^2)$ où $\psi_k^\perp$ et $\psi_k^\odot$ sont des fonctions de $\mathcal{C}^\infty([0, \infty), \mathbb{R})$.

Le coefficient $\lambda^\parallel$ ne dépend pas du champ magnétique $\mathbf{B}$ et on peut écrire $\lambda^\perp - \lambda^\parallel = B^2 \zeta^\perp(B^2)$ et $\lambda^\odot = B \zeta^\odot(B^2)$, où $\zeta^\perp$ et $\zeta^\odot$ sont des fonctions de $\mathcal{C}^\infty([0, \infty), \mathbb{R})$.

Finalement, on a $\eta_1 = \varphi_1(B^2)$, $\eta_2 = B \varphi_2(B^2)$, $\eta_3 = B^2 \varphi_3(B^2)$, $\eta_4 = B^2 \varphi_4(B^2)$, $\eta_5 = B^3 \varphi_5(B^2)$ et $2\eta_4 - \eta_3 = B^4 \varphi_6(B^2)$, où φ_α , $1 \leq \alpha \leq 6$, sont des fonctions de $\mathcal{C}^\infty([0, \infty), \mathbb{R})$.

(Tr₂) La viscosité volumique κ est une fonction positive et les viscosités de cisaillement $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4, \eta_5$, vérifient $\eta_1 + \eta_4 > 0$, $\eta_1 + \eta_3 > 0$ et $\eta_1 - \eta_3 > 0$.

(Tr₃) Pour $\varrho > 0$ et $T > 0$, les matrices $A^\parallel$, $A^\perp$ et $A^\odot$ définies par

$$A^\parallel = \begin{bmatrix} \frac{T}{p} \hat{\lambda}^\parallel & \theta^{\parallel\text{T}} \\ \theta^\parallel & D^\parallel \end{bmatrix}, \quad A^\perp = \begin{bmatrix} \frac{T}{p} \hat{\lambda}^\perp & \theta^{\perp\text{T}} \\ \theta^\perp & D^\perp \end{bmatrix}, \quad A^\odot = \begin{bmatrix} \frac{T}{p} \hat{\lambda}^\odot & \theta^{\odot\text{T}} \\ \theta^\odot & D^\odot \end{bmatrix},$$

sont symétriques et vérifient $\langle A^\parallel \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \geq 0$ et $\langle A^\perp \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \geq 0$, pour $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n^s+1}$. De plus, $\langle A^\parallel \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = 0$ si, et seulement si, le vecteur $\mathbf{x}$ est proportionnel au vecteur $(0, \varrho^{\text{T}})^{\text{T}}$ et de même $\langle A^\perp \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = 0$ si, et seulement si, le vecteur $\mathbf{x}$ est proportionnel à $(0, \varrho^{\text{T}})^{\text{T}}$. Enfin le vecteur $(0, \varrho^{\text{T}})^{\text{T}}$ est dans le noyau de la matrice $A^\odot$.

II.2.7 Production d'entropie

L'entropie par unité de masse s satisfait l'équation de bilan suivante

$$\partial_t(\rho s) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho s \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{\mathcal{Q}}{T} - \sum_{k \in S} \frac{g_k}{T} \rho_k \mathbf{V}_k \right) = \Upsilon, \quad (\text{II.16})$$

où Υ est le terme de production d'entropie donné par

$$\Upsilon = - \sum_{k \in S} \frac{g_k m_k \omega_k}{T} - \frac{\mathbf{II} : \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}}{T} - \left(\mathcal{Q} - \sum_{k \in S} \rho_k h_k \mathbf{V}_k \right) \cdot \frac{\partial_{\mathbf{x}} T}{T^2} - \sum_{k \in S} \frac{p}{T} \mathbf{V}_k \cdot \mathbf{d}_k. \quad (\text{II.17})$$

Le terme de production d'entropie Υ peut se décomposer en une somme de termes positifs et cette propriété est importante pour de nombreuses raisons : d'un point de vue thermodynamique, elle montre que le modèle macroscopique satisfait le second principe de la thermodynamique, hérité du modèle cinétique. D'un point de vue mathématique, l'entropie joue également un rôle central lorsque l'on étudie le caractère bien posé du système d'équations aux dérivées partielles résultant. Pour établir que le terme de production d'entropie se décompose en une somme de termes positifs, on utilise les différentes hypothèses faites sur les coefficients de transport et données dans la section précédente.

En utilisant les équations (II.10) et (II.11), la production d'entropie due à la chimie se réécrit facilement sous la forme

$$-\sum_{k \in \mathcal{S}} \frac{g_k m_k \omega_k}{T} = \sum_{r \in \mathfrak{R}} R \mathcal{K}_r \left(\exp \langle \nu_r^f, \mathbf{M} \mu \rangle - \exp \langle \nu_r^b, \mathbf{M} \mu \rangle \right) \log \left[\frac{\exp \langle \nu_r^f, \mathbf{M} \mu \rangle}{\exp \langle \nu_r^b, \mathbf{M} \mu \rangle} \right].$$

Les hypothèses (Th₁) et (Th₄) sur la positivité des constantes R , $\mathcal{K}_r$, $r \in \mathfrak{R}$, impliquent que le terme de production d'entropie dû à la chimie est positif.

On traite ensuite le terme de production d'entropie dû aux effets de viscosité. Il s'écrit

$$\begin{aligned} -\frac{1}{T} \mathbf{II} : \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} &= \frac{\kappa}{T} (\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v})^2 + (\eta_1 + \eta_4) \text{Trace}(\mathbf{M}^{\parallel} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\parallel}) \\ &\quad + \frac{\eta_1 + \eta_3}{2} [(\text{Trace}(\mathbf{M}^{\parallel} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\parallel}))^2 + \frac{1}{2} (\text{Trace}(\mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp}))^2] \\ &\quad + \frac{\eta_1 - \eta_3}{2} [\text{Trace}(\mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp}) - \frac{1}{2} (\text{Trace}(\mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp}))^2], \end{aligned}$$

où $\text{Trace}(A)$ représente la trace du tenseur A , $\mathbf{M}^{\parallel}$ la projection orthogonale dont l'image est engendrée par le vecteur $\mathbf{B}$ et $\mathbf{M}^{\perp} = \mathbb{I} - \mathbf{M}^{\parallel}$ la projection orthogonale dont le noyau est engendré par le vecteur $\mathbf{B}$. En utilisant l'hypothèse (Tr₂) sur la viscosité volumique κ et sur les viscosités de cisaillement $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4, \eta_5$, il faut étudier le signe des quantités suivantes

$$\begin{aligned} &\text{Trace}(\mathbf{M}^{\parallel} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\parallel}), \quad (\text{Trace}(\mathbf{M}^{\parallel} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\parallel}))^2 + \frac{1}{2} (\text{Trace}(\mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp}))^2, \\ &\text{Trace}(\mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp}) - \frac{1}{2} (\text{Trace}(\mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp}))^2, \end{aligned}$$

pour prouver la positivité de la production d'entropie due aux effets de viscosité. Comme ces expressions sont invariantes par changement de repères, on choisit une base orthonormée $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ telle que $\mathbf{e}_1$ est colinéaire au vecteur $\mathbf{B}$. Dans ce cas, on obtient

$$\begin{aligned} \text{Trace}(\mathbf{M}^{\parallel} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\parallel}) &= S_{12}^2 + S_{13}^2, \\ (\text{Trace}(\mathbf{M}^{\parallel} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\parallel}))^2 + \frac{1}{2} (\text{Trace}(\mathbf{M}^{\perp} \mathbf{S} \mathbf{M}^{\perp}))^2 &= S_{11}^2 + \frac{1}{2} (S_{22} + S_{33})^2, \end{aligned}$$

et

$$\text{Trace}(\mathbf{M}^\perp \mathbf{S} \mathbf{M}^\perp \mathbf{M}^\perp \mathbf{S} \mathbf{M}^\perp) - \frac{1}{2}(\text{Trace}(\mathbf{M}^\perp \mathbf{S} \mathbf{M}^\perp))^2 = 2S_{23}^2 + \frac{1}{2}(S_{22} - S_{33})^2,$$

et il est alors immédiat que la contribution $-\frac{1}{T}\mathbf{II}:\partial_{\mathbf{x}}\mathbf{v}$ est positive et n'est nulle que si, et seulement si, le tenseur des taux de déformation $\mathbf{S}$ est nul.

Finalement, on montre que le terme de production d'entropie correspondant au flux de chaleur et aux vitesses de diffusion

$$\Upsilon_v = - \left(\mathcal{Q} - \sum_{k \in S} \rho_k h_k \mathbf{V}_k \right) \cdot \frac{\partial_{\mathbf{x}} T}{T^2} - \sum_{k \in S} \frac{p}{T} \mathbf{V}_k \cdot \mathbf{d}_k$$

est positif. En utilisant les expressions (II.5) et (II.8) de $\mathbf{V}_k$, $k \in S$, et $\mathcal{Q}$, on peut écrire

$$\Upsilon_v = \frac{p}{T} \sum_{i \in C} \left[\langle A^\parallel \mathbf{x}_i^\parallel, \mathbf{x}_i^\parallel \rangle + \langle A^\perp \mathbf{x}_i^\perp, \mathbf{x}_i^\perp \rangle \right],$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_i^\parallel &= \left(\frac{1}{T} ((\partial_{\mathbf{x}} T)^\parallel)_i, (\mathbf{d}_1^\parallel)_i, \dots, (\mathbf{d}_{n^s}^\parallel)_i \right)^\top, \quad i \in C, \\ \mathbf{x}_i^\perp &= \left(\frac{1}{T} ((\partial_{\mathbf{x}} T)^\perp)_i, (\mathbf{d}_1^\perp)_i, \dots, (\mathbf{d}_{n^s}^\perp)_i \right)^\top, \quad i \in C. \end{aligned}$$

En utilisant l'hypothèse (Tr_3) , on obtient immédiatement que le dernier terme de production d'entropie correspondant au flux de chaleur et aux vitesses de diffusion est positif.

II.2.8 Formulations alternatives

Les équations de bilan décrivant la partie fluide (II.1)–(II.3) et les équations de Maxwell (II.13) (II.15) ne sont pas sous forme conservative. Les termes sources contiennent en particulier la densité de courant électrique $\mathbf{J}$. Cette section est consacrée à la discussion de trois différentes formulations de ces équations obtenues en combinant les équations fluides et les équations de Maxwell.

On définit l'énergie électromagnétique par unité de masse e^e , le vecteur de Poynting $\mathbf{P}$ et le tenseur des forces électromagnétique $\mathbf{T}$ par

$$\begin{aligned} \rho e^e &= \frac{1}{2}(\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}), \\ \mathbf{P} &= \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \wedge \mathbf{B}, \\ \mathbf{T} &= \varepsilon_0 \mathbf{E} \otimes \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} - \frac{1}{2}(\varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) \mathbb{I}. \end{aligned}$$

En utilisant les équations de Maxwell (II.12)–(II.15), on obtient l'équation de conservation du moment électromagnétique

$$\partial_t(\varepsilon_0\mu_0\mathbf{P}) - \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{T} = -q\mathbf{E} - \mathbf{J} \wedge \mathbf{B}, \quad (\text{II.18})$$

et l'équation de conservation de l'énergie électromagnétique

$$\partial_t(\rho e^e) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P} = -\mathbf{J} \cdot \mathbf{E}. \quad (\text{II.19})$$

La combinaison de l'équation de la conservation de la quantité de mouvement (II.2) et de celle de la conservation du moment électromagnétique (II.18) fournit l'équation de conservation de la quantité de mouvement totale

$$\partial_t(\rho\mathbf{v} + \varepsilon_0\mu_0\mathbf{P}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p\mathbb{I} - \mathbf{T}) = \rho\mathbf{g}, \quad (\text{II.20})$$

et la combinaison de l'équation de conservation de l'énergie du fluide (II.3) et de celle de la la conservation de l'énergie électromagnétique (II.19) donne l'équation de conservation de l'énergie totale

$$\partial_t(\rho e^t) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot [(\rho e^t + p)\mathbf{v} + \mathbf{P}] + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{Q} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v}) = \rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{v}, \quad (\text{II.21})$$

où l'énergie totale par unité de masse e^t est définie par

$$\rho e^t = \rho e^f + \rho e^e = \rho e + \frac{1}{2}\rho\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2}(\varepsilon_0\mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \frac{1}{\mu_0}\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}).$$

On peut à présent considérer différentes équations de bilan couplées avec les équations de Maxwell. Ces systèmes proposés sont formellement équivalents mais leur structures mathématiques diffèrent.

Le premier système correspond aux premières équations de conservation du fluide

$$\begin{cases} \partial_t \rho_k + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_k \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{F}_k^d) = m_k \omega_k, & k \in S, \\ \partial_t(\rho\mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p\mathbb{I}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{\Pi} = \rho\mathbf{g} + q\mathbf{E} + \mathbf{J} \wedge \mathbf{B}, \\ \partial_t(\rho e^f) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot [(\rho e^f + p)\mathbf{v}] + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{Q} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v}) = \rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{J} \cdot \mathbf{E}. \end{cases} \quad (\text{II.22})$$

Une deuxième possibilité est la formulation conservative

$$\begin{cases} \partial_t \rho_k + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_k \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{F}_k^d) = m_k \omega_k, & k \in S, \\ \partial_t(\rho\mathbf{v} + \varepsilon_0\mu_0\mathbf{P}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p\mathbb{I} - \mathbf{T}) = \rho\mathbf{g}, \\ \partial_t(\rho e^t) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot [(\rho e^t + p)\mathbf{v} + \mathbf{P}] + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{Q} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v}) = \rho\mathbf{g} \cdot \mathbf{v}. \end{cases} \quad (\text{II.23})$$

La dernière possibilité proposée est une forme intermédiaire

$$\begin{cases} \partial_t \rho_k + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_k \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{F}_k^d) = m_k \omega_k, & k \in S, \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbb{I}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \Pi = \rho \mathbf{g} + q \mathbf{E} + \mathbf{J} \wedge \mathbf{B}, \\ \partial_t (\rho e^t) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot [(\rho e^t + p) \mathbf{v} + \mathbf{P}] + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathcal{Q} + \Pi \cdot \mathbf{v}) = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v}. \end{cases} \quad (\text{II.24})$$

Le premier système (II.22) n'est pas satisfaisant car la matrice Hessienne de $-\rho s$ par rapport à la variable conservative correspondante $(\rho_1, \dots, \rho_{n^s}, \rho \mathbf{v}^T, \mathbf{E}^T, \mathbf{B}^T, \rho e^f)^T$ n'est pas définie positive. On peut tout de même appliquer les résultats d'existence de la section II.4 à cette formulation en considérant l'entropie mathématique modifiée $-\rho s + \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{B} / \mu_0$.

La deuxième formulation conservative (II.23) est de prime abord attractive car, en l'absence de force externe $\mathbf{g}$, les équations sont sous forme conservative. Cependant, ce n'est pas d'une grande utilité puisque le système complet comprenant les équations de Maxwell contient encore des termes sources dans l'équation de Maxwell-Ampere (II.15), ces termes sources dépendant même des gradients de la solution au travers de la densité de courant de conduction $\mathbf{j}$. De plus, les calculs correspondants des formes partiellement symétrisées sont beaucoup plus compliqués et la structure mathématique du système résultant est identique à celle de la troisième formulation (II.24). Enfin, les formes partiellement normales correspondantes coïncident avec celles de la troisième formulation (II.24) et conduisent aux mêmes résultats d'existence.

C'est la dernière formulation (II.24) que l'on choisira d'utiliser dans toute la suite de ce chapitre. La matrice Hessienne de l'entropie naturelle $-\rho s$ par rapport à la variable conservative correspondante $(\rho_1, \dots, \rho_{n^s}, \rho \mathbf{v}^T, \mathbf{E}^T, \mathbf{B}^T, \rho e^t)^T$ est définie positive et les calculs des formes partiellement symétrisées ne sont pas si compliqués que ceux de la deuxième formulation (II.23) car le couplage entre les équations est moins fort. Par abus de langage, on dira que les variables ρ_k , $k \in S$, $\rho \mathbf{v}$, $\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$ et ρe^t sont les variables conservatives même si le système écrit en ces variables n'est pas complètement sous forme conservative.

II.3 Forme quasilinéaire

Dans cette section, on récrit le système des équations modélisant les plasmas dissipatifs réactifs sous la forme d'un système quasi-linéaire d'équations aux dérivées partielles du second ordre en la variable conservative U .

II.3.1 Notations vectorielles

On introduit à présent une notation compacte qui sera utilisée dans toute la suite de ce chapitre. On définit la variable conservative $\mathbf{U}$ par

$$\mathbf{U} = \left(\varrho^T, \rho \mathbf{v}^T, \mathbf{E}^T, \mathbf{B}^T, \rho e^t \right)^T, \quad (\text{II.25})$$

et la variable naturelle $\mathbf{Z}$ par

$$\mathbf{Z} = \left(\varrho^T, \mathbf{v}^T, \mathbf{E}^T, \mathbf{B}^T, T \right)^T. \quad (\text{II.26})$$

Les composantes du vecteur $\mathbf{U}$ apparaissent naturellement dans le système d'équations aux dérivées partielles modélisant les mélanges gazeux ionisés et magnétisés. Par ailleurs, les composantes de la variable naturelle $\mathbf{Z}$ sont plus pratiques à utiliser pour les calculs des identités différentielles.

Les équations de conservation peuvent se récrire sous la forme compacte

$$\partial_t \mathbf{U} + \sum_{i \in C} \partial_i \mathbf{F}_i + \sum_{i \in C} \partial_i \mathbf{F}_i^{\text{diss}} = \Omega^{\mathbf{j}}, \quad (\text{II.27})$$

où C est l'ensemble $\{1, 2, 3\}$, $\mathbf{F}_i$, $i \in C$, le flux convectif dans la i^e direction, $\mathbf{F}_i^{\text{diss}}$, $i \in C$, le flux dissipatif dans la i^e direction et $\Omega^{\mathbf{j}}$ le terme source. On utilise ici l'exposant $\mathbf{j}$ sur le terme source pour indiquer qu'il dépend des gradients des variables macroscopiques au travers de la densité de courant $\mathbf{j}$, à cause de l'équation de Maxwell-Ampere (II.15). En utilisant les équations de conservation (II.1)–(II.3) et les équations de Maxwell (II.13) (II.15), on obtient facilement que le terme source $\Omega^{\mathbf{j}}$ s'écrit

$$\Omega^{\mathbf{j}} = \left(m_1 \omega_1, \dots, m_{n^s} \omega_{n^s}, (\rho \mathbf{g} + q \mathbf{E} + \mathbf{J} \wedge \mathbf{B})^T, -\frac{1}{\varepsilon_0} \mathbf{J}^T, 0_{1,3}, \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} \right)^T, \quad (\text{II.28})$$

le flux convectif $\mathbf{F}_i$, $i \in C$, est donné par

$$\mathbf{F}_i = \left(\varrho^T v_i, \rho \mathbf{v}^T v_i + p \mathbf{e}_i^T, -\frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{B})^T, (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{E})^T, (\rho e^t + p) v_i + P_i \right)^T, \quad (\text{II.29})$$

où les vecteurs $\mathbf{e}_i$, $i \in C$, sont les vecteurs de la base canonique de $\mathbb{R}^3$, le flux dissipatif $\mathbf{F}_i^{\text{diss}}$, $i \in C$, a pour expression

$$\mathbf{F}_i^{\text{diss}} = \mathbf{F}_i^{\text{diff}} + \mathbf{F}_i^{\text{visc}}, \quad (\text{II.30})$$

où $\mathbf{F}_i^{\text{visc}}$, $i \in C$, le flux de viscosité et $\mathbf{F}_i^{\text{diff}}$, $i \in C$, le flux de diffusion sont définis par

$$\mathbf{F}_i^{\text{visc}} = (0_{1, n^s}, \mathbf{II}_i, 0_{1,3}, 0_{1,3}, \mathbf{II}_i \cdot \mathbf{v})^T \quad (\text{II.31})$$

et

$$\mathbf{F}_i^{\text{diff}} = \left(\mathcal{F}_{1i}^{\text{d}}, \dots, \mathcal{F}_{n^s i}^{\text{d}}, 0_{1,3}, 0_{1,3}, 0_{1,3}, \mathcal{Q}_i \right)^{\text{T}}, \quad (\text{II.32})$$

où l'on a noté $\mathbf{II}_i$, $i \in \mathbb{C}$, la i^{e} ligne extraite du tenseur de viscosité $\mathbf{II}$.

II.3.2 L'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{U}$

Les flux convectifs et dissipatifs sont naturellement donnés comme des fonctions de la variable naturelle $\mathbf{Z}$. Dans le but d'exprimer la variable naturelle $\mathbf{Z}$ en fonction de la variable conservative $\mathbf{U}$, on étudie l'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{U}$ et son image. On introduit les deux ensembles ouverts $\mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$ et $\mathcal{O}_{\mathbf{U}}$ définis par

$$\mathcal{O}_{\mathbf{Z}} = (0, \infty)^{n^s} \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times (0, \infty)$$

et

$$\mathcal{O}_{\mathbf{U}} = \{(u_i) \in \mathbb{R}^{n^s+10} : u_1, \dots, u_{n^s} > 0, u_{n^s+10} > f(u_i)\},$$

où f est l'application de $(0, \infty)^{n^s} \times \mathbb{R}^9$ dans $\mathbb{R}$ qui s'écrit

$$f(u_i) = \frac{1}{2} \left(\frac{\sum_{i=n^s+1}^{n^s+3} u_i^2}{\sum_{i=1}^{n^s} u_i} + \varepsilon_0 \sum_{i=n^s+4}^{n^s+6} u_i^2 + \frac{1}{\mu_0} \sum_{i=n^s+7}^{n^s+9} u_i^2 \right) + \sum_{i=1}^{n^s} u_i e_i^0,$$

e_i^0 étant l'énergie interne par unité de masse de la i^{e} espèce à la température nulle.

Proposition II.1

En supposant que les hypothèses (Th₁-Th₄) sont satisfaites, l'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{U}$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de l'ouvert $\mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$ sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_{\mathbf{U}}$.

Preuve - II.1 -

De l'hypothèse (Th₁) sur les coefficients $c_{v,k}$, $k \in \mathbb{S}$, on déduit immédiatement que l'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{U}$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur le domaine $\mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$. De plus, il est rapide de vérifier que l'application est injective et surjective sur l'ensemble $\mathcal{O}_{\mathbf{U}}$ grâce à la stricte positivité des coefficients $c_{v,k}$, $k \in \mathbb{S}$, ce qui est supposé dans (Th₁). La

matrice jacobienne $\partial_Z \mathbf{U}$ est donnée par

$$\partial_Z \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{n^s, n^s} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 1} \\ \mathbf{v} \otimes \mathbf{u} & \rho \mathbb{I} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & \mathbb{I} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & \mathbb{I} & 0_{3, 1} \\ \mathbf{e}^{\text{fT}} & \rho \mathbf{v}^{\text{T}} & \varepsilon_0 \mathbf{E}^{\text{T}} & \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^{\text{T}} & \rho c_v \end{bmatrix},$$

où l'on a introduit le vecteur $\mathbf{e}^{\text{f}}$ défini par $\mathbf{e}^{\text{f}} = (e_1^{\text{f}}, \dots, e_{n^s}^{\text{f}})^{\text{T}}$, avec $e_k^{\text{f}} = e_k + \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$, l'énergie fluide de la k^{e} espèce par unité de masse. Cette matrice est inversible sur $\mathcal{O}_Z$ grâce à sa structure triangulaire et à l'hypothèse (Th₁) qui implique que $\rho c_v > 0$. On déduit alors du théorème d'inversion globale que l'application $Z \mapsto \mathbf{U}$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme sur $\mathcal{O}_U$. La convexité de l'ensemble $\mathcal{O}_U$ est finalement une conséquence directe de la convexité de la fonction f , qui est établie en évaluant sa dérivée seconde. ■

II.3.3 Forme quasilinéaire

En utilisant la proposition II.1 et les expressions des flux convectifs et dissipatifs en fonction de la variable naturelle, on récrit le système (II.27) sous la forme d'un système quasi-linéaire de la variable conservative $\mathbf{U}$.

Proposition II.2

Les flux convectifs $F_i(\mathbf{U})$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$, les flux dissipatifs $F_i^{\text{diss}}(\mathbf{U}, \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{U})$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$ et de $\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{3(n^s+10)}$, et le terme source $\Omega^j(\mathbf{U}, \mathbf{j})$ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$ et de $\mathbf{j} \in \mathbb{R}^3$. De plus, le système d'équations aux dérivées partielles (II.27) peut se récrire sous la forme

$$\partial_t \mathbf{U} + \sum_{i \in C} [A_i(\mathbf{U}) + A_i^e(\mathbf{U})] \partial_i \mathbf{U} = \sum_{i, j \in C} \partial_i [B_{ij}(\mathbf{U}) \partial_j \mathbf{U}] + \Omega(\mathbf{U}), \quad (\text{II.33})$$

où les matrices $A_i(\mathbf{U})$, $A_i^e(\mathbf{U})$, $i \in C$, $B_{ij}(\mathbf{U})$, $i, j \in C$, et le vecteur $\Omega(\mathbf{U})$ sont des

fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $U \in \mathcal{O}_U$. De plus, on a

$$\begin{aligned} F_i^{\text{diss}}(U, \partial_x U) &= - \sum_{j \in C} (B_{ij}(U) \partial_j U + F_{ij}^e(U)), \quad i \in C, \\ \Omega^j(U, \mathbf{j}) &= \Omega(U) + \sum_{i \in C} A_i^{e,\Omega}(U) \partial_i U, \\ A_i(U) &= \partial_U F_i(U), \quad A_i^e(U) = - \sum_{j \in C} \partial_U F_{ij}^e(U) - A_i^{e,\Omega}(U), \quad i \in C, \end{aligned}$$

où les matrices $A_i^{e,\Omega}(U)$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $U \in \mathcal{O}_U$.

On observe une différence fondamentale entre les mélanges neutres et les mélanges ionisés. Pour les mélanges neutres, les termes dissipatifs F_i^{diss} , $i \in C$, sont des combinaisons linéaires des gradients et les termes F_{ij}^e , $i, j \in C$, sont nuls [Gio99]. Pour les mélanges ionisés, les termes dissipatifs F_i^{diss} , $i \in C$, contiennent encore des combinaisons linéaires de gradients mais également des termes d'ordre zéro que l'on a notés F_{ij}^e , $i, j \in C$, qui sont dus à l'action des forces électromagnétiques macroscopiques sur les espèces ionisées. De plus, le terme source Ω^j ne dépend pas seulement de la variable U mais également du gradient $\partial_x U$ au travers de la densité de courant de conduction $\mathbf{j}$ apparaissant dans l'équation de Maxwell-Ampere (II.15).

Preuve - II.2 -

On commence par remarquer qu'il est plus facile de différencier par rapport à la variable naturelle Z que par rapport à la variable conservative U .

En utilisant l'expression (II.29) des vecteurs F_i , $i \in C$, et l'hypothèse (Th₁) concernant la régularité des coefficients de chaleur spécifique $c_{v,k}$, $k \in S$, on obtient immédiatement que les vecteurs $F_i(Z)$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$.

En ce qui concerne les flux de dissipation, on écrit $F_i^{\text{diss}} = F_i^{\text{diff}} + F_i^{\text{visc}}$, $i \in C$, et on traite séparément les deux termes. Le premier terme F_i^{diff} correspond aux termes de diffusion et le second F_i^{visc} aux termes de viscosité. Les flux de transport Π , $\mathcal{F}_k^d$, $k \in S$ et $\mathcal{Q}$ se scindent naturellement en une somme des gradients de la variable naturelle Z et une somme de termes d'ordre zéro. En particulier, on peut écrire le terme F_i^{diff} , $i \in C$, sous la forme

$$F_i^{\text{diff}} = - \sum_{j \in C} \left(\widehat{B}_{ij}^{\text{diff}} \partial_j Z + F_{ij}^e \right), \quad (\text{II.34})$$

où les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$ et les vecteurs $\mathbf{F}_{ij}^e$, $i, j \in \mathbb{C}$, sont définis par

$$\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} = \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \widehat{\mathbf{B}}^{\parallel} + (\delta_{ij} - \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j) \widehat{\mathbf{B}}^{\perp} + R_{ij}(\mathcal{B}) \widehat{\mathbf{B}}^{\odot}, \quad (\text{II.35})$$

$$\mathbf{F}_{ij}^e = - [\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{F}^{\text{e}\parallel} + (\delta_{ij} - \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j) \mathbf{F}^{\text{e}\perp} + R_{ij}(\mathcal{B}) \mathbf{F}^{\text{e}\odot}] (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_j. \quad (\text{II.36})$$

Les matrices $\widehat{\mathbf{B}}^{\parallel}$, $\widehat{\mathbf{B}}^{\perp}$ et $\widehat{\mathbf{B}}^{\odot}$ ont la structure suivante

$$\widehat{\mathbf{B}}^{\diamond} = \frac{T}{p} \begin{bmatrix} \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\diamond} & 0_{n^e, 3} & 0_{n^e, 3} & 0_{n^e, 3} & \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, e}^{\diamond} \\ 0_{3, n^e} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^e} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^e} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ \widehat{\mathbf{B}}_{e, \varrho}^{\diamond} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & \widehat{\mathbf{B}}_{e, e}^{\diamond} \end{bmatrix}, \quad \diamond \in \{\parallel, \perp, \odot\}. \quad (\text{II.37})$$

Les coefficients correspondant à $\diamond = \parallel$ s'écrivent

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\parallel} &= D_{\varrho}^{\parallel} \mathbf{d}_{\varrho}^r, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, e}^{\parallel} &= D_{\varrho}^{\parallel} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right), \\ \widehat{\mathbf{B}}_{e, \varrho}^{\parallel} &= (\boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\parallel} \mathbf{d}_{\varrho}^r, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{e, e}^{\parallel} &= \frac{p}{T} \lambda^{\parallel} + (\boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\parallel} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right), \end{aligned}$$

ceux correspondant à $\diamond = \perp$

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\perp} &= D_{\varrho}^{\perp} \mathbf{d}_{\varrho}^r, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, e}^{\perp} &= D_{\varrho}^{\perp} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) - \frac{1}{T^2} D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot}, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{e, \varrho}^{\perp} &= (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\perp} \mathbf{d}_{\varrho}^r - \boldsymbol{\varkappa}^{\odot T} D_{\varrho}^{\odot} \mathbf{d}_{\varrho}^r, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{e, e}^{\perp} &= \frac{p}{T} \lambda^{\perp} + (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\perp} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) \\ &\quad - \frac{1}{T^2} \left(\boldsymbol{\varkappa}^{\odot T} D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} + \boldsymbol{\varkappa}^{\odot T} D_{\varrho}^{\odot} (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + T \mathbf{r}) + (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} \right), \end{aligned}$$

et ceux correspondant à $\diamond = \odot$

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\odot} &= D_{\varrho}^{\odot} \mathbf{d}_{\varrho}^r, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{\varrho, e}^{\odot} &= D_{\varrho}^{\odot} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) + \frac{1}{T^2} D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot}, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{e, \varrho}^{\odot} &= (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\odot} \mathbf{d}_{\varrho}^r + \boldsymbol{\varkappa}^{\odot T} D_{\varrho}^{\perp} \mathbf{d}_{\varrho}^r, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{e, e}^{\odot} &= \frac{p}{T} \lambda^{\odot} + (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\odot} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) \\ &\quad + \frac{1}{T^2} \left(-\boldsymbol{\varkappa}^{\odot T} D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} + \boldsymbol{\varkappa}^{\odot T} D_{\varrho}^{\perp} (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + T \mathbf{r}) + (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} \right), \end{aligned}$$

où l'on a introduit les vecteurs $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_{n^s})^T$, $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_{n^s})^T$ et la matrice diagonale de taille $n^s \times n^s$ $\mathbf{d}_\rho^r = \text{Diag}(r_1/\rho_1, \dots, r_{n^s}/\rho_{n^s})$. De plus, pour alléger les expressions de ces matrices, on a également défini les vecteurs $\boldsymbol{\chi}^\parallel$, $\boldsymbol{\chi}^\perp$, $\boldsymbol{\chi}^\odot$, de taille n^s par

$$\boldsymbol{\chi}_k^\parallel = \frac{p}{\rho_k} \chi_k^\parallel, \quad \boldsymbol{\chi}_k^\perp = \frac{p}{\rho_k} \chi_k^\perp, \quad \boldsymbol{\chi}_k^\odot = \frac{p}{\rho_k} \chi_k^\odot, \quad k \in S,$$

et les matrices carrées $D_\rho^\parallel$, $D_\rho^\perp$ et $D_\rho^\odot$, de taille $n^s \times n^s$ par

$$(D_\rho^\parallel)_{k,l} = D_{kl}^\parallel \rho_k \rho_l, \quad (D_\rho^\perp)_{k,l} = D_{kl}^\perp \rho_k \rho_l, \quad (D_\rho^\odot)_{k,l} = D_{kl}^\odot \rho_k \rho_l, \quad k, l \in S.$$

On exprime finalement les vecteurs $\mathbf{F}^{\text{e}\parallel}$, $\mathbf{F}^{\text{e}\perp}$ et $\mathbf{F}^{\text{e}\odot}$ sous la forme

$$\mathbf{F}^{\text{e}\diamond} = \frac{1}{p} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_\rho^{\text{e}\diamond} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & \mathbf{F}_\epsilon^{\text{e}\diamond} \end{bmatrix}^T, \quad \diamond \in \{\parallel, \perp, \odot\}, \quad (\text{II.38})$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_\rho^{\text{e}\parallel} &= D_\rho^\parallel \mathbf{z}, & \mathbf{F}_\rho^{\text{e}\perp} &= D_\rho^\perp \mathbf{z}, & \mathbf{F}_\rho^{\text{e}\odot} &= D_\rho^\odot \mathbf{z}, \\ \mathbf{F}_\epsilon^{\text{e}\parallel} &= (\boldsymbol{\chi}^\parallel + \mathbf{h})^T D_\rho^\parallel \mathbf{z}, \\ \mathbf{F}_\epsilon^{\text{e}\perp} &= (\boldsymbol{\chi}^\perp + \mathbf{h})^T D_\rho^\perp \mathbf{z} - \boldsymbol{\chi}^{\odot T} D_\rho^\odot \mathbf{z}, \\ \mathbf{F}_\epsilon^{\text{e}\odot} &= (\boldsymbol{\chi}^\perp + \mathbf{h})^T D_\rho^\odot \mathbf{z} + \boldsymbol{\chi}^{\odot T} D_\rho^\perp \mathbf{z}, \end{aligned}$$

avec $\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_{n^s})^T$.

Dans le but d'étudier la régularité du vecteur $\mathbf{F}_i^{\text{diff}}(\mathbf{Z}, \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{Z})$, $i \in C$, on prouve que les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}(\mathbf{Z})$, $i, j \in C$, et les vecteurs $\mathbf{F}_{ij}^{\text{e}}(\mathbf{Z})$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$. On peut récrire les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$, $i, j \in C$, sous la forme

$$\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} = \delta_{ij} \widehat{\mathbf{B}}^\perp + \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j (\widehat{\mathbf{B}}^\parallel - \widehat{\mathbf{B}}^\perp) + R_{ij}(\mathcal{B}) \widehat{\mathbf{B}}^\odot.$$

En utilisant les hypothèses (Th₁) et (Tr₁), on obtient immédiatement que la matrice $\widehat{\mathbf{B}}^\perp$ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$, que la matrice $\widehat{\mathbf{B}}^\parallel - \widehat{\mathbf{B}}^\perp$ s'écrit $B^2 \Phi_1(\mathbf{Z})$ et enfin que la matrice $\widehat{\mathbf{B}}^\odot$ s'écrit $B \Phi_2(\mathbf{Z})$, où $\Phi_1(\mathbf{Z})$ et $\Phi_2(\mathbf{Z})$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$. Comme $\mathbf{B} = \mathcal{B} \mathcal{B}$, ces propriétés permettent d'écrire la relation

$$\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}(\mathbf{Z}) = \delta_{ij} \widehat{\mathbf{B}}^\perp(\mathbf{Z}) + B_i B_j \Phi_1(\mathbf{Z}) + R_{ij}(\mathcal{B}) \Phi_2(\mathbf{Z}),$$

qui implique que les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}(\mathbf{Z})$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$. De même, on peut récrire les vecteurs $\mathbf{F}_{ij}^{\text{e}}$, $i, j \in C$, sous la forme

$$\mathbf{F}_{ij}^{\text{e}} = - [\delta_{ij} \mathbf{F}^{\text{e}\perp} + \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j (\mathbf{F}^{\text{e}\parallel} - \mathbf{F}^{\text{e}\perp}) + R_{ij}(\mathcal{B}) \mathbf{F}^{\text{e}\odot}] (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_j.$$

En utilisant les hypothèses (Th₁) et (Tr₁), on obtient que le vecteur $\mathbf{F}^{e\perp}$ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$, que le vecteur $\mathbf{F}^{e\parallel} - \mathbf{F}^{e\perp}$ s'écrit $B^2\Phi_3(\mathbf{Z})$ et enfin que le vecteur $\mathbf{F}^{e\odot}$ s'écrit $B\Phi_4(\mathbf{Z})$, où $\Phi_3(\mathbf{Z})$ et $\Phi_4(\mathbf{Z})$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$. Par conséquent, on obtient l'expression suivante pour les vecteurs $\mathbf{F}_{ij}^e$, $i, j \in C$,

$$\mathbf{F}_{ij}^e = - [\delta_{ij}\mathbf{F}^{e\perp}(\mathbf{Z}) + B_i B_j \Phi_3(\mathbf{Z}) + R_{ij}(\mathbf{B})\Phi_4(\mathbf{Z})] (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B})_j,$$

qui implique que les vecteurs $\mathbf{F}_{ij}^e$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$. On déduit alors de ces deux propriétés de régularité sur les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$, $i, j \in C$, et sur les vecteurs $\mathbf{F}_{ij}^e$, $i, j \in C$, que les flux de diffusion $\mathbf{F}_i^{\text{diff}}(\mathbf{Z}, \partial_{\mathbf{x}}\mathbf{Z})$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$ et de $\partial_{\mathbf{x}}\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{3(n^s+10)}$ et que les matrices $\partial_Z \mathbf{F}_{ij}^e$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_Z$.

En ce qui concerne les vecteurs $\mathbf{F}_i^{\text{visc}}$, $i \in C$, on écrit

$$\mathbf{F}_i^{\text{visc}} = - \sum_{j \in C} \widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}} \partial_j \mathbf{Z}, \quad \text{avec} \quad \widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}} = \kappa \widehat{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa + \sum_{\alpha=1}^5 \eta_\alpha \widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\eta_\alpha}. \quad (\text{II.39})$$

Après quelques calculs similaires à ceux du cas des mélanges neutres, on obtient les expressions suivantes pour les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^\Delta$, $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\eta_\alpha}$, $\alpha \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$, $i, j \in C$,

$$\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^\Delta = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 1} \\ 0_{3, n^s} & \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^\Delta & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{1, n^s} & \mathbf{v}^\top \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^\Delta & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & 0_{1, 1} \end{bmatrix}, \quad \Delta \in \{\kappa, \eta_1 \dots \eta_5\}, \quad (\text{II.40})$$

avec

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^\kappa &= \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^{\eta_1} &= \delta_{ij} \mathbb{I} + \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i - \frac{2}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^{\eta_2} &= 2\delta_{ij} \mathbf{R}(\mathbf{B}) + \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) + 2\mathbf{e}_i^\top \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathbb{I}, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^{\eta_3} &= 2\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} - \frac{2}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j + 2\mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \mathbf{R}(\mathbf{B}), \\ \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^{\eta_4} &= -4\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbb{I} + \delta_{ij} \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + \mathcal{B}_i \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{B} + \mathcal{B}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{e}_i, \\ \widehat{\mathbf{B}}_{ij, \mathbf{v}}^{\eta_5} &= -2\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) - 2\mathbf{e}_i^\top \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}. \end{aligned}$$

Pour obtenir que les vecteurs F_i^{visc} , $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$, on doit seulement prouver que les matrices $\widehat{B}_{ij}^{\text{visc}}(Z)$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$, en utilisant l'expression (II.39) des vecteurs F_i^{visc} , $i \in C$. L'hypothèse (Tr₁) et l'expression (II.40) des matrices $\widehat{B}_{ij}^\kappa$, $\widehat{B}_{ij}^{\eta_\alpha}$, $\alpha \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$, $i, j \in C$, impliquent immédiatement que les matrices $\widehat{B}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$ et de $\mathbf{B} \neq 0$. Pour prouver que ces matrices sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$, même lorsque le champ magnétique $\mathbf{B}$ est nul, on remarque qu'il est possible de récrire les matrices $\widehat{B}_{ij}^\kappa$, $\widehat{B}_{ij}^{\eta_\alpha}$, $\alpha \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$, $i, j \in C$, sous la forme

$$\begin{aligned}\kappa \widehat{B}_{ij,v}^\kappa &= \kappa \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \eta_1 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_1} &= \eta_1 [\delta_{ij} \mathbb{I} + \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i - \frac{2}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j], \\ \eta_2 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_2} &= \eta_2 [2\delta_{ij} \mathbf{R}(\mathbf{B}) + \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) + 2\mathbf{e}_i^T \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathbb{I}], \\ \eta_3 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_3} + \eta_4 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_4} &= \eta_3 [-\frac{2}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j + 2\mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \mathbf{R}(\mathbf{B})] \\ &\quad + \eta_4 [\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbb{I} + \delta_{ij} \mathcal{B} \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B}_i \mathbf{e}_j \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B}_j \mathcal{B} \otimes \mathbf{e}_i] \\ &\quad + 2(\eta_3 - 2\eta_4) \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}, \\ \eta_5 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_5} &= -\eta_5 [2\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{R}(\mathbf{B}) + \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) + 2\mathbf{e}_i^T \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}].\end{aligned}$$

En utilisant l'hypothèse (Tr₁), en particulier que $\eta_1 = \varphi_1(B^2)$, $\eta_2 = B\varphi_2(B^2)$, $\eta_3 = B^2\varphi_3(B^2)$, $\eta_4 = B^2\varphi_4(B^2)$, $\eta_5 = B^3\varphi_5(B^2)$, $2\eta_4 - \eta_3 = B^4\varphi_6(B^2)$, où les fonctions $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \varphi_5, \varphi_6$, sont des fonctions de $\mathcal{C}^\infty([0, \infty), \mathbb{R})$, on déduit que les matrices $\widehat{B}_{ij}^{\text{visc}}(Z)$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$, car on a

$$\begin{aligned}\kappa \widehat{B}_{ij,v}^\kappa &= \kappa \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j, \\ \eta_1 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_1} &= \varphi_1(B^2) [\delta_{ij} \mathbb{I} + \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i - \frac{2}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j], \\ \eta_2 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_2} &= \varphi_2(B^2) [2\delta_{ij} \mathbf{R}(\mathbf{B}) + \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) + 2\mathbf{e}_i^T \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathbb{I}], \\ \eta_3 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_3} + \eta_4 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_4} &= \varphi_3(B^2) [-\frac{2}{3} B^2 \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j + 2\mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i \mathbf{R}(\mathbf{B}) - \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \mathbf{R}(\mathbf{B})] \\ &\quad + \varphi_4(B^2) [\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbb{I} + \delta_{ij} \mathcal{B} \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B}_i \mathbf{e}_j \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B}_j \mathcal{B} \otimes \mathbf{e}_i] \\ &\quad - 2\varphi_6(B^2) \mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}, \\ \eta_5 \widehat{B}_{ij,v}^{\eta_5} &= -\varphi_5(B^2) [2\mathcal{B}_i \mathcal{B}_j \mathbf{R}(\mathbf{B}) + B^2 \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{R}(\mathbf{e}_j) + 2\mathbf{e}_i^T \mathbf{R}(\mathbf{B}) \mathbf{e}_j \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}].\end{aligned}$$

De plus, en utilisant l'expression (II.28) du vecteur Ω^j , l'hypothèse (Th₁) sur la régularité des chaleurs spécifiques $c_{v,k}$, $k \in S$, et l'hypothèse (Th₄) sur la régularité des constantes de réaction $\mathcal{K}_r$, $r \in \mathfrak{R}$, on obtient immédiatement que le vecteur $\Omega^j(Z, \mathbf{j})$ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$ et de $\mathbf{j} \in \mathbb{R}^3$. Quelques calculs permettent

d'écrire le vecteur Ω^j sous la forme

$$\Omega^j(Z, \mathbf{j}) = \Omega(Z) + \sum_{i \in \mathbb{C}} \hat{\mathbf{A}}_i^{\mathbf{e}, \Omega}(Z) \partial_i Z,$$

où le vecteur Ω est donné par

$$\Omega = (m_1 \omega_1, \dots, m_{n^s} \omega_{n^s}, \Omega_{\mathbf{v}}^T, \Omega_{\mathbf{E}}^T, 0_{1,3}, \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v})^T, \quad (\text{II.41})$$

avec

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{v}} &= \rho \mathbf{g} + \left[q \mathbb{I} + \sum_{k,l \in \mathbb{S}} B \frac{q_k q_l}{p} (D_{kl}^{\odot} (\mathbb{I} - \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}) - D_{kl}^{\perp} \mathbf{R}(\mathcal{B})) \right] (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}), \\ \Omega_{\mathbf{E}} &= -\frac{1}{\varepsilon_0} q \mathbf{v} - \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{k,l \in \mathbb{S}} \frac{q_k q_l}{p} (D_{kl}^{\parallel} \mathcal{B} \otimes \mathcal{B} + D_{kl}^{\perp} (\mathbb{I} - \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}) + D_{kl}^{\odot} \mathbf{R}(\mathcal{B})) (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}), \end{aligned}$$

et les matrices $\hat{\mathbf{A}}_i^{\mathbf{e}, \Omega}$, $i \in \mathbb{C}$, ont la structure

$$\hat{\mathbf{A}}_i^{\mathbf{e}, \Omega} = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 1} \\ \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \varrho}^{\mathbf{e}, \Omega} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \mathbf{e}}^{\mathbf{e}, \Omega} \\ \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \varrho}^{\mathbf{e}, \Omega} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \mathbf{e}}^{\mathbf{e}, \Omega} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & 0_{3,1} \\ 0_{1, n^s} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.42})$$

avec

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \varrho}^{\mathbf{e}, \Omega} &= -\frac{BT}{p} [\mathbf{e}_i^{\perp} (\mathbf{z}^T D_{\varrho}^{\odot} \mathbf{d}_{\varrho}^r) - \mathbf{e}_i^{\odot} (\mathbf{z}^T D_{\varrho}^{\perp} \mathbf{d}_{\varrho}^r)], \\ \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \mathbf{e}}^{\mathbf{e}, \Omega} &= -\frac{B}{p} \mathbf{z}^T \left[-D_{\varrho}^{\perp} \left(\frac{\boldsymbol{\kappa}^{\perp}}{T} + \mathbf{r} \right) \mathbf{e}_i^{\odot} + D_{\varrho}^{\perp} \frac{\boldsymbol{\kappa}^{\odot}}{T} \mathbf{e}_i^{\perp} + D_{\varrho}^{\odot} \left(\frac{\boldsymbol{\kappa}^{\perp}}{T} + \mathbf{r} \right) \mathbf{e}_i^{\perp} + D_{\varrho}^{\odot} \frac{\boldsymbol{\kappa}^{\odot}}{T} \mathbf{e}_i^{\odot} \right], \\ \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \varrho}^{\mathbf{e}, \Omega} &= \frac{T}{\varepsilon_0 p} \left[\mathbf{e}_i^{\parallel} (\mathbf{z}^T D_{\varrho}^{\parallel} \mathbf{d}_{\varrho}^r) + \mathbf{e}_i^{\perp} (\mathbf{z}^T D_{\varrho}^{\perp} \mathbf{d}_{\varrho}^r) + \mathbf{e}_i^{\odot} (\mathbf{z}^T D_{\varrho}^{\odot} \mathbf{d}_{\varrho}^r) \right], \\ \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \mathbf{e}}^{\mathbf{e}, \Omega} &= \frac{B}{\varepsilon_0 p} \mathbf{z}^T \left[D_{\varrho}^{\parallel} \left(\frac{\boldsymbol{\kappa}^{\parallel}}{T} + \mathbf{r} \right) \mathbf{e}_i^{\parallel} + D_{\varrho}^{\perp} \left(\frac{\boldsymbol{\kappa}^{\perp}}{T} + \mathbf{r} \right) \mathbf{e}_i^{\perp} + \right. \\ &\quad \left. D_{\varrho}^{\perp} \frac{\boldsymbol{\kappa}^{\odot}}{T} \mathbf{e}_i^{\odot} + D_{\varrho}^{\odot} \left(\frac{\boldsymbol{\kappa}^{\perp}}{T} + \mathbf{r} \right) \mathbf{e}_i^{\odot} - D_{\varrho}^{\odot} \frac{\boldsymbol{\kappa}^{\odot}}{T} \mathbf{e}_i^{\perp} \right]. \end{aligned}$$

En ce qui concerne la régularité du vecteur $\Omega(Z)$, son expression (II.41) implique immédiatement que c'est une fonction $\mathcal{C}^{\infty}$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$ et de $\mathbf{B} \neq 0$, en utilisant les hypothèses (Th₁) et (Tr₁). De plus, les relations $D_{kl}^{\perp} - D_{kl}^{\parallel} = B^2 \phi_{kl}^{\perp}(B^2)$ et $D_{kl}^{\odot} =$

$B\phi_{kl}^\odot(B^2)$, $k, l \in S$, dans lesquelles les fonctions $\phi_{kl}^\perp$, $\phi_{kl}^\odot$, $k, l \in S$, sont des fonctions de $\mathcal{C}^\infty([0, \infty), \mathbb{R})$, permettent de mettre les vecteurs $\Omega_{\mathbf{v}}$ et $\Omega_{\mathbf{E}}$ sous la forme

$$\begin{aligned}\Omega_{\mathbf{v}} &= \rho \mathbf{g} + \left[q \mathbb{I} + \sum_{k,l \in S} \frac{q_k q_l}{p} (\phi_{kl}^\odot(B^2)(B^2 \mathbb{I} - \mathbf{B} \otimes \mathbf{B}) - D_{kl}^\perp \mathbf{R}(\mathbf{B})) \right] (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}), \\ \Omega_{\mathbf{E}} &= -\frac{1}{\varepsilon_0} q \mathbf{v} - \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{k,l \in S} \frac{q_k q_l}{p} (D_{kl}^\perp \mathbb{I} - \phi_{kl}^\perp(B^2) \mathbf{B} \otimes \mathbf{B} + \phi_{kl}^\odot(B^2) \mathbf{R}(\mathbf{B})) (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}),\end{aligned}$$

ce qui implique que les vecteurs $\Omega_{\mathbf{v}}$ et $\Omega_{\mathbf{E}}$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$. On en déduit alors que le vecteur Ω est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$. En combinant les relations $D_{kl}^\perp - D_{kl}^\parallel = B^2 \phi_{kl}^\perp(B^2)$ et $D_{kl}^\odot = B \phi_{kl}^\odot(B^2)$, $k, l \in S$, et les relations données par l'hypothèse (Tr_1) $\chi_k^\perp - \chi_k^\parallel = B^2 \psi_k^\perp(B^2)$, $\chi_k^\odot = B \psi_k^\odot(B^2)$, $k \in S$, dans lesquelles les fonctions $\psi_k^\perp$ et $\psi_k^\odot$ sont des fonctions de $\mathcal{C}^\infty([0, \infty), \mathbb{R})$, on obtient que les matrices $\hat{\mathbf{A}}_i^{e,\Omega}$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$.

On effectue à présent le changement de variables $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{U}$ pour obtenir les propriétés du système dans la variable conservative $\mathbf{U}$. Les matrices $\mathbf{A}_i$, $\mathbf{A}_i^{e,\Omega}$, $i \in C$, et $\mathbf{B}_{ij}$, $i, j \in C$, s'écrivent

$$\mathbf{A}_i = \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{F}_i = \hat{\mathbf{A}}_i \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z}, \quad \mathbf{A}_i^{e,\Omega} = \hat{\mathbf{A}}_i^{e,\Omega} \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z}, \quad \mathbf{B}_{ij} = \hat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z},$$

où la matrice jacobienne $\partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z}$ est donnée par

$$\partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{n^s, n^s} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 1} \\ -\frac{1}{\rho} \mathbf{v} \otimes \mathbf{u} & \frac{1}{\rho} \mathbb{I} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & \mathbb{I} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & \mathbb{I} & 0_{3, 1} \\ -\frac{1}{\rho c_v} \mathbf{e}^{\text{redT}} & -\frac{1}{\rho c_v} \mathbf{v}^T & -\frac{\varepsilon_0}{\rho c_v} \mathbf{E}^T & -\frac{1}{\mu_0 \rho c_v} \mathbf{B}^T & \frac{1}{\rho c_v} \end{bmatrix},$$

où le vecteur $\mathbf{e}^{\text{red}}$ est défini par $\mathbf{e}^{\text{red}} = (e_1^{\text{red}}, \dots, e_{n^s}^{\text{red}})^T$, $e_k^{\text{red}} = e_k - \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} / 2$, $k \in S$, et les matrices $\hat{\mathbf{A}}_i = \partial_{\mathbf{Z}} \mathbf{F}_i$, $i \in C$, ont pour expression

$$\hat{\mathbf{A}}_i = \begin{bmatrix} v_i \mathbb{I}_{n^s, n^s} & \varrho \otimes \mathbf{e}_i & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 1} \\ v_i \mathbf{v} \otimes \mathbf{u} + \mathbf{e}_i \otimes rT & \rho (v_i \mathbb{I} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{e}_i) & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & nR \mathbf{e}_i \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & -\frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & \mathbf{R}(\mathbf{e}_i) & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ v_i \mathbf{h}^{\text{totT}} & \rho (v_i \mathbf{v} + h^{\text{tot}} \mathbf{e}_i)^T & -\frac{1}{\mu_0} (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{B})^T & \frac{1}{\mu_0} (\mathbf{e}_i \wedge \mathbf{E})^T & v_i \rho c_p \end{bmatrix}, \quad (\text{II.43})$$

où l'on a utilisé $\rho c_p = \rho c_v + R \sum_{k \in S} \rho_k / m_k$, $\mathbf{r} = (r_1, \dots, r_{n^s})^T$, $\mathbf{h}^f = (h_1^f, \dots, h_{n^s}^f)^T$ et $h_k^f = e_k^f + r_k T$, $k \in S$.

En utilisant la régularité des matrices $\widehat{\mathbf{A}}_i$, $\widehat{\mathbf{A}}_i^{e,\Omega}$, $i \in C$, $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in C$, et la matrice $\partial_U \mathbf{Z}$, on obtient immédiatement que les matrices $\mathbf{A}_i(\mathbf{U})$, $\mathbf{A}_i^{e,\Omega}(\mathbf{U})$, $i \in C$, $\mathbf{B}_{ij}(\mathbf{U})$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$. La régularité des matrices $\partial_U \mathbf{F}_{ij}^e$, $i, j \in C$, et $\mathbf{A}_i^{e,\Omega}$, $i \in C$, implique alors que les matrices $\mathbf{A}_i^e(\mathbf{U})$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$. ■

II.4 Existence locale pour un système abstrait

Dans cette section, on étudie la symétrisation partielle et les formes normales partielles pour un système abstrait quasi-linéaire du second ordre. On utilise alors un résultat d'existence dû à Vol'pert et Hudjaev [VH72] qui s'applique au système correspondant pour en déduire un théorème d'existence locale.

II.4.1 Symétrisation partielle et entropie partielle

Les formes symétrisées sont un outil fondamental pour l'obtention de résultats d'existence pour les systèmes d'équations aux dérivées partielles, en particulier pour les systèmes hyperboliques-paraboliques [VH72, KS88, Kaw84]. Dans le cadre des systèmes hyperboliques-paraboliques isotropes, l'existence d'une formulation symétrique conservative est équivalente à l'existence d'une entropie mathématique [God62, Gio99, Moc80].

Dans cette section, on généralise la notion de symétrisation pour les systèmes hyperboliques-paraboliques, dans le but d'inclure des flux convectifs possédant des propriétés de symétrie plus faibles. On introduit deux notions, la symétrisation partielle et l'entropie mathématique partielle, puis on démontre un théorème d'équivalence entre la symétrisabilité partielle d'un système et l'existence d'une entropie mathématique partielle.

On considère un système quasi-linéaire abstrait du second ordre de la forme

$$\partial_t \mathbf{U}^* + \sum_{i \in C^*} [\partial_U \mathbf{F}_i^*(\mathbf{U}^*) + \mathbf{A}_i^{*e}(\mathbf{U}^*)] \partial_i \mathbf{U}^* = \sum_{i,j \in C^*} \partial_i [\mathbf{B}_{ij}^*(\mathbf{U}^*) \partial_j \mathbf{U}^*] + \Omega^*(\mathbf{U}^*), \quad (\text{II.44})$$

où $U^* \in \mathcal{O}_{U^*}$, $\mathcal{O}_{U^*}$ est un ouvert de $\mathbb{R}^{n^*}$ et $C^* = \{1, \dots, d\}$ représente les indices des directions de $\mathbb{R}^d$. L'exposant $*$ est utilisé pour distinguer le système du second ordre abstrait (II.44) de taille n^* dans $\mathbb{R}^d$ du système particulier des mélanges réactifs ionisés et magnétisés (II.33) de taille n^s+4 dans $\mathbb{R}^3$. Toutes les quantités associées à ce système abstrait ont un exposant $*$, comme par exemple le vecteur inconnu U^* . On suppose que les propriétés suivantes sont satisfaites par le système (II.44).

(Edp₁) *Les flux de convection F_i^* , $i \in C^*$, les matrices A_i^{*e} , $i \in C^*$, les matrices de dissipation B_{ij}^* , $i, j \in C^*$, et le terme source Ω^* sont des fonctions régulières de la variable $U^* \in \mathcal{O}_{U^*}$.*

On introduit à présent la définition d'une forme partiellement symétrique pour le système (II.44) qui généralise la notion de forme symétrique conservative donnée par Kawashima et Shizuta [KS88].

Définition II.1

Soit $V^* \mapsto U^*$ un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme d'un ouvert $\mathcal{O}_{V^*}$ dans un ouvert $\mathcal{O}_{U^*}$. On considère le système écrit dans la variable V^*

$$\tilde{A}_0^*(V^*) \partial_t V^* + \sum_{i \in C^*} \left[\tilde{A}_i^*(V^*) + \tilde{A}_i^{*e}(V^*) \right] \partial_i V^* = \sum_{i, j \in C^*} \partial_i \left[\tilde{B}_{ij}^*(V^*) \partial_j V^* \right] + \tilde{\Omega}^*(V^*), \quad (\text{II.45})$$

où

$$\begin{cases} \tilde{A}_0^* = \partial_{V^*} U^*, & \tilde{B}_{ij}^* = B_{ij}^* \partial_{V^*} U^*, \\ \tilde{A}_i^{*e} = A_i^{*e} \partial_{V^*} U^*, & \tilde{A}_i^* = A_i^* \partial_{V^*} U^* = \partial_{V^*} F_i^*, \\ \tilde{\Omega}^* = \Omega^*. \end{cases} \quad (\text{II.46})$$

Le système (II.45) est dit sous forme **partiellement symétrique** si les matrices $\tilde{A}_0^*$, $\tilde{A}_i^*$, $i \in C^*$, $\tilde{B}_{ij}^*$, $i, j \in C^*$, vérifient les propriétés suivantes (S₁-S₃).

(S₁) *La matrice $\tilde{A}_0^*(V^*)$ est symétrique définie positive pour $V^* \in \mathcal{O}_{V^*}$.*

(S₂) *Les matrices $\tilde{A}_i^*(V^*)$, $i \in C^*$, sont symétriques pour $V^* \in \mathcal{O}_{V^*}$.*

(S₃) *La matrice $\tilde{B}^*(V^*, \xi) = \sum_{i, j \in C^*} \tilde{B}_{ij}^*(V^*) \xi_i \xi_j$, $\xi \in \Sigma^{d-1}$, où Σ^{d-1} est la sphère unité en dimension d , vérifie, $X^T \tilde{B}^*(V^*, \xi) X \geq 0$, pour $X \in \mathbb{R}^{n^*}$, $V^* \in \mathcal{O}_{V^*}$ and $\xi \in \Sigma^{d-1}$.*

Les propriétés (S_1 - S_2) sont identiques à celles des mélanges neutres. La propriété (S_3) est une généralisation des propriétés concernant les matrices de dissipation pour les gaz neutres. La matrice $\tilde{B}^*$ n'est pas symétrique dans le cas général mais sa partie symétrique est définie positive. De plus, on ne fait pas d'hypothèse sur les matrices A_i^{*e} , $i \in C^*$.

On introduit alors la définition d'une entropie mathématique partielle qui est adaptée de la définition d'entropie mathématique proposée par Kawashima et Shizuta [Kaw84, KS88].

Définition II.2

Soit $\sigma^*(U^*)$ une fonction C^∞ définie sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_{U^*}$ à valeurs dans $\mathbb{R}$, σ^* est une **fonction entropie partielle** pour le système (II.44) si les propriétés (E_1 - E_3) sont vérifiées.

(E₁) La fonction σ^* est une fonction strictement convexe de $U^* \in \mathcal{O}_{U^*}$ au sens où la matrice Hessienne est définie positive sur $\mathcal{O}_{U^*}$.

(E₂) Il existe des fonctions réelles C^∞ $q_i^*(U^*)$ telles que

$$(\partial_{U^*} \sigma^*) A_i^* = \partial_{U^*} q_i^*, \quad i \in C^*, \quad U^* \in \mathcal{O}_{U^*}.$$

(E₃) La matrice $\tilde{B}^*(U^*, \xi) = \sum_{i,j \in C^*} B_{ij}^*(U^*) (\partial_{U^*}^2 \sigma^*(U^*))^{-1} \xi_i \xi_j$, $\xi \in \Sigma^{d-1}$, satisfait $X^T \tilde{B}^*(U^*, \xi) X \geq 0$, pour $X \in \mathbb{R}^{n^*}$, $U^* \in \mathcal{O}_{U^*}$ et $\xi \in \Sigma^{d-1}$.

On établit à présent le théorème d'équivalence entre la symétrisabilité partielle et l'existence d'une fonction entropie partielle pour le système (II.44).

Théorème II.3

Le système (II.44) peut être partiellement symétrisé au sens de la définition II.1 sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_{U^*}$ si, et seulement si, le système admet une fonction entropie partielle σ^* sur $\mathcal{O}_{U^*}$ au sens de la définition II.2. Dans ce cas, la variable qui symétrise partiellement le système V^* s'exprime en fonction du gradient de la fonction entropie partielle $V^* = (\partial_{U^*} \sigma^*)^T$.

Preuve - II.3 -

On suppose dans un premier temps qu'il existe une fonction entropie partielle σ^* définie sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_{U^*}$ et on définit la variable $V^* = (\partial_{U^*} \sigma^*)^T$. L'application $U^* \mapsto V^*$ est alors un C^∞ difféomorphisme car $\mathcal{O}_{U^*}$ est convexe et la matrice

Jacobienne $\partial_{U^*} V^* = \partial_{U^*}^2 \sigma^*$ est symétrique définie positive. On peut alors définir les fonctions régulières suivantes

$$\hat{\sigma}^*(V^*) = U^{*T} V^* - \sigma^*(U^*) \quad \text{et} \quad \hat{q}_i^*(V^*) = F_i^*(U^*)^T V^* - q_i^*(U^*), \quad i \in C^*.$$

En différenciant ces égalités selon la variable V^* , on obtient directement les relations $(\partial_{V^*} \hat{\sigma}^*)^T = U^*$ et $(\partial_{V^*} \hat{q}_i^*)^T = F_i^*$, $i \in C^*$, grâce à la propriété (E₂). L'utilisation des propriétés (E₁-E₂) permet alors de montrer que $\tilde{A}_0^* = \partial_{V^*} U^* = (\partial_{U^*} V^*)^{-1} = (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^{-1}$ et $\tilde{A}_i^* = \partial_{V^*} F_i^* = \partial_{V^*}^2 \hat{q}_i^*$, $i \in C^*$, la matrice $\tilde{A}_0^*$ est ainsi symétrique définie positive et les matrices $\tilde{A}_i^*$, $i \in C^*$, sont symétriques. De plus, on déduit directement de la propriété (E₃) que les matrices $\tilde{B}_{ij}^* = B_{ij}^* (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^{-1}$, $i, j \in C^*$, sont telles que la propriété (S₃) est vérifiée.

Réciproquement, on suppose que le système est symétrisable au sens de la définition II.1. Comme les matrices $\partial_{V^*} U^*$ et $\partial_{V^*} F_i^*$, $i \in C^*$, sont symétriques et que $\mathcal{O}_{V^*}$ est simplement connexe, il existe des fonctions $\hat{\sigma}^*$ et $\hat{q}_i^*$, $i \in C^*$, définies sur $\mathcal{O}_{V^*}$, telles que $(\partial_{V^*} \hat{\sigma}^*)^T = U^*$, $(\partial_{V^*} \hat{q}_i^*)^T = F_i^*$, $i \in C^*$. On peut alors définir les fonctions

$$\sigma^*(U^*) = U^{*T} V^* - \hat{\sigma}^*(V^*) \quad \text{et} \quad q_i^*(U^*) = F_i^{*T} V^* - \hat{q}_i^*(V^*), \quad i \in C^*.$$

En différenciant ces relations et en utilisant les propriétés (S₁-S₃), on établit facilement que σ^* est une fonction entropie, que q_i^* , $i \in C^*$, sont les flux associés et que l'on a $V^* = (\partial_{U^*} \sigma^*)^T$. ■

II.4.2 Formes normales partielles

Dans cette section, on étudie les formes normales partielles pour le système abstrait (II.44). On supposera que ce système satisfait la propriété (Edp₂).

(Edp₂) *Le système (II.44) admet une fonction entropie partielle σ^* sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_{U^*}$.*

On introduit alors la variable $V^* = (\partial_{U^*} \sigma^*)^T$, le système écrit en cette variable est partiellement symétrique d'après le théorème II.3, c'est-à-dire qu'il vérifie les propriétés (S₁-S₃). En introduisant une nouvelle variable W^* , associée à un difféomorphisme d'un ouvert $\mathcal{O}_{W^*}$ dans $\mathcal{O}_{V^*}$, et en multipliant le système partiellement symétrique (II.45) à gauche par la transposée de la matrice $\partial_{W^*} V^*$, on obtient un nouveau système en la variable W^* . On donne à présent la définition d'une forme partiellement normale.

Définition II.3

On considère un système sous forme partiellement symétrique, au sens de la définition II.1, et un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme $W^* \mapsto V^*$ de l'ouvert $\mathcal{O}_{W^*}$ sur l'ouvert $\mathcal{O}_{V^*}$. Le système en la nouvelle variable W^* s'écrit

$$\begin{aligned} \bar{A}_0^*(W^*) \partial_t W^* + \sum_{i \in C^*} \left(\bar{A}_i^*(W^*) + \bar{A}_i^{*e}(W^*) \right) \partial_i W^* = \sum_{i,j \in C^*} \partial_i \left(\bar{B}_{ij}^*(W^*) \partial_j W^* \right) \\ + \bar{T}^*(W^*, \partial_x W^*) + \bar{\Omega}^*(W^*), \quad (\text{II.47}) \end{aligned}$$

où les coefficients matriciels et vectoriels s'écrivent

$$\begin{cases} \bar{A}_0^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{A}_0^* (\partial_{W^*} V^*), & \bar{B}_{ij}^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{B}_{ij}^* (\partial_{W^*} V^*), \\ \bar{A}_i^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{A}_i^* (\partial_{W^*} V^*), & \bar{\Omega}^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{\Omega}^*, \\ \bar{A}_i^{*e} = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{A}_i^{*e} (\partial_{W^*} V^*), & \bar{T}^* = - \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{B}_{ij}^* (\partial_{W^*} V^*) \partial_j W^*, \end{cases} \quad (\text{II.48})$$

et satisfont les propriétés $(\bar{S}_1\text{--}\bar{S}_3)$.

($\bar{S}_1$) La matrice $\bar{A}_0^*(W^*)$ est symétrique définie positive pour $W^* \in \mathcal{O}_{W^*}$.

($\bar{S}_2$) Les matrices $\bar{A}_i^*(W^*)$, $i \in C^*$, sont symétriques pour $W^* \in \mathcal{O}_{W^*}$.

($\bar{S}_3$) La matrice $\bar{B}^*(W^*, \xi) = \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^*(W^*) \xi_i \xi_j$, $\xi \in \Sigma^{d-1}$, satisfait $X^T \bar{B}^*(W^*, \xi) X \geq 0$, pour $X \in \mathbb{R}^{n^*}$, $W^* \in \mathcal{O}_{W^*}$ et $\xi \in \Sigma^{d-1}$.

Le système (II.47) est dit sous forme **normale partielle** s'il existe une partition de $\{1, \dots, n^*\}$ en $I = \{1, \dots, n_0^*\}$ et $II = \{n_0^*+1, \dots, n^*\}$, telle que les propriétés $(\text{Nor}_1\text{--}\text{Nor}_3)$ sont vérifiées.

(Nor₁) Les matrices $\bar{A}_0^*$, $\bar{A}_i^{*e}$, $i \in C^*$, et $\bar{B}_{ij}^*$, $i, j \in C^*$, ont la structure bloc

$$\bar{A}_0^* = \begin{pmatrix} \bar{A}_0^{*I,I} & 0 \\ 0 & \bar{A}_0^{*II,II} \end{pmatrix}, \quad \bar{A}_i^{*e} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{A}_i^{*eI,II} \\ \bar{A}_i^{*eII,I} & \bar{A}_i^{*eII,II} \end{pmatrix}, \quad \bar{B}_{ij}^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \bar{B}_{ij}^{*II,II} \end{pmatrix}.$$

(Nor₂) La matrice $\bar{B}^{*II,II}(W^*, \xi) = \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^{*II,II}(W^*) \xi_i \xi_j$, $\xi \in \Sigma^{d-1}$ satisfait $X^T \bar{B}^{*II,II}(W^*, \xi) X > 0$, pour $X \in \mathbb{R}^{n^*-n_0^*}$, $X \neq 0$, $W^* \in \mathcal{O}_{W^*}$ et $\xi \in \Sigma^{d-1}$.

(Nor₃) En notant $\partial_x = (\partial_1, \dots, \partial_d)^T$, on a

$$\bar{T}^*(W^*, \partial_x W^*) = \left(\bar{T}_I^*(W^*, \partial_x W_{II}^*)^T, \bar{T}_{II}^*(W^*, \partial_x W^*)^T \right)^T.$$

On a utilisé la structure bloc vectorielle et matricielle induite par la partition de $\{1, \dots, n^*\}$ en $I = \{1, \dots, n_0^*\}$ et $II = \{n_0^*+1, \dots, n^*\}$. On a par exemple $W^* = (W_I^{*T}, W_{II}^{*T})^T$.

On remarque que l'on a introduit une propriété supplémentaire par rapport à la définition d'une forme normale. Elle concerne les matrices $\bar{A}_i^{*e}$, $i \in C^*$, qui sont nulles lorsque le mélange gazeux n'est pas chargé. D'après la propriété (Nor₁), les blocs supérieurs gauches $\bar{A}_i^{*eI}$ sont nuls.

On introduit à présent deux propriétés, la propriété d'invariance des noyaux et celle de consistance des noyaux, qui généralisent la propriété d'invariance des noyaux pour le système des gaz neutres [KS88, Gio99]. La combinaison de ces deux propriétés est une condition suffisante pour que le système (II.45) puisse être mis sous une forme normale partielle.

(Edp₃) (Invariance des noyaux) *Le noyau de la partie symétrique de la matrice*

$$\tilde{B}^*(V^*, \xi) = \sum_{i,j \in C^*} \tilde{B}_{ij}^*(V^*) \xi_i \xi_j,$$

noté $N(\tilde{B}^)$, ne dépend ni de $V^* \in \mathcal{O}_{V^*}$, ni de $\xi \in \Sigma^{d-1}$. On notera n_0^* sa dimension.*

(Edp₄) (Consistance des noyaux) *En notant $N(\tilde{B}^*)$ le noyau de la partie symétrique de la matrice $\tilde{B}^*(V^*, \xi)$, on a les relations*

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{ij}^*(V^*) N(\tilde{B}^*) &= \tilde{B}_{ij}^{*T}(V^*) N(\tilde{B}^*) = 0, \quad i, j \in C^*, \\ N(\tilde{B}^*)^T \tilde{A}_i^{*e}(V^*) N(\tilde{B}^*) &= 0, \quad i \in C^*, \end{aligned}$$

c'est-à-dire $\tilde{B}_{ij}^(V^*)X = 0$, $X^T \tilde{B}_{ij}^*(V^*) = 0$, $i, j \in C^*$, pour $X \in N(\tilde{B}^*)$ et $Y^T \tilde{A}_i^{*e}(V^*)X = 0$, $i \in C^*$, pour $X, Y \in N(\tilde{B}^*)$.*

On distingue ici les deux propriétés d'invariance et de consistance des noyaux, ce qui n'est pas fait habituellement lorsque le mélange gazeux n'est pas ionisé. La propriété d'invariance des noyaux est identique à celle des mélanges non ionisés. En revanche, la propriété de consistance des noyaux est plus générale. Comme les matrices $\tilde{B}_{ij}^*$ n'ont pas de propriété de symétrie, le noyau $N(\tilde{B}^*)$ doit annuler les matrices $\tilde{B}_{ij}^*$ ainsi que leur transposées. De plus, la propriété concernant les matrices $\tilde{A}_i^{*e}$, $i \in C^*$, permet exactement d'annuler les blocs supérieurs gauches $\bar{A}_i^{*eI}$, $i \in C^*$, pour que la propriété (Nor₁) soit satisfaite.

Dans la suite de cette section, on supposera que ces deux propriétés sont vérifiées par le système (II.45). Dans le but de caractériser plus facilement les formes normales partielles pour les systèmes partiellement symétriques vérifiant les propriétés d'invariance et de consistance des noyaux, on introduit des variables auxiliaires $U^{*'} et $V^{*'}$, dépendant linéairement de U^* et de V^* respectivement. Les matrices de dissipation correspondant à ces nouvelles variables auxiliaires n'ont de coefficients non nuls que dans le bloc inférieur droit de taille $n^* - n_0^*$ et de plus, les coefficients du bloc supérieur gauche de taille n_0^* des matrices $\tilde{A}_i^{*e'}$, $i \in C^*$, sont nuls. Les formes normales partielles sont alors toutes obtenues de façon équivalente—et plus facilement—à partir de l'équation partiellement symétrique en $V^{*'}$.$

Lemme II.4

On considère le système (II.45) qui est partiellement symétrique au sens de la définition II.1 d'après la propriété (Edp₁) et on note σ^* la fonction entropie partielle associée et $V^* = \partial_{U^*} \sigma^{*T}$, la variable symétrisante. On suppose également que les propriétés d'invariance et de consistance des noyaux (Edp₃-Edp₄) sont satisfaites sur l'ouvert $\mathcal{O}_{V^*}$. On considère par ailleurs une matrice inversible constante de taille n^* notée P^* telle que ses n_0^* premières colonnes engendrent le noyau constant $N(\tilde{B}^*)$. Alors la variable auxiliaire $U^{*' = P^{*T}U^*$ satisfait l'équation

$$\partial_t U^{*' + \sum_{i \in C^*} (A_i^{*' + A_i^{*e'}}) \partial_i U^{*' = \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (B_{ij}^{*' \partial_j U^{*' + \Omega^{*' , \quad (II.49)}$$

où

$$\begin{cases} A_i^{*' = P^{*T} A_i^* (P^{*T})^{-1}, & A_i^{*e'} = P^{*T} A_i^{*e} (P^{*T})^{-1}, \\ B_{ij}^{*' = P^{*T} B_{ij}^* (P^{*T})^{-1}, & \Omega^{*' = P^{*T} \Omega^*. \end{cases} \quad (II.50)$$

La fonction entropie partielle correspondante est alors la fonctionnelle $\sigma^{*'}(U^{*'}) = \sigma^*((P^{*T})^{-1}U^{*'})$, et la variable entropique partielle associée $V^{*' = (\partial_{U^{*'}} \sigma^{*'})^T$ est donnée par $V^{*' = P^{*-1}V^*$ et vérifie l'équation

$$\tilde{A}_0^{*'} \partial_t V^{*' + \sum_{i \in C^*} (\tilde{A}_i^{*' + \tilde{A}_i^{*e'}}) \partial_i V^{*' = \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (\tilde{B}_{ij}^{*' \partial_j V^{*' + \tilde{\Omega}^{*' , \quad (II.51)}$$

où

$$\begin{cases} \tilde{A}_0^{*' = P^{*T} \tilde{A}_0^* P^*, & \tilde{A}_i^{*' = P^{*T} \tilde{A}_i^* P^*, & \tilde{A}_i^{*e'} = P^{*T} \tilde{A}_i^{*e} P^*, \\ \tilde{B}_{ij}^{*' = P^{*T} \tilde{B}_{ij}^* P^*, & \tilde{\Omega}^{*' = P^{*T} \tilde{\Omega}^*. \end{cases}$$

En particulier, les matrices $\tilde{A}_i^{*e'}$, $i \in C^*$, et les matrices $\tilde{B}_{ij}^{*'}$, $i, j \in C^*$, sont de la forme

$$\tilde{A}_i^{*e'} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{A}_i^{*e/\Pi, \Pi} \\ \tilde{A}_i^{*e/\Pi, I} & \tilde{A}_i^{*e/\Pi, \Pi} \end{pmatrix}, \quad \tilde{B}_{ij}^{*' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tilde{B}_{ij}^{*/\Pi, \Pi} \end{pmatrix}, \quad (II.52)$$

et la matrice $\tilde{\mathbf{B}}^{*\Pi,\Pi}(\mathbf{V}^*, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{i,j \in C^*} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{*\Pi,\Pi}(\mathbf{V}^*) \xi_i \xi_j$, $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^{d-1}$, satisfait la relation $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{*\Pi,\Pi}(\mathbf{V}^*, \boldsymbol{\xi}) \mathbf{X} > 0$, pour $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n^* - n_0^*}$, $\mathbf{X} \neq 0$, $\mathbf{V}^* \in \mathcal{O}_{\mathbf{V}^*}$ et $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^{d-1}$. Finalement la forme normale partielle (II.47) est obtenue de façon équivalente en multipliant l'équation en la variable $\mathbf{V}^*$ (II.45) par $(\partial_{\mathbf{W}^*} \mathbf{V}^*)^T$ ou l'équation en la variable $\mathbf{V}^*$ (II.51) par $(\partial_{\mathbf{W}^*} \mathbf{V}^*)^T$.

Preuve - II.4 -

L'équation (II.49) est aisément obtenue en multipliant à gauche l'équation (II.44) par $\mathbf{P}^{*T}$, ce qui donne les relations matricielles (II.50). Il est alors immédiat que la fonctionnelle $\sigma^*(\mathbf{U}^*) = \sigma^*((\mathbf{P}^{*T})^{-1} \mathbf{U}^*)$ est l'entropie partielle correspondant à la nouvelle variable $\mathbf{U}^*$. A partir de la définition $\mathbf{V}^* = (\partial_{\mathbf{U}^*} \sigma^*)^T$ et de la formule de la chaîne, on établit ensuite que $\mathbf{V}^* = \mathbf{P}^{*-1} \mathbf{V}^*$ et l'équation (II.51) est obtenue comme lors du passage de l'équation (II.44) à l'équation (II.45). Comme $\tilde{\mathbf{B}}^* = \mathbf{P}^{*T} \tilde{\mathbf{B}}^* \mathbf{P}^*$ et que les n_0^* premières colonnes de $\mathbf{P}^*$ engendrent le noyau $N(\tilde{\mathbf{B}}^*)$, on en déduit que $\tilde{\mathbf{B}}^*$ est de la forme

$$\tilde{\mathbf{B}}^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\mathbf{B}}^{*\Pi,\Pi} \end{pmatrix},$$

et de façon similaire, toutes les matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^*$, $i, j \in C^*$, et $\tilde{\mathbf{A}}_i^{*e'}$, $i \in C^*$, sont également de la forme (II.52). De plus, la matrice $\tilde{\mathbf{B}}^{*\Pi,\Pi}(\mathbf{V}^*, \boldsymbol{\xi})$, vérifie $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{*\Pi,\Pi}(\mathbf{V}^*, \boldsymbol{\xi}) \mathbf{X} > 0$, pour $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n^* - n_0^*}$, $\mathbf{X} \neq 0$, $\mathbf{V}^* \in \mathcal{O}_{\mathbf{V}^*}$ et $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^{d-1}$, car les $n^* - n_0^*$ dernières colonnes de $\mathbf{P}^*$ engendrent un sous-espace supplémentaire de $N(\tilde{\mathbf{B}}^*)$. ■

Dans le théorème suivant, on caractérise complètement les formes normales partielles pour les systèmes partiellement symétrisables vérifiant les propriétés d'invariance et de consistance des noyaux en fonction des variables auxiliaires $\mathbf{U}^*$ et $\mathbf{V}^*$.

Théorème II.5

En conservant les hypothèses et les notations du lemme II.4, toute forme normale partielle du système (II.45) est donnée par un changement de variables de la forme

$$\mathbf{W}^* = (\psi_I(\mathbf{U}_I^*), \phi_{II}(\mathbf{V}_{II}^*))^T, \quad (\text{II.53})$$

où ψ_I et ϕ_{II} sont deux difféomorphismes de $\mathbb{R}^{n_0^*}$ et $\mathbb{R}^{n^* - n_0^*}$, respectivement. De plus, on a

$$\overline{\mathcal{T}}^*(\mathbf{W}^*, \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{W}^*) = \left(0, \overline{\mathcal{T}}_{II}^*(\mathbf{W}^*, \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{W}_{II}^*)\right)^T.$$

Preuve - II.5 -

La preuve est exactement la même que celle de [Gio99] pour les mélanges gazeux neutres, avec les mêmes notations. On doit seulement étudier les matrices $\bar{A}_i^{*e}$, $i \in C^*$, qui sont nulles pour les gaz neutres, mais le traitement est identique à celui des matrices $\bar{B}_{ij}^*$, $i, j \in C^*$, en utilisant la structure blocs (II.52). ■

II.4.3 Un théorème d'existence dans $V_l(\mathbb{R}^d)$

Le système quasilinéaire abstrait d'équations aux dérivées partielles du second ordre (II.44) récrit sous la forme normale partielle (II.47) peut se décomposer en deux sous-systèmes quasilinéaires couplés, le premier hyperbolique en la variable W_I^* et le second fortement parabolique en la variable W_{II} .

$$\begin{cases} \bar{A}_0^{*I,I} \partial_t W_I^* = - \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,I} \partial_i W_I^* + \bar{\Gamma}_I^*, \\ \bar{A}_0^{*II,II} \partial_t W_{II}^* = - \sum_{i \in C^*} (\bar{A}_i^{*II,I} + \bar{A}_i^{*eII,I}) \partial_i W_I^* + \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (\bar{B}_{ij}^{*II,II} \partial_j W_{II}^*) + \bar{\Gamma}_{II}^*, \end{cases} \quad (II.54)$$

avec

$$\bar{\Gamma}_I^* = \bar{\Omega}_I^* - \sum_{i \in C^*} (\bar{A}_i^{*eI,I} + \bar{A}_i^{*I,I}) \partial_i W_{II}^*, \quad \bar{\Gamma}_{II}^* = \bar{\Omega}_{II}^* + \bar{\mathcal{T}}_{II}^* - \sum_{i \in C^*} (\bar{A}_i^{*eII,II} + \bar{A}_i^{*II,II}) \partial_i W_{II}^*.$$

On considère alors le problème de Cauchy constitué du système (II.54) et la condition initiale

$$W_I^*(0, \mathbf{x}) = W_I^{*0}(\mathbf{x}), \quad W_{II}^*(0, \mathbf{x}) = W_{II}^{*0}(\mathbf{x}). \quad (II.55)$$

Ces équations sont considérées dans le domaine $\bar{Q}_\Theta$ où Θ est strictement positif et $Q_t = (0, t) \times \mathbb{R}^d$, pour $t > 0$. Les inconnues vectorielles W_I^* et W_{II}^* sont recherchées dans les ouverts convexes $\mathcal{O}_{W_I^*} \subset \mathbb{R}^{n_0^*}$ et $\mathcal{O}_{W_{II}^*} \subset \mathbb{R}^{n^* - n_0^*}$.

On utilisera les espaces fonctionnels de Lebesgue $L^p(\mathbb{R}^d)$ dont la norme s'écrit

$$\begin{aligned} \|\phi\|_{0,p} &= \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\phi(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} \right)^{1/p}, \quad \text{si } 1 \leq p < \infty, \\ \|\phi\|_{0,\infty} &= \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} |\phi(\mathbf{x})|, \end{aligned}$$

les espaces de Sobolev $W_p^l(\mathbb{R}^d)$, $1 \leq p \leq \infty$, avec la norme

$$\|\phi\|_{l,p} = \sum_{k \in \llbracket 0, l \rrbracket} |\phi|_{k,p}, \quad |\phi|_{k,p} = \sum_{|\beta|=k} \|\partial^\beta \phi\|_{0,p},$$

et les espaces de Vol’pert $V_l(\mathbb{R}^d)$ avec la norme [VH72]

$$\|\phi\|_l = |\phi|_{0,\infty} + \sum_{k \in \llbracket 1, l \rrbracket} |\phi|_{k,2}.$$

On étend ces définitions aux fonctions vectorielles en utilisant la structure euclidienne de $\mathbb{R}^d$. Grâce aux inégalités de Sobolev, on a une inclusion des espaces $W_2^l(\mathbb{R}^d)$ dans l’espace $W_\infty^k(\mathbb{R}^d)$ pour $l > k + d/2$, et par conséquent une inclusion des espaces $W_2^l(\mathbb{R}^d)$ dans l’espace de Vol’pert $V_l(\mathbb{R}^d)$ pour $l > d/2$. Dans la suite, on notera $\mathcal{L}$ une fonction quelconque strictement positive et convexe définie sur l’ouvert convexe $\mathcal{O}_{W^*} = \mathcal{O}_{W_I^*} \times \mathcal{O}_{W_{II}^*}$, qui croît vers l’infini lorsque W^* tend vers un point du bord fini de $\mathcal{O}_{W^*}$.

Le théorème suivant dû à Vol’pert et Hudjaev [VH72] montre qu’il existe une solution dans un certain domaine qui préserve la régularité de la condition initiale.

Théorème II.6

On suppose que le système (II.54)-(II.55) vérifie les hypothèses suivantes, où l représente un entier tel que $l > d/2 + 3$.

- (Ex₁) *Les conditions initiales W_I^{*0} et W_{II}^{*0} vérifient $\sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} \mathcal{L}(W_I^{*0}(\mathbf{x}), W_{II}^{*0}(\mathbf{x})) < +\infty$ et W_I^{*0} et W_{II}^{*0} sont dans l’espace $V_l(\mathbb{R}^d)$.*
- (Ex₂) *Les coefficients matriciels $\bar{A}_0^{*I,I}$, $\bar{A}_0^{*II,II}$, $\bar{B}_{ij}^{*II,II}$, $i, j \in C^*$, ne dépendent que de W_I^* et de W_{II}^* . Les coefficients matriciels $\bar{A}_i^{*I,I}$, $\bar{A}_i^{*II,I}$, $\bar{A}_i^{*eII,I}$, $i \in C^*$, et les coefficients vectoriels $\bar{\Gamma}_I^*$, $\bar{\Gamma}_{II}^*$, dépendent de W_I^* , W_{II}^* et de $\partial_{\mathbf{x}} W_{II}^*$.*
- (Ex₃) *Les coefficients matriciels $\bar{A}_0^{*I,I}(w_I, w_{II})$, $\bar{A}_0^{*II,II}(w_I, w_{II})$ et $\bar{B}_{ij}^{*II,II}(w_I, w_{II})$, $i, j \in C^*$, ont des dérivées jusqu’à l’ordre l continues par rapport aux variables $w_I \in \mathcal{O}_{W_I^*}$ et $w_{II} \in \mathcal{O}_{W_{II}^*}$.*
- (Ex₄) *Les coefficients matriciels $\bar{A}_i^{*I,I}(w_I, w_{II}, \xi)$, $\bar{A}_i^{*II,I}(w_I, w_{II}, \xi)$, $\bar{A}_i^{*eII,I}(w_I, w_{II}, \xi)$, $i \in C^*$, et les coefficients vectoriels $\bar{\Gamma}_I^*(w_I, w_{II}, \xi)$ et $\bar{\Gamma}_{II}^*(w_I, w_{II}, \xi)$ ont des dérivées jusqu’à l’ordre l continues par rapport aux variables $w_I \in \mathcal{O}_{W_I^*}$, $w_{II} \in \mathcal{O}_{W_{II}^*}$ et $\xi \in \mathbb{R}^{d \times (n^* - n_0^*)}$.*

- (Ex₅) Les coefficients matriciels $\bar{A}_0^{*I,I}(w_I, w_{II})$ et $\bar{A}_0^{*II,II}(w_I, w_{II})$ sont symétriques et définis positifs pour $w_I \in \mathcal{O}_{W_I^*}$ et $w_{II} \in \mathcal{O}_{W_{II}^*}$.
- (Ex₆) Les coefficients matriciels $\bar{A}_i^{*1,I}(w_I, w_{II}, \xi)$, $i \in C^*$, sont symétriques pour $w_I \in \mathcal{O}_{W_I^*}$, $w_{II} \in \mathcal{O}_{W_{II}^*}$ et $\xi \in \mathbb{R}^{d \times (n^* - n_0^*)}$.
- (Ex₇) Les coefficients matriciels $\bar{A}_0^{*1,I}(w_I, w_{II})$, $\bar{A}_0^{*II,II}(w_I, w_{II})$ et les coefficients vectoriels $\bar{\Gamma}_I^*(w_I, w_{II}, 0)$ et $\bar{\Gamma}_{II}^*(w_I, w_{II}, 0)$ ont des dérivées jusqu'à l'ordre $l+3$ continues en les variables $w_I \in \mathcal{O}_{W_I^*}$ et $w_{II} \in \mathcal{O}_{W_{II}^*}$.
- (Ex₈) Pour tout ensemble compact K de $\mathcal{O}_{W^*} = \mathcal{O}_{W_I^*} \times \mathcal{O}_{W_{II}^*}$, il existe $\alpha > 0$ tel que pour toute fonction régulière $w = (w_I, w_{II})$ de $\mathbb{R}^d$ dans $\mathbb{R}^{n^*}$ à valeur dans K , on a

$$\int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i,j \in C^*} (\partial_i \phi_{II})^T \bar{B}_{ij}^{*II,II}(w(\mathbf{x})) (\partial_j \phi_{II}) \, d\mathbf{x} \geq \alpha \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i \in C^*} (\partial_i \phi_{II})^T (\partial_i \phi_{II}) \, d\mathbf{x}, \quad (\text{II.56})$$

où ϕ_{II} est une fonction quelconque de $W_2^1(\mathbb{R}^d)$ à $n^* - n_0^*$ composantes.

Alors il existe t_0 , $0 < t_0 \leq \Theta$, tel que le problème de Cauchy (II.54), (II.55), admet une unique solution $(W_I^{*T}, W_{II}^{*T})^T$ définie sur $\bar{Q}_{t_0} = [0, t_0] \times \mathbb{R}^d$, qui est continue ainsi que ses dérivées du premier ordre en t et du second ordre en $\mathbf{x}$ et pour laquelle les quantités suivantes restent finies

$$\sup_{0 \leq t \leq t_0} \|(W_I^*(t), W_{II}^*(t))\|_l, \quad \sup_{\bar{Q}_{t_0}} \mathcal{L}(W_I^*, W_{II}^*), \quad (\text{II.57})$$

$$\sup_{0 \leq t \leq t_0} \|\partial_t W_I^*(t)\|_{l-1}, \quad \int_0^{t_0} (\|\partial_t W_{II}^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \|W_{II}^*(\tau)\|_{l+1}^2) \, d\tau. \quad (\text{II.58})$$

De plus, deux cas sont possibles : ou bien $t_0 = \Theta$, ou bien il existe t_1 tel que le théorème est vrai pour tout $t_0 < t_1$ et tel que pour $t_0 \rightarrow t_1^-$, au moins une des deux quantités

$$\|W_I^*(t_0)\|_{1,\infty} + \|W_{II}^*(t_0)\|_{2,\infty}, \quad \sup_{\bar{Q}_{t_0}} \mathcal{L}(W_I^*, W_{II}^*), \quad (\text{II.59})$$

croît sans être bornée, c'est-à-dire que la solution peut être étendue aussi longtemps que les quantités (II.59) restent finies.

II.5 Théorème d'existence pour les mélanges multiespèces magnétisés

On applique à présent les résultats de la section II.4 au système d'équations modélisant les mélanges gazeux multiespèces réactifs ionisés et magnétisés. On détermine une forme partiellement symétrique du système en utilisant l'entropie physique, puis une forme partiellement normale et on applique le résultat d'existence locale de la section II.4.

II.5.1 Symétrisation partielle

Pour les mélanges ionisés et magnétisés, l'existence d'une fonction entropie ne fournit qu'une symétrisation partielle pour le système, à cause des termes F_{ij}^e , $i, j \in C$, qui empêchent la symétrisation totale. Cependant, la symétrisation partielle obtenue sera suffisante pour établir l'existence de la solution.

On commence par introduire la fonction entropie partielle σ comme l'opposé de l'entropie physique par unité de volume. Son expression est donnée par

$$\sigma = - \sum_{k \in S} \rho_k s_k = - \frac{1}{T} \sum_{k \in S} \rho_k (h_k - g_k). \quad (\text{II.60})$$

On prouve dans cette partie que la fonction σ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ strictement convexe sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_U$. Il sera alors intéressant et judicieux de considérer l'application $U \mapsto V = (\partial_U \sigma)^T$.

Proposition II.7

La fonction σ définie sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_U$ à valeur dans $\mathbb{R}$ est une fonction strictement convexe, au sens où sa matrice Hessienne $\partial_U^2 \sigma$ est symétrique définie positive.

Preuve - II.7 -

D'après l'hypothèse (Th₁) sur les coefficients $c_{v,k}$, $k \in S$, la fonction σ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$. La différentielle de σ est

$$d\sigma = - \frac{\rho c_v}{T} dT - \sum_{k \in S} (s_k - r_k) d\rho_k,$$

et la différentielle par rapport à la variable naturelle s'écrit donc

$$\partial_Z \sigma = \left(r_1 - s_1, \dots, r_{n^s} - s_{n^s}, 0_{1,3}, 0_{1,3}, 0_{1,3}, -\frac{\rho c_v}{T} \right).$$

On obtient alors $\partial_U \sigma = \partial_Z \sigma \partial_U Z$ et $\partial_U^2 \sigma = \partial_Z (\partial_U \sigma)^T \partial_U Z$,

$$\partial_U \sigma = \frac{1}{T} \left(g_1 - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \dots, g_{n^s} - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \mathbf{v}^T, \varepsilon_0 \mathbf{E}^T, \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^T, -1 \right),$$

$$\partial_U^2 \sigma = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_\ell^r + \frac{v^2 \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}}{\rho T} + \frac{\mathbf{e}^{\text{red}} \otimes \mathbf{e}^{\text{red}}}{\rho c_v T^2} & -\frac{\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}}{\rho T} + \frac{\mathbf{e}^{\text{red}} \otimes \mathbf{v}}{\rho c_v T^2} & \frac{\varepsilon_0 \mathbf{e}^{\text{red}} \otimes \mathbf{E}}{\rho c_v T^2} & \frac{\mathbf{e}^{\text{red}} \otimes \mathbf{B}}{\mu_0 \rho c_v T^2} & -\frac{\mathbf{e}^{\text{red}}}{\rho c_v T^2} \\ -\frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{u}}{\rho T} + \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{e}^{\text{red}}}{\rho c_v T^2} & \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{v}}{\rho c_v T^2} + \frac{\mathbb{I}}{\rho T} & \frac{\varepsilon_0 \mathbf{v} \otimes \mathbf{E}}{\rho c_v T^2} & \frac{\mathbf{v} \otimes \mathbf{B}}{\mu_0 \rho c_v T^2} & -\frac{\mathbf{v}}{\rho c_v T^2} \\ \frac{\varepsilon_0 \mathbf{E} \otimes \mathbf{e}^{\text{red}}}{\rho c_v T^2} & \frac{\varepsilon_0 \mathbf{E} \otimes \mathbf{v}}{\rho c_v T^2} & \frac{\varepsilon_0^2 \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}}{\rho c_v T^2} + \frac{\varepsilon_0 \mathbb{I}_3}{T} & \frac{\varepsilon_0 \mathbf{E} \otimes \mathbf{B}}{\mu_0 \rho c_v T^2} & -\frac{\varepsilon_0 \mathbf{E}}{\rho c_v T^2} \\ \frac{\mathbf{B} \otimes \mathbf{e}^{\text{red}}}{\mu_0 \rho c_v T^2} & \frac{\mathbf{B} \otimes \mathbf{v}}{\mu_0 \rho c_v T^2} & \frac{\varepsilon_0 \mathbf{B} \otimes \mathbf{E}}{\mu_0 \rho c_v T^2} & \frac{\mathbf{B} \otimes \mathbf{B}}{\mu_0^2 \rho c_v T^2} + \frac{\mathbb{I}_3}{\mu_0 T} & -\frac{\mathbf{B}}{\mu_0 \rho c_v T^2} \\ -\frac{\mathbf{e}^{\text{red}T}}{\rho c_v T^2} & -\frac{\mathbf{v}^T}{\rho c_v T^2} & -\frac{\varepsilon_0 \mathbf{E}^T}{\rho c_v T^2} & -\frac{\mathbf{B}^T}{\mu_0 \rho c_v T^2} & \frac{1}{\rho c_v T^2} \end{bmatrix},$$

où l'on a introduit la matrice diagonale $\mathbf{d}_\ell^r = \text{Diag}(r_1/\rho_1, \dots, r_{n^s}/\rho_{n^s})$ et les vecteurs $\mathbf{e}^{\text{red}} = (e_1^{\text{red}}, \dots, e_{n^s}^{\text{red}})^T$, $e_k^{\text{red}} = e_k - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$, $k \in S$.

La matrice $\partial_U^2 \sigma$ est de toute évidence symétrique. On prouve à présent qu'elle est définie positive. Soit $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_\ell^T, \mathbf{x}_v^T, \mathbf{x}_E^T, \mathbf{x}_B^T, \mathbf{x}_T)^T$. Quelques calculs permettent de mettre $\mathbf{X}^T \partial_U^2 \sigma \mathbf{X}$ sous la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^T \partial_U^2 \sigma \mathbf{X} &= \mathbf{x}_\ell^T \mathbf{d}_\ell^r \mathbf{x}_\ell + \frac{\varepsilon_0}{T} \mathbf{x}_E \cdot \mathbf{x}_E + \frac{1}{\mu_0 T} \mathbf{x}_B \cdot \mathbf{x}_B + \frac{1}{\rho T} (\mathbf{x}_v - \mathbf{x}_\ell \cdot \mathbf{u} \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{x}_v - \mathbf{x}_\ell \cdot \mathbf{u} \mathbf{v}) \\ &\quad + \frac{1}{\rho c_v T^2} \left[\mathbf{e}^{\text{red}} \cdot \mathbf{x}_\ell + \mathbf{v} \cdot \mathbf{x}_v + \varepsilon_0 \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}_E + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B} \cdot \mathbf{x}_B - \mathbf{x}_T \right]^2, \end{aligned}$$

ce qui implique que la matrice Hessienne $\partial_U^2 \sigma$ est définie positive. $\blacksquare$

On introduit alors le vecteur des variables entropiques $\mathbf{V}$ par

$$\mathbf{V} = \frac{1}{T} \left(g_1 - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \dots, g_{n^s} - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \mathbf{v}^T, \varepsilon_0 \mathbf{E}^T, \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^T, -1 \right)^T. \quad (\text{II.61})$$

Proposition II.8

L'application $\mathbf{U} \mapsto \mathbf{V}$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de l'ouvert $\mathcal{O}_U$ sur l'ouvert $\mathcal{O}_V = \mathbb{R}^{n^s+9} \times (-\infty, 0)$.

Preuve - II.8 -

D'après la proposition II.1, on doit prouver que l'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{V}$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de $\mathcal{O}_Z$ sur $\mathcal{O}_V$. Elle est $\mathcal{C}^\infty$ d'après l'hypothèse (Th₁) sur les coefficients $c_{v,k}$, $k \in S$. L'injectivité est assurée par la positivité des coefficients $c_{v,k}$,

$k \in S$, donnée par l'hypothèse (Th₁). On prouve ensuite que l'application $Z \mapsto V$ est surjective. Soit $V \in \mathcal{O}_V$, on définit

$$Z_5 = -\frac{1}{V_5}, \quad Z_4 = -\mu_0 \frac{V_4}{V_5}, \quad Z_3 = -\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{V_3}{V_5}, \quad Z_2 = -\frac{V_2}{V_5},$$

$$Z_{1k} = m_k \gamma^{\text{st}} \exp \left[\frac{V_{1k} - r_k + s_k^{\text{st}} + e_k^{\text{st}} V_5}{r_k} - \frac{V_4 \cdot V_4}{2r_k V_5} + \frac{1}{r_k} \int_{T^{\text{st}}}^{\frac{-1}{V_5}} c_{v,k}(\tau) \left(\frac{1}{\tau} + V_5 \right) d\tau \right],$$

pour $k \in S$. Le vecteur V est alors l'image du vecteur Z ainsi défini. On donne à présent l'expression de la matrice $\partial_Z V$

$$\partial_Z V = \begin{bmatrix} d_\rho^r & -\frac{1}{T} u \otimes v & 0_{n^s,3} & 0_{n^s,3} & -\frac{1}{T^2} e^{\text{red}} \\ 0_{3,n^s} & \frac{1}{T} \mathbb{I} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & -\frac{1}{T^2} v \\ 0_{3,n^s} & 0_{3,3} & \frac{\varepsilon_0}{T} \mathbb{I} & 0_{3,3} & -\frac{\varepsilon_0}{T^2} E \\ 0_{3,n^s} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & \frac{1}{\mu_0 T} \mathbb{I} & -\frac{1}{\mu_0 T^2} B \\ 0_{1,n^s} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & \frac{1}{T^2} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.62})$$

La matrice $\partial_Z V$ est donc une matrice triangulaire supérieure par blocs et ses termes diagonaux sont strictement positifs d'après l'hypothèse (Th₁). En utilisant le théorème d'inversion locale, on conclut que l'application $Z \mapsto V$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de l'ouvert $\mathcal{O}_Z$ sur l'ouvert $\mathcal{O}_V$. ■

On étudie à présent les propriétés de symétrie du système d'équations aux dérivées partielles modélisant les mélanges gazeux multiespèces réactifs ionisés et magnétisés. On obtient en particulier une forme partiellement symétrique de ce système au sens de la définition II.1, par l'utilisation du vecteur des variables entropiques V .

Théorème II.9

La fonction σ est une fonction entropie partielle pour le système (II.33). De plus, le changement de variables $U \mapsto V$ transforme le système (II.33) en

$$\tilde{A}_0(V) \partial_t V + \sum_{i \in C} \left(\tilde{A}_i(V) + \tilde{A}_i^e(V) \right) \partial_i V = \sum_{i,j \in C} \partial_i \left(\tilde{B}_{ij}(V) \partial_j V \right) + \tilde{\Omega}(V), \quad (\text{II.63})$$

avec

$$\begin{cases} \tilde{A}_0 = \partial_V U, & \tilde{A}_i = A_i \partial_V U, & \tilde{A}_i^e = A_i^e \partial_V U, \\ \tilde{B}_{ij} = B_{ij} \partial_V U, & \tilde{\Omega} = \Omega, \end{cases} \quad (\text{II.64})$$

où les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_0(\mathbf{V})$, $\tilde{\mathbf{A}}_i(\mathbf{V})$, $\tilde{\mathbf{A}}_i^e(\mathbf{V})$, $i \in \mathbf{C}$, $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V})$, $i, j \in \mathbf{C}$, et le vecteur $\tilde{\Omega}(\mathbf{V})$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_{\mathbf{V}}$. De plus, le système (II.63) est sous forme partiellement symétrique, c'est-à-dire que les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_0$, $\tilde{\mathbf{A}}_i$, $i \in \mathbf{C}$, et $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathbf{C}$, vérifient les propriétés (S₁-S₃).

Preuve - II.9 -

Pour évaluer les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_0$, $\tilde{\mathbf{A}}_i$, $\tilde{\mathbf{A}}_i^e$, $i \in \mathbf{C}$, et $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathbf{C}$, on utilise les notations définies dans la preuve de la proposition II.2 concernant le système écrit dans la variable naturelle $\mathbf{Z}$

$$\hat{\mathbf{A}}_0 \partial_i \mathbf{Z} + \sum_{i \in \mathbf{C}} (\hat{\mathbf{A}}_i + \hat{\mathbf{A}}_i^e) \partial_i \mathbf{Z} = \sum_{i, j \in \mathbf{C}} \partial_i (\hat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_j \mathbf{Z}) + \Omega.$$

En effet, il est facile de calculer ces matrices en utilisant la variable naturelle $\mathbf{Z}$ et les relations

$$\tilde{\mathbf{A}}_0 = \partial_{\mathbf{Z}} \mathbf{U} \partial_{\mathbf{V}} \mathbf{Z}, \quad \tilde{\mathbf{A}}_i = \hat{\mathbf{A}}_i \partial_{\mathbf{V}} \mathbf{Z}, \quad \tilde{\mathbf{A}}_i^e = \hat{\mathbf{A}}_i^e \partial_{\mathbf{V}} \mathbf{Z}, \quad \tilde{\mathbf{B}}_{ij} = \hat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{\mathbf{V}} \mathbf{Z},$$

où la matrice $\partial_{\mathbf{V}} \mathbf{Z}$ s'écrit

$$\partial_{\mathbf{V}} \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_r^\varrho & \mathbf{v}_r^\varrho \otimes \mathbf{v} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & \mathbf{d}_r^\varrho \mathbf{e}^{\text{red}} \\ 0_{3, n^s} & T\mathbb{I} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & T\mathbf{v} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & \frac{T}{\varepsilon_0} \mathbb{I} & 0_{3, 3} & T\mathbf{E} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & \mu_0 T \mathbb{I} & T\mathbf{B} \\ 0_{1, n^s} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & T^2 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.65})$$

avec $\mathbf{d}_r^\varrho$ la matrice diagonale de taille $n^s \times n^s$ définie par $\mathbf{d}_r^\varrho = \text{Diag}(\rho_1/r_1, \dots, \rho_{n^s}/r_{n^s})$ et $\mathbf{v}_r^\varrho$ le vecteur de taille n^s donné par $\mathbf{v}_r^\varrho = \mathbf{d}_r^\varrho \mathbf{u} = (\rho_1/r_1, \dots, \rho_{n^s}/r_{n^s})^T$.

L'expression de la matrice $\tilde{\mathbf{A}}_0$ est la suivante

$$\tilde{\mathbf{A}}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_r^\varrho & \mathbf{v}_r^\varrho \otimes \mathbf{v} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & \mathbf{d}_r^\varrho \mathbf{e}^f \\ & \rho T \mathbb{I} + \Sigma_\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & (\rho T + \Sigma_e) \mathbf{v} \\ & & \frac{T}{\varepsilon_0} \mathbb{I} & 0_{3, 3} & T\mathbf{E} \\ & & & T\mu_0 \mathbb{I} & T\mathbf{B} \\ \text{Sym} & & & & \Upsilon_e \end{bmatrix}, \quad (\text{II.66})$$

où l'on a défini les coefficients Σ_ρ , Σ_e et Υ_e par

$$\begin{aligned}\Sigma_\rho &= \mathbf{u}^T \mathbf{d}_r^\rho \mathbf{u} = \sum_{k \in S} \frac{\rho_k}{r_k}, \quad \Sigma_e = \mathbf{u}^T \mathbf{d}_r^e \mathbf{e}^f = \sum_{k \in S} \frac{\rho_k}{r_k} e_k^f, \\ \Upsilon_e &= \mathbf{e}^{fT} \mathbf{d}_r^e \mathbf{e}^f + \rho T \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho c_v T^2 + 2T \rho e^e = \sum_{k \in S} \frac{\rho_k}{r_k} (e_k^f)^2 + \rho T \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho c_v T^2 + 2T \rho e^e.\end{aligned}$$

Comme la matrice $\tilde{\mathbf{A}}_0$ est symétrique, on n'a donné que sa partie triangulaire supérieure droite et on a écrit "Sym" dans la partie triangulaire inférieure gauche. De plus, la matrice $\tilde{\mathbf{A}}_0$ est définie positive car pour tout vecteur $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n^s+10}$, écrit sous la forme $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_\rho^T, \mathbf{x}_v^T, \mathbf{x}_E^T, \mathbf{x}_B^T, \mathbf{x}_T)^T$, on a la relation

$$\begin{aligned}\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{A}}_0 \mathbf{X} &= \rho c_v T^2 \mathbf{x}_T^2 + \frac{T}{\varepsilon_0} (\mathbf{x}_E + \varepsilon_0 \mathbf{x}_T \mathbf{E})^T \cdot (\mathbf{x}_E + \varepsilon_0 \mathbf{x}_T \mathbf{E}) \\ &\quad + \rho T (\mathbf{x}_v + \mathbf{x}_T \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{x}_v + \mathbf{x}_T \mathbf{v}) + \mu_0 T (\mathbf{x}_B + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{x}_T \mathbf{B})^T \cdot (\mathbf{x}_B + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{x}_T \mathbf{B}) \\ &\quad + (\mathbf{x}_\rho + \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{v} \mathbf{u} + \mathbf{x}_T \mathbf{e}^f)^T \mathbf{d}_r^e (\mathbf{x}_\rho + \mathbf{x}_v \cdot \mathbf{v} \mathbf{u} + \mathbf{x}_T \mathbf{e}^f).\end{aligned}$$

En considérant $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$ un vecteur quelconque de $\mathbb{R}^3$, les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_i$, $i \in C$, sont données par

$$\sum_{i \in C} \tilde{\mathbf{A}}_i \xi_i = \begin{bmatrix} \mathbf{d}_r^\rho \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} & \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{v}_r^\rho \otimes \mathbf{v} + T \rho \otimes \boldsymbol{\xi} & 0_{n^s,3} & 0_{n^s,3} & \mathbf{d}_r^e \mathbf{h}^f \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \\ \rho T (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbb{I} + \mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi} \otimes \mathbf{v}) & 0_{n^s,3} & 0_{n^s,3} & (\Sigma_h + \rho T) \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{v} \\ + \Sigma_\rho \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} & & & + \rho T \mathbf{h}^f \boldsymbol{\xi} \\ 0_{3,3} & -\frac{T}{\varepsilon_0} \mathbf{R}(\boldsymbol{\xi}) & \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0} T \mathbf{B} \wedge \boldsymbol{\xi} \\ & 0_{3,3} & -T \mathbf{E} \wedge \boldsymbol{\xi} \\ \text{Sym} & & \Upsilon_h \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} + 2T \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\xi} \end{bmatrix}, \quad (\text{II.67})$$

où on a défini les coefficients Σ_h et Υ_h par

$$\begin{aligned}\Sigma_h &= \mathbf{u}^T \mathbf{d}_r^e \mathbf{h}^f = \sum_{k \in S} \frac{\rho_k}{r_k} h_k^f, \\ \Upsilon_h &= \mathbf{h}^{fT} \mathbf{d}_r^e \mathbf{h}^f + \rho T \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho c_p T^2 = \sum_{k \in S} \frac{\rho_k}{r_k} (h_k^f)^2 + \rho T \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \rho c_p T^2.\end{aligned}$$

Comme pour la matrice $\tilde{\mathbf{A}}_0$, les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_i$, $i \in C$, sont symétriques et on n'a donné que leurs parties triangulaires supérieures droites, en notant "Sym" dans leurs parties triangulaires inférieures gauches.

En ce qui concerne les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_i^e$, $i \in \mathbf{C}$, on peut écrire

$$\tilde{\mathbf{A}}_i^e = - \sum_{j \in \mathbf{C}} \partial_Z F_{ij}^e \partial_V Z - \tilde{\mathbf{A}}_i^{e,\Omega}, \quad (\text{II.68})$$

où les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_i^{e,\Omega}$, $i \in \mathbf{C}$, ont pour expression

$$\tilde{\mathbf{A}}_i^{e,\Omega} = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 1} \\ \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \varrho}^{e,\Omega} \mathbf{d}_r^\varrho & \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \varrho}^{e,\Omega} \mathbf{v}_r^\varrho \otimes \mathbf{v} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & T^2 \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \mathbf{e}}^{e,\Omega} + \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{u}, \varrho}^{e,\Omega} \mathbf{d}_r^\varrho \mathbf{e}^{\text{red}} \\ \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \varrho}^{e,\Omega} \mathbf{d}_r^\varrho & \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \varrho}^{e,\Omega} \mathbf{v}_r^\varrho \otimes \mathbf{v} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & T^2 \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \mathbf{e}}^{e,\Omega} + \hat{\mathbf{A}}_{i, \mathbf{E}, \varrho}^{e,\Omega} \mathbf{d}_r^\varrho \mathbf{e}^{\text{red}} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{1, n^s} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & 0_{1, 1} \end{bmatrix}, \quad i \in \mathbf{C}. \quad (\text{II.69})$$

En utilisant la forme des matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathbf{C}$, on décompose classiquement les matrices de dissipation $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathbf{C}$, en la somme des matrices de diffusion et des matrices de viscosité, $\tilde{\mathbf{B}}_{ij} = \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} + \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in \mathbf{C}$. En considérant $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$ et $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)^T$ deux vecteurs quelconques de $\mathbb{R}^3$, les matrices de diffusion, $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$, $i, j \in \mathbf{C}$, sont données par

$$\sum_{i, j \in \mathbf{C}} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} \xi_i \zeta_j = \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta} \tilde{\mathbf{B}}^{\parallel} + (\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} - \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta}) \tilde{\mathbf{B}}^{\perp} + \boldsymbol{\xi}^T \mathbf{R}(\mathcal{B}) \boldsymbol{\zeta} \tilde{\mathbf{B}}^{\odot}, \quad (\text{II.70})$$

où les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\parallel}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\perp}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\odot}$ ont la structure

$$\tilde{\mathbf{B}}^{\diamond} = \frac{T}{p} \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\diamond} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & \tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \mathbf{e}}^{\diamond} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \varrho}^{\diamond} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \mathbf{e}}^{\diamond} \end{bmatrix}, \quad \diamond \in \{\parallel, \perp, \odot\}. \quad (\text{II.71})$$

Les coefficients correspondant à $\diamond = \parallel$ s'écrivent

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\parallel} &= D_{\varrho}^{\parallel}, \quad \tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \mathbf{e}}^{\parallel} = D_{\varrho}^{\parallel}(\boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \mathbf{h}), \quad \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \varrho}^{\parallel} = (\boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\parallel}, \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \mathbf{e}}^{\parallel} &= pT\lambda^{\parallel} + (\boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \mathbf{h})^T D_{\varrho}^{\parallel}(\boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \mathbf{h}), \end{aligned}$$

ceux avec $\diamond = \perp$ ont pour expression

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\perp} &= D_{\varrho}^{\perp}, \quad \tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \mathbf{e}}^{\perp} = D_{\varrho}^{\perp}(\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h}) - D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\kappa}^{\odot}, \quad \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \varrho}^{\perp} = (\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h})^{\mathrm{T}} D_{\varrho}^{\perp} - \boldsymbol{\kappa}^{\odot \mathrm{T}} D_{\varrho}^{\odot}, \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \mathbf{e}}^{\perp} &= pT\lambda^{\perp} + (\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h})^{\mathrm{T}} D_{\varrho}^{\perp}(\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h}) - \boldsymbol{\kappa}^{\odot \mathrm{T}} D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\kappa}^{\odot} - \boldsymbol{\kappa}^{\odot \mathrm{T}} D_{\varrho}^{\odot}(\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h}) - (\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h})^{\mathrm{T}} D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\kappa}^{\odot},\end{aligned}$$

et ceux avec $\diamond = \odot$

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\odot} &= D_{\varrho}^{\odot}, \quad \tilde{\mathbf{B}}_{\varrho, \mathbf{e}}^{\odot} = D_{\varrho}^{\odot}(\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h}) + D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\kappa}^{\odot}, \quad \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \varrho}^{\odot} = (\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h})^{\mathrm{T}} D_{\varrho}^{\odot} + \boldsymbol{\kappa}^{\odot \mathrm{T}} D_{\varrho}^{\perp}, \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{e}, \mathbf{e}}^{\odot} &= pT\lambda^{\odot} + (\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h})^{\mathrm{T}} D_{\varrho}^{\odot}(\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h}) - \boldsymbol{\kappa}^{\odot \mathrm{T}} D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\kappa}^{\odot} + \boldsymbol{\kappa}^{\odot \mathrm{T}} D_{\varrho}^{\perp}(\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h}) + (\boldsymbol{\kappa}^{\perp} + \mathbf{h})^{\mathrm{T}} D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\kappa}^{\odot}.\end{aligned}$$

On observe alors que les matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$, $i, j \in \mathbf{C}$, ne vérifient pas les propriétés classiques de symétrie $(\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}})^{\mathrm{T}} = \tilde{\mathbf{B}}_{ji}^{\text{diff}}$, $i, j \in \mathbf{C}$, dès que le champ magnétique $\mathbf{B}$ est non nul. En effet, les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\parallel}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\perp}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\odot}$ sont symétriques, les coefficients $\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\zeta}$ et $\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\zeta}$ sont des fonctions symétriques de $\boldsymbol{\xi}$ et $\boldsymbol{\zeta}$ mais le coefficient $\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}} \mathbf{R}(\mathbf{B}) \boldsymbol{\zeta}$ est une fonction antisymétrique de $\boldsymbol{\xi}$ et $\boldsymbol{\zeta}$. Ainsi, la partie symétrique de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}^{\text{diff}}$ est portée par les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\parallel}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\perp}$, tandis que la partie antisymétrique est portée par la matrice $\tilde{\mathbf{B}}^{\odot}$. Ces propriétés sont compatibles avec les relations de réciprocité de Onsager car les coefficients $\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\zeta}$ et $\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} - \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\zeta}$ sont des fonctions paires du champ magnétique tandis que le coefficient $\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}} \mathbf{R}(\mathbf{B}) \boldsymbol{\zeta}$ est une fonction impaire. Les matrices de viscosité $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in \mathbf{C}$, sont données par

$$\sum_{i, j \in \mathbf{C}} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}} \xi_i \zeta_j = \kappa \tilde{\mathbf{B}}^{\kappa}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) + \sum_{\alpha=1}^5 \eta_{\alpha} \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}), \quad (\text{II.72})$$

où les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\kappa}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_1}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_2}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_3}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_4}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_5}$ ont la structure suivante

$$\tilde{\mathbf{B}}^{\Delta}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 3} & 0_{n^s, 1} \\ 0_{3, n^s} & \tilde{\mathbf{B}}_v^{\Delta}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & \tilde{\mathbf{B}}_v^{\Delta}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) \mathbf{v} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{3, n^s} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ 0_{1, n^s} & \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{B}}_v^{\Delta}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) & 0_{1, 3} & 0_{1, 3} & \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \tilde{\mathbf{B}}_v^{\Delta}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) \mathbf{v} \end{bmatrix}, \quad \Delta \in \{\kappa, \eta_1, \dots, \eta_5\}. \quad (\text{II.73})$$

Les expressions des matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\kappa}$, $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_1}$, $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_2}$, $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_3}$, $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_4}$ et $\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_5}$ sont données par

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\kappa}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= T \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\zeta}, \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_1}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= T [\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbb{I} + \boldsymbol{\zeta} \otimes \boldsymbol{\xi} - \frac{2}{3} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\zeta}], \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_2}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= T [2\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbf{R}(\mathcal{B}) + \mathbf{R}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{R}(\mathcal{B}) \mathbf{R}(\boldsymbol{\zeta}) + 2\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{R}(\mathcal{B}) \boldsymbol{\zeta} \mathbb{I}], \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_3}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= T [2\mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathcal{B} \otimes \mathcal{B} - \frac{2}{3} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\zeta} + 2\mathbf{R}(\mathcal{B}) \boldsymbol{\zeta} \otimes \boldsymbol{\xi} \mathbf{R}(\mathcal{B}) - \mathbf{R}(\mathcal{B}) \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\zeta} \mathbf{R}(\mathcal{B})], \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_4}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= T [\mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta} (\mathbb{I} - 4\mathcal{B} \otimes \mathcal{B}) + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathcal{B} \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\zeta} \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathcal{B} \otimes \boldsymbol{\xi}], \\ \tilde{\mathbf{B}}_{\mathbf{v}}^{\eta_5}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= T [-2\mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbf{R}(\mathcal{B}) - \mathbf{R}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{R}(\mathcal{B}) \mathbf{R}(\boldsymbol{\zeta}) - 2\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{R}(\mathcal{B}) \boldsymbol{\zeta} \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}].\end{aligned}$$

Les matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in \mathbb{C}$, ne vérifient pas les propriétés classiques de symétrie $(\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}})^T = \tilde{\mathbf{B}}_{ji}^{\text{visc}}$, dès que le champ magnétique $\mathcal{B}$ est non nul. En effet, on a les relations

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{B}}^{\kappa}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= \tilde{\mathbf{B}}^{\kappa}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi})^T, \quad \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_1}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) = \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_1}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi})^T, \quad \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_2}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) = -\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_2}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi})^T, \\ \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_3}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) &= \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_3}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi})^T, \quad \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_4}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) = \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_4}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi})^T, \quad \tilde{\mathbf{B}}^{\eta_5}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) = -\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_5}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\xi})^T.\end{aligned}$$

Ainsi, la partie symétrique de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}^{\text{visc}}$ est portée par les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\kappa}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_1}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_3}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_4}$, tandis que la partie antisymétrique est portée par les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_2}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_5}$. Ces propriétés sont compatibles avec les relations de réciprocity de Onsager car les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\kappa}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_1}$, $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_3}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_4}$ sont des fonctions paires du champ magnétique tandis que les matrices $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_2}$ et $\tilde{\mathbf{B}}^{\eta_5}$ sont des fonctions impaires.

Pour démontrer que les matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathbb{C}$, vérifient la propriété (S_3) , on introduit le vecteur $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_{\rho}^T, \mathbf{x}_{\mathbf{v}}^T, \mathbf{x}_{\mathbf{E}}^T, \mathbf{x}_{\mathbf{B}}^T, \mathbf{x}_T)^T \in \mathbb{R}^{n^s+10}$. En définissant la matrice $\tilde{\mathbf{B}}^{\text{diff}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i,j \in \mathbb{C}} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} \xi_i \xi_j$, on obtient après quelques calculs

$$\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{\text{diff}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X} = \frac{T}{p} ((\mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi})^2 \langle A^{\parallel} \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle + (1 - (\mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi})^2) \langle A^{\perp} \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle), \quad (\text{II.74})$$

où on a utilisé les notations de l'hypothèse (Tr_3) pour les matrices $A^{\parallel}$ et $A^{\perp}$ et où on a introduit le vecteur $\tilde{\mathbf{x}} = (p\mathbf{x}_T, (\mathbf{x}_{\rho} + \mathbf{x}_T \mathbf{h})^T \mathbf{d}^{\rho})^T$, avec $\mathbf{d}^{\rho}$ la matrice diagonale de taille $n^s \times n^s$ définie par $\mathbf{d}^{\rho} = \text{Diag}(\rho_1, \dots, \rho_{n^s})$. En utilisant l'hypothèse (Tr_3) , on obtient la relation $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{\text{diff}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X} \geq 0$, pour tout $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^2$. On définit ensuite la matrice $\tilde{\mathbf{B}}^{\text{visc}}(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{i,j \in \mathbb{C}} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}} \xi_i \xi_j$, et on obtient après quelques calculs

$$\begin{aligned}\frac{1}{T} \mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{\text{visc}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X} &= \kappa (\boldsymbol{\xi} \cdot \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}})^2 + (\eta_1 + \eta_4) [\boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{B} \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}}^{\perp} + \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}} \cdot \mathcal{B} \boldsymbol{\xi}^{\perp}] \cdot [\boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{B} \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}}^{\perp} + \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}} \cdot \mathcal{B} \boldsymbol{\xi}^{\perp}] \\ &\quad + \frac{\eta_1 + \eta_3}{3} (\boldsymbol{\xi}^{\perp} \cdot \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}}^{\perp} - 2\boldsymbol{\xi}^{\parallel} \cdot \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}}^{\parallel})^2 + (\eta_1 - \eta_3) [(\boldsymbol{\xi}^{\perp} \cdot \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}}^{\odot})^2 + (\boldsymbol{\xi}^{\perp} \cdot \tilde{\mathbf{x}}_{\mathbf{v}}^{\perp})^2], \quad (\text{II.75})\end{aligned}$$

avec $\tilde{\mathbf{x}}_v = \mathbf{x}_v + \mathbf{x}_T \mathbf{v}$. L'hypothèse (Tr_2) permet alors de conclure que $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{\text{visc}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X} \geq 0$, pour tout $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^2$. Ce qui montre que la propriété (S_3) est vérifiée par les matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in C$.

Finalement, on obtient immédiatement que les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_0(\mathbf{V})$, $\tilde{\mathbf{A}}_i(\mathbf{V})$, $\tilde{\mathbf{A}}_i^e(\mathbf{V})$, $i \in C$, $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V})$, $i, j \in C$, et le vecteur $\tilde{\Omega}(\mathbf{V})$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_V$ en utilisant le $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme $\mathbf{U} \mapsto \mathbf{V}$, donné par les propositions II.1 et II.8, et la régularité des matrices et des vecteurs écrits en la variable conservative, donnée par la proposition II.2. ■

II.5.2 Variable normale partielle

Dans cette section, on étudie une forme normale partielle au sens de la définition II.3 pour le système (II.33). On commence par établir que les propriétés d'invariance et de consistance des noyaux sont vérifiées. On détermine ensuite une forme normale partielle et on explicite le système sous forme partiellement normale, c'est à dire toutes les matrices apparaissant dans le système.

Lemme II.10

Le noyau de la partie symétrique de la matrice $\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{V}, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{i,j \in C} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V}) \xi_i \xi_j$, noté $N(\tilde{\mathbf{B}})$, ne dépend ni de la variable entropique $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_V$ ni du vecteur $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^2$. On notera n_0 sa dimension. Le noyau $N(\tilde{\mathbf{B}})$ est engendré par les vecteurs colonnes $(\mathbf{u}^T, 0_{1,10})^T$ et $\mathbf{E}^{n^s+k}$, $k = 1, \dots, 6$, où $(\mathbf{E}^k)_{k=1, \dots, n^s+10}$ est la base canonique de $\mathbb{R}^{n^s+10}$. De plus, on a

$$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V}) N(\tilde{\mathbf{B}}) = \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^T(\mathbf{V}) N(\tilde{\mathbf{B}}) = 0, \quad i, j \in C, \quad N(\tilde{\mathbf{B}})^T \tilde{\mathbf{A}}_i^e(\mathbf{V}) N(\tilde{\mathbf{B}}) = 0, \quad i \in C.$$

Preuve - II.10 -

On commence par vérifier que la propriété d'invariance des noyaux est satisfaite. En utilisant les hypothèses $(\text{Tr}_2\text{-Tr}_3)$, les expressions (II.74) de $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{\text{diff}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X}$ et (II.75) de $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}^{\text{visc}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X}$, on obtient que $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}}(\boldsymbol{\xi}) \mathbf{X} = 0$ si, et seulement si, $\mathbf{x}_T = 0$, $\mathbf{x}_\varrho$ est proportionnel au vecteur $\mathbf{u}$, et $\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_v^\parallel = \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_v^\perp = \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x}_v^\odot = \boldsymbol{\xi} \cdot \mathcal{B} \mathbf{x}_v^\perp \cdot \mathbf{x}_v^\perp = \mathbf{x}_v \cdot \mathcal{B} \boldsymbol{\xi}^\perp \cdot \boldsymbol{\xi}^\perp = 0$. Comme ces dernières relations sont équivalentes à $\mathbf{x}_v = 0$, on en déduit que $N(\tilde{\mathbf{B}})$ ne dépend ni du vecteur $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_V$, ni du vecteur $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^2$ et est engendré par les vecteurs colonnes $(\mathbf{u}^T, 0_{1,10})^T$ et $\mathbf{E}^{n^s+k}$, $k = 1, \dots, 6$.

On s'intéresse ensuite à la propriété de consistance des noyaux. On obtient alors immédiatement les relations $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V})N(\tilde{\mathbf{B}}) = \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^T(\mathbf{V})N(\tilde{\mathbf{B}}) = 0$, $i, j \in C$. De plus, en utilisant l'hypothèse (Tr_3) sur les noyaux des matrices $A^\parallel$, $A^\perp$ et $A^\odot$, l'expression (II.36) des vecteurs $\mathbf{F}_{ij}^e$, $i, j \in C$, implique que $N(\tilde{\mathbf{B}})^T \mathbf{F}_{ij}^e = 0$, puis que $N(\tilde{\mathbf{B}})^T \partial_Z \mathbf{F}_{ij}^e = 0$, car $N(\tilde{\mathbf{B}})$ ne dépend pas de $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_V$. En utilisant la propriété (Tr_3) concernant les noyaux des matrices de transport, l'expression (II.69) permet immédiatement de démontrer que $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{A}}_i^{e,\Omega} \mathbf{Y} = 0$, pour $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in N(\tilde{\mathbf{B}})$, car les colonnes d'indices $n^s + 1, \dots, n^s + 6$ sont nulles et car la somme de chaque ligne fait apparaître des termes proportionnels à $D^\parallel \varrho$, $D^\perp \varrho$ ou $D^\odot \varrho$. De même, l'expression (II.68) montre alors que $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{A}}_i^e \mathbf{Y} = 0$, pour $\mathbf{X}, \mathbf{Y} \in N(\tilde{\mathbf{B}})$. ■

En utilisant la base explicite du noyau $N(\tilde{\mathbf{B}})$, on définit la matrice $\mathbf{P}$ par

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 0_{1,3} & 0_{1,3} & 0_{1,n^s-1} & 0_{1,3} & 0 \\ \check{\mathbf{u}} & 0_{n^s-1,3} & 0_{n^s-1,3} & \mathbb{I}_{n^s-1,n^s-1} & 0_{n^s-1,3} & 0_{n^s-1,1} \\ 0_{3,1} & 0_{3,3} & 0_{3,3} & 0_{3,n^s-1} & \mathbb{I} & 0_{3,1} \\ 0_{3,1} & \mathbb{I} & 0_{3,3} & 0_{3,n^s-1} & 0_{3,3} & 0_{3,1} \\ 0_{3,1} & 0_{3,3} & \mathbb{I} & 0_{3,n^s-1} & 0_{3,3} & 0_{3,1} \\ 0_{1,1} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & 0_{1,n^s-1} & 0_{1,3} & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.76})$$

avec $\check{\mathbf{u}}$ le vecteur de taille $n^s - 1$ défini par $\check{\mathbf{u}} = (1, \dots, 1)^T$. En suivant l'étude pour le système abstrait faite à la section II.4.2, on introduit la variable conservative auxiliaire $\mathbf{U}' = \mathbf{P}^T \mathbf{U}$ et la variable entropique correspondante $\mathbf{V}' = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{V}$ dont les expressions sont

$$\mathbf{U}' = (\rho, \mathbf{E}^T, \mathbf{B}^T, \check{\varrho}^T, \rho \mathbf{v}^T, \rho e^t)^T,$$

avec $\check{\varrho} = (\rho_2, \dots, \rho_{n^s})^T$, et

$$\mathbf{V}' = \frac{1}{T} \left(g_1 - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \varepsilon_0 \mathbf{E}^T, \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^T, g_2 - g_1, \dots, g_{n^s} - g_1, \mathbf{v}^T, -1 \right)^T.$$

D'après le théorème II.5, toutes les variables normales partielles sont de la forme $\mathbf{W} = (\psi_1(\mathbf{U}'_I), \phi_\Pi(\mathbf{V}'_\Pi))^T$, où $\mathbf{U}'_I$ est le vecteur composé des sept premières composantes du vecteur $\mathbf{U}'$ et $\mathbf{V}'_\Pi$ le vecteur composé des $n^s + 3$ dernières composantes de $\mathbf{V}'$. On choisit la variable normale $\mathbf{W}$ donnée par

$$\mathbf{W} = \left(\rho, \mathbf{E}^T, \mathbf{B}^T, \log \frac{\rho_2^{r_2}}{\rho_1^{r_1}}, \dots, \log \frac{\rho_{n^s}^{r_{n^s}}}{\rho_1^{r_1}}, \mathbf{v}^T, T \right)^T. \quad (\text{II.77})$$

Ce choix est guidé par des soucis de simplicité de présentation et de calculs. Tout autre choix serait bien sûr admissible et donnerait des résultats similaires.

Proposition II.11

L'application $V \mapsto W$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de l'ouvert convexe $\mathcal{O}_V$ sur l'ouvert $\mathcal{O}_W = (0, \infty) \times \mathbb{R}^6 \times \mathbb{R}^{n^s-1} \times \mathbb{R}^3 \times (0, \infty)$.

Preuve - II.11 -

D'après les propositions II.1 et II.8, il faut prouver que l'application $Z \mapsto W$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme. Cette application est clairement $\mathcal{C}^\infty$ et on montre à présent qu'elle est bijective. Soit un vecteur $W \in \mathcal{O}_W$. Il faut alors définir un vecteur $Z \in \mathcal{O}_Z$ et montrer qu'il est unique. En ce qui concerne les variables du champ électrique, du champ magnétique, de la vitesse et de la température, il n'y a pas d'ambiguïté ; le choix des composantes correspondantes de Z est unique

$$\begin{aligned} Z_{n^s+10} &= W_{n^s+10}, & Z_{n^s+6+\mu} &= W_{4+\mu}, & \mu &\in \llbracket 1, 3 \rrbracket, \\ Z_{n^s+3+\mu} &= W_{1+\mu}, & Z_{n^s+\mu} &= W_{n^s+6+\mu}, & \mu &\in \llbracket 1, 3 \rrbracket. \end{aligned}$$

En ce qui concerne les variables des masses des espèces, elles doivent vérifier les relations

$$\sum_{k \in S} Z_k = W_1, \quad Z_k = (Z_1^{r_1} \exp W_{6+k})^{1/r_k}, \quad 2 \leq k \leq n^s.$$

Comme l'équation

$$Z_1 + \sum_{k=2}^{n^s} Z_1^{r_1/r_k} \exp(W_{6+k}/r_k) = W_1$$

admet une unique solution strictement positive, on en déduit que l'application $Z \mapsto W$ est bien bijective. Un calcul direct permet ensuite de donner une expression de la matrice jacobienne $\partial_Z W$,

$$\partial_Z W = \begin{bmatrix} 1 & \check{u}^T & 0_{1,3} & 0_{1,6} & 0_{1,1} \\ 0_{6,1} & 0_{6,n^s-1} & 0_{6,3} & \mathbb{I}_{6,6} & 0_{6,1} \\ -\frac{r_1}{\rho_1} \check{u} & -\check{d}_\rho^r & 0_{n^s-1,3} & 0_{n^s-1,6} & 0_{n^s-1,1} \\ 0_{3,1} & 0_{3,n^s-1} & \mathbb{I}_{3,1} & 0_{3,6} & 0_{3,1} \\ 0_{1,1} & 0_{1,n^s-1} & 0_{1,3} & 0_{1,6} & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.78})$$

avec $\check{\mathbf{d}}_0^r$ la matrice diagonale de taille $n^s \times n^s$ définie par $\check{\mathbf{d}}_0^r = \text{Diag}(r_2/\rho_2, \dots, r_{n^s}/\rho_{n^s})$. La matrice $\partial_Z \mathbf{W}$ est inversible et son inverse est donné par

$$\partial_W \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Sigma_\rho} \frac{\rho_1}{r_1} & 0_{1,6} & -\frac{1}{\Sigma_\rho} \frac{\rho_1}{r_1} \check{\mathbf{v}}_r^{\mathcal{Q}\mathbf{T}} & 0_{1,3} & 0_{1,1} \\ \frac{1}{\Sigma_\rho} \check{\mathbf{v}}_r^{\mathcal{Q}} & 0_{n^s-1,6} & \check{\mathbf{d}}_r^{\mathcal{Q}} - \frac{1}{\Sigma_\rho} \check{\mathbf{v}}_r^{\mathcal{Q}} \otimes \check{\mathbf{v}}_r^{\mathcal{Q}} & 0_{n^s-1,3} & 0_{n^s-1,1} \\ 0_{3,1} & 0_{3,6} & 0_{3,n^s-1} & \mathbb{I}_{3,3} & 0_{3,1} \\ 0_{6,1} & \mathbb{I}_{6,6} & 0_{6,n^s-1} & 0_{6,3} & 0_{6,1} \\ 0_{1,1} & 0_{1,6} & 0_{1,n^s-1} & 0_{1,3} & 1 \end{bmatrix}, \quad (\text{II.79})$$

avec $\check{\mathbf{v}}_r^{\mathcal{Q}} = (\rho_2/r_2, \dots, \rho_{n^s}/r_{n^s})^{\mathbf{T}}$. En utilisant le théorème d'inversion locale, on conclut que l'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{W}$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de $\mathcal{O}_Z$ sur $\mathcal{O}_W$. ■

Dans le but de séparer les variables hyperboliques des variables paraboliques, on introduit comme dans la section II.4.2, une partition de l'ensemble $\{1, \dots, n^s + 10\}$ en $\text{I} = \{1, \dots, n_0\}$ et $\text{II} = \{n_0 + 1, \dots, n^s + 10\}$, avec $n_0 = 7$, et on utilise la structure blocs matricielle et vectorielle induite par cette partition. On a en particulier $\mathbf{W} = (\mathbf{W}_{\text{I}}^{\mathbf{T}}, \mathbf{W}_{\text{II}}^{\mathbf{T}})^{\mathbf{T}}$, où

$$\mathbf{W}_{\text{I}} = (\rho, \mathbf{E}^{\mathbf{T}}, \mathbf{B}^{\mathbf{T}})^{\mathbf{T}}, \quad (\text{II.80a})$$

correspond au vecteur des variables hyperboliques et

$$\mathbf{W}_{\text{II}} = \left(\log \frac{\rho_2^{r_2}}{\rho_1^{r_1}}, \dots, \log \frac{\rho_{n^s}^{r_{n^s}}}{\rho_1^{r_1}}, \mathbf{v}^{\mathbf{T}}, T \right)^{\mathbf{T}} \quad (\text{II.80b})$$

au vecteur des variables paraboliques.

Théorème II.12

Le changement de variables $\mathbf{V} \mapsto \mathbf{W}$ transforme le système (II.63) en

$$\bar{\mathbf{A}}_0 \partial_t \mathbf{W} + \sum_{i \in \mathbf{C}} \left(\bar{\mathbf{A}}_i + \bar{\mathbf{A}}_i^{\mathcal{E}} \right) \partial_i \mathbf{W} = \sum_{i,j \in \mathbf{C}} \partial_i \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij} \partial_j \mathbf{W} \right) + \bar{\mathcal{T}} + \bar{\Omega}, \quad (\text{II.81})$$

avec

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{A}}_0 = (\partial_W \mathbf{V})^{\mathbf{T}} \tilde{\mathbf{A}}_0 (\partial_W \mathbf{V}), & \bar{\mathbf{B}}_{ij} = (\partial_W \mathbf{V})^{\mathbf{T}} \tilde{\mathbf{B}}_{ij} (\partial_W \mathbf{V}), \\ \bar{\mathbf{A}}_i = (\partial_W \mathbf{V})^{\mathbf{T}} \tilde{\mathbf{A}}_i (\partial_W \mathbf{V}), & \bar{\Omega} = (\partial_W \mathbf{V})^{\mathbf{T}} \tilde{\Omega}, \\ \bar{\mathbf{A}}_i^{\mathcal{E}} = (\partial_W \mathbf{V})^{\mathbf{T}} \tilde{\mathbf{A}}_i^{\mathcal{E}} (\partial_W \mathbf{V}), & \bar{\mathcal{T}} = - \sum_{i,j \in \mathbf{C}} \partial_i (\partial_W \mathbf{V})^{\mathbf{T}} \tilde{\mathbf{B}}_{ij} (\partial_W \mathbf{V}) \partial_j \mathbf{W}, \end{cases} \quad (\text{II.82})$$

où les matrices $\bar{A}_0(W)$, $\bar{A}_i(W)$, $\bar{A}_i^e(W)$, $i \in C$, $\bar{B}_{ij}(W)$, $i, j \in C$, et le vecteur $\bar{\Omega}(W)$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $W \in \mathcal{O}_W$ et le vecteur $\bar{T}(W, \partial_x W)$ est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ de $W \in \mathcal{O}_W$ et de $\partial_x W \in \mathbb{R}^{3(n^s+10)}$. De plus, le système (II.81) est sous forme normale partielle, c'est-à-dire que les matrices $\bar{A}_0$, $\bar{A}_i$, $i \in C$, $\bar{B}_{ij}$, $i, j \in C$, et le vecteur $\bar{T}$ vérifient les propriétés (Nor₁-Nor₃).

Preuve - II.12 -

La preuve de ce théorème est une application directe du théorème II.5. On donne donc uniquement les expressions des matrices $\bar{A}_0$, $\bar{A}_i$, $i \in C$, et $\bar{B}_{ij}$, $i, j \in C$. Les blocs de la matrice $\bar{A}_0$ s'écrivent

$$\bar{A}_0^{I,I} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\Sigma_\rho} & 0_{1,3} & 0_{1,3} \\ & \frac{\varepsilon_0}{T} \mathbb{I}_3 & 0_{3,3} \\ \text{Sym} & & \frac{1}{\mu_0 T} \mathbb{I}_3 \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_0^{II,II} = \begin{bmatrix} \check{d}_r^e - \frac{1}{\Sigma_\rho} \check{v}_r^e \otimes \check{v}_r^e & 0_{n^s-1,3} & 0_{n^s-1,1} \\ & \frac{\rho}{T} \mathbb{I}_3 & 0_{3,1} \\ \text{Sym} & & \frac{\rho c_v}{T^2} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.83})$$

En considérant $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$, un vecteur quelconque de $\mathbb{R}^3$, les matrices $\bar{A}_i$, $i \in C$, sont données par

$$\sum_{i \in C} \bar{A}_i \xi_i = \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}}{\Sigma_\rho} & 0_{1,3} & 0_{1,3} & 0_{1,n^s-1} & \frac{\rho}{\Sigma_\rho} \boldsymbol{\xi}^T & 0_{1,1} \\ & 0_{3,3} & -\frac{1}{\mu_0 T} \mathbf{R}(\boldsymbol{\xi}) & 0_{3,n^s-1} & 0_{3,3} & 0_{3,1} \\ & & 0_{3,3} & 0_{3,n^s-1} & 0_{3,3} & 0_{3,1} \\ & & & (\check{d}_r^e - \frac{1}{\Sigma_\rho} \check{v}_r^e \otimes \check{v}_r^e) \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} & \check{\varrho} \otimes \boldsymbol{\xi} - \frac{\rho}{\Sigma_\rho} \check{v}_r^e \otimes \boldsymbol{\xi} & 0_{n^s-1,1} \\ & & & & \frac{\rho \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}}{T} \mathbb{I} & \frac{nR}{T} \boldsymbol{\xi} \\ \text{Sym} & & & & & \frac{\rho c_v}{T} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \end{bmatrix}, \quad (\text{II.84})$$

avec $\check{\varrho} = (\rho_2, \dots, \rho_{n^s})^T$.

En ce qui concerne les matrices $\bar{B}_{ij}$, $i, j \in C$, on utilise la décomposition des matrices $\bar{B}_{ij}$, $i, j \in C$, pour écrire $\bar{B}_{ij} = \bar{B}_{ij}^{\text{diff}} + \bar{B}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in C$. En notant $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)^T$ et $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3)^T$ des vecteurs quelconques de $\mathbb{R}^3$, les matrices de diffusion $\bar{B}_{ij}^{\text{diff}}$, $i, j \in C$, sont données par

$$\sum_{i,j \in C} \bar{B}_{ij}^{\text{diff}} \xi_i \zeta_j = \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta} \bar{B}^\parallel + (\boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} - \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\zeta}) \bar{B}^\perp + \boldsymbol{\xi}^T \mathbf{R}(\mathcal{B}) \boldsymbol{\zeta} \bar{B}^\odot, \quad (\text{II.85})$$

où les matrices $\bar{\mathbf{B}}^{\parallel}$, $\bar{\mathbf{B}}^{\perp}$ et $\bar{\mathbf{B}}^{\odot}$ ont la structure blocs donnée à la propriété (Nor₁). Un calcul explicite fournit alors l'expression

$$\bar{\mathbf{B}}^{\diamond, \text{II}, \text{II}} = \frac{T}{p} \begin{bmatrix} \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\diamond} & 0_{n^s-1, 3} & \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \text{e}}^{\diamond} \\ 0_{3, n^s-1} & 0_{3, 3} & 0_{3, 1} \\ \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \varrho}^{\diamond} & 0_{1, 3} & \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \text{e}}^{\diamond} \end{bmatrix}, \quad \diamond \in \{\parallel, \perp, \odot\}, \quad (\text{II.86})$$

où les coefficients correspondant à $\diamond = \parallel$ s'écrivent

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\parallel} &= \check{\mathbb{I}} D_{\varrho}^{\parallel} \check{\mathbb{I}}^{\text{T}}, \\ \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \text{e}}^{\parallel} &= \check{\mathbb{I}} D_{\varrho}^{\parallel} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right), \\ \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \varrho}^{\parallel} &= \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right)^{\text{T}} D_{\varrho}^{\parallel} \check{\mathbb{I}}^{\text{T}}, \\ \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \text{e}}^{\parallel} &= \frac{p}{T^3} \lambda^{\parallel} + \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right)^{\text{T}} D_{\varrho}^{\parallel} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\parallel} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right), \end{aligned}$$

ceux avec $\diamond = \perp$ sont donnés par

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\perp} &= \check{\mathbb{I}} D_{\varrho}^{\perp} \check{\mathbb{I}}^{\text{T}}, \\ \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \text{e}}^{\perp} &= \check{\mathbb{I}} \left[D_{\varrho}^{\perp} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) - \frac{1}{T^2} D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} \right], \\ \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \varrho}^{\perp} &= \left[\left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right)^{\text{T}} D_{\varrho}^{\perp} - \frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot \text{T}} D_{\varrho}^{\odot} \right] \check{\mathbb{I}}^{\text{T}}, \\ \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \text{e}}^{\perp} &= \frac{p}{T^3} \lambda^{\perp} + \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right)^{\text{T}} D_{\varrho}^{\perp} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) \\ &\quad - \frac{1}{T^4} \left(\boldsymbol{\varkappa}^{\odot \text{T}} D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} + \boldsymbol{\varkappa}^{\odot \text{T}} D_{\varrho}^{\odot} (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + T\mathbf{r}) + (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + T\mathbf{r})^{\text{T}} D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} \right), \end{aligned}$$

et ceux avec $\diamond = \odot$ par

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \varrho}^{\odot} &= \check{\mathbb{I}} D_{\varrho}^{\odot} \check{\mathbb{I}}^{\text{T}}, \\ \bar{\mathbf{B}}_{\varrho, \text{e}}^{\odot} &= \check{\mathbb{I}} \left[D_{\varrho}^{\odot} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) + \frac{1}{T^2} D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} \right], \\ \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \varrho}^{\odot} &= \left[\left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right)^{\text{T}} D_{\varrho}^{\odot} + \frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot \text{T}} D_{\varrho}^{\perp} \right] \check{\mathbb{I}}^{\text{T}}, \\ \bar{\mathbf{B}}_{\text{e}, \text{e}}^{\odot} &= \frac{p}{T^3} \lambda^{\odot} + \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right)^{\text{T}} D_{\varrho}^{\odot} \left(\frac{1}{T^2} \boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + \frac{1}{T} \mathbf{r} \right) \\ &\quad + \frac{1}{T^4} \left(-\boldsymbol{\varkappa}^{\odot \text{T}} D_{\varrho}^{\odot} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} + \boldsymbol{\varkappa}^{\odot \text{T}} D_{\varrho}^{\perp} (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + T\mathbf{r}) + (\boldsymbol{\varkappa}^{\perp} + T\mathbf{r})^{\text{T}} D_{\varrho}^{\perp} \boldsymbol{\varkappa}^{\odot} \right), \end{aligned}$$

où l'on a introduit la matrice rectangulaire $\check{\mathbb{I}}$ de taille $(n^s-1) \times n^s$ définie par blocs par $\check{\mathbb{I}} = [0_{n^s-1, 1} \ \mathbb{I}_{n^s-1, n^s-1}]$. Les matrices de viscosité $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in \text{C}$, sont données par

$$\sum_{i, j \in \text{C}} \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}} \xi_i \zeta_j = \kappa \bar{\mathbf{B}}^{\kappa}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}) + \sum_{\alpha=1}^5 \eta_{\alpha} \bar{\mathbf{B}}^{\eta_{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\zeta}), \quad (\text{II.87})$$

où les matrices $\overline{\mathbf{B}}^\kappa$, $\overline{\mathbf{B}}^{\eta_1}$, $\overline{\mathbf{B}}^{\eta_2}$, $\overline{\mathbf{B}}^{\eta_3}$, $\overline{\mathbf{B}}^{\eta_4}$ et $\overline{\mathbf{B}}^{\eta_5}$ ont la structure donnée à la propriété (Nor₁) et vérifient

$$\overline{\mathbf{B}}^\Delta(\xi, \zeta) = \frac{1}{T} \begin{bmatrix} 0_{n^s-1, n^s-1} & 0_{n^s-1, 3} & 0_{n^s-1, 1} \\ 0_{3, n^s-1} & \overline{\mathbf{B}}_v^\Delta(\xi, \zeta) & 0_{3, 1} \\ 0_{1, n^s-1} & 0_{1, 3} & 0 \end{bmatrix}, \quad \Delta \in \{\kappa, \eta_1, \dots, \eta_5\}. \quad (\text{II.88})$$

Les expressions de ces matrices sont données par

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{B}}_v^\kappa(\xi, \zeta) &= \xi \otimes \zeta, \\ \overline{\mathbf{B}}_v^{\eta_1}(\xi, \zeta) &= \xi \cdot \zeta \mathbb{I} + \zeta \otimes \xi - \frac{2}{3} \xi \otimes \zeta, \\ \overline{\mathbf{B}}_v^{\eta_2}(\xi, \zeta) &= 2\xi \cdot \zeta \mathbf{R}(\mathcal{B}) + \mathbf{R}(\xi) \mathbf{R}(\mathcal{B}) \mathbf{R}(\zeta) + 2\xi^\top \mathbf{R}(\mathcal{B}) \zeta \mathbb{I}, \\ \overline{\mathbf{B}}_v^{\eta_3}(\xi, \zeta) &= 2\mathcal{B} \cdot \xi \mathcal{B} \cdot \zeta \mathcal{B} \otimes \mathcal{B} - \frac{2}{3} \xi \otimes \zeta + 2\mathbf{R}(\mathcal{B}) \zeta \otimes \xi \mathbf{R}(\mathcal{B}) - \mathbf{R}(\mathcal{B}) \xi \otimes \zeta \mathbf{R}(\mathcal{B}), \\ \overline{\mathbf{B}}_v^{\eta_4}(\xi, \zeta) &= \mathcal{B} \cdot \xi \mathcal{B} \cdot \zeta (\mathbb{I} - 4\mathcal{B} \otimes \mathcal{B}) + \xi \cdot \zeta \mathcal{B} \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B} \cdot \xi \zeta \otimes \mathcal{B} + \mathcal{B} \cdot \zeta \mathcal{B} \otimes \xi, \\ \overline{\mathbf{B}}_v^{\eta_5}(\xi, \zeta) &= -2\mathcal{B} \cdot \xi \mathcal{B} \cdot \zeta \mathbf{R}(\mathcal{B}) - \mathbf{R}(\xi) \mathbf{R}(\mathcal{B}) \mathbf{R}(\zeta) - 2\xi^\top \mathbf{R}(\mathcal{B}) \zeta \mathcal{B} \otimes \mathcal{B}. \end{aligned}$$

Finalement, on obtient immédiatement que les matrices $\overline{\mathbf{A}}_0(\mathbf{W}), \overline{\mathbf{A}}_i(\mathbf{W}), \overline{\mathbf{A}}_i^e$, $i \in \mathbf{C}$, $\overline{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{W})$, $i, j \in \mathbf{C}$, et les vecteurs $\overline{\Omega}(\mathbf{W}), \overline{\mathcal{T}}(\mathbf{W}, \partial_x \mathbf{W})$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ en utilisant le $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme $\mathbf{V} \mapsto \mathbf{W}$ et la proposition II.9. ■

Proposition II.13

Le système (II.81) peut se décomposer selon le vecteur des variables hyperboliques $\mathbf{W}_I$ et le vecteur des variables paraboliques $\mathbf{W}_{II}$ en deux sous-systèmes couplés.

$$\begin{cases} \overline{\mathbf{A}}_0^{I,I} \partial_t \mathbf{W}_I = - \sum_{i \in \mathbf{C}} \overline{\mathbf{A}}_i^{I,I} \partial_i \mathbf{W}_I + \overline{\Gamma}_I, \\ \overline{\mathbf{A}}_0^{II,II} \partial_t \mathbf{W}_{II} = - \sum_{i \in \mathbf{C}} \left(\overline{\mathbf{A}}_i^{II,I} + \overline{\mathbf{A}}_i^{eII,I} \right) \partial_i \mathbf{W}_I + \sum_{i,j \in \mathbf{C}} \partial_i \left(\overline{\mathbf{B}}_{ij}^{II,II} \partial_j \mathbf{W}_{II} \right) + \overline{\Gamma}_{II}, \end{cases} \quad (\text{II.89})$$

où

$$\overline{\Gamma}_I = \overline{\Omega}_I - \sum_{i \in \mathbf{C}} (\overline{\mathbf{A}}_i^{eI,II} + \overline{\mathbf{A}}_i^{I,II}) \partial_i \mathbf{W}_{II}, \quad \overline{\Gamma}_{II} = \overline{\Omega}_{II} + \overline{\mathcal{T}}_{II} - \sum_{i \in \mathbf{C}} (\overline{\mathbf{A}}_i^{eII,II} + \overline{\mathbf{A}}_i^{II,II}) \partial_i \mathbf{W}_{II}.$$

Le premier système est quasilinéaire hyperbolique symétrique en la variable $\mathbf{W}_I$ et le second quasilinéaire fortement parabolique en la variable $\mathbf{W}_{II}$. De plus, les coefficients matriciels $\overline{\mathbf{A}}_0^{I,I}(\mathbf{W})$, $\overline{\mathbf{A}}_0^{II,II}(\mathbf{W})$, $\overline{\mathbf{A}}_i^{I,I}(\mathbf{W})$, $\overline{\mathbf{A}}_i^{II,I}(\mathbf{W})$, $\overline{\mathbf{A}}_i^{eII,I}(\mathbf{W})$, $i \in \mathbf{C}$, et $\overline{\mathbf{B}}_{ij}^{II,II}(\mathbf{W})$, $i, j \in \mathbf{C}$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{W} \in \mathcal{O}_W$ et les coefficients vectoriels $\overline{\Gamma}_I(\mathbf{W}, \partial_x \mathbf{W}_{II})$ et $\overline{\Gamma}_{II}(\mathbf{W}, \partial_x \mathbf{W}_{II})$ des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{W} \in \mathcal{O}_W$ et de $\partial_x \mathbf{W}_{II} \in \mathbb{R}^{3(n^s+3)}$.

Preuve - II.13 -

La preuve est une application directe du théorème II.12. ■

II.5.3 Théorème d'existence

On applique finalement le théorème II.6 au système modélisant les mélanges multiespèces réactifs ionisés et magnétisés pour obtenir un théorème d'existence local.

Théorème II.14 (Existence locale)

On considère le problème de Cauchy constitué de l'équation (II.89) dans $\mathbb{R}^3$

$$\begin{cases} \bar{A}_0^{I,I} \partial_t W_I = - \sum_{i \in C} \bar{A}_i^{I,I} \partial_i W_I + \bar{\Gamma}_I, \\ \bar{A}_0^{II,II} \partial_t W_{II} = - \sum_{i \in C} \left(\bar{A}_i^{II,I} + \bar{A}_i^{eII,I} \right) \partial_i W_I + \sum_{i,j \in C} \partial_i \left(\bar{B}_{ij}^{II,II} \partial_j W_{II} \right) + \bar{\Gamma}_{II}, \end{cases} \quad (\text{II.89})$$

et de la condition initiale

$$W(0, \mathbf{x}) = W^0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^3, \quad (\text{II.90})$$

où $W^0 \in V_l(\mathbb{R}^3)$, $l > 9/2$, $\inf_{\mathbb{R}^3} \rho^0 > 0$ et $\inf_{\mathbb{R}^3} T^0 > 0$.

Il existe alors un temps $t_0 > 0$, tel que le problème de Cauchy (II.89), (II.90) admet une unique solution $W = (W_I^T, W_{II}^T)^T$ avec $W(t, \mathbf{x}) \in \mathcal{O}_W$ définie sur le domaine $\bar{Q}_{t_0} = [0, t_0] \times \mathbb{R}^3$, continue dans $\bar{Q}_{t_0}$ ainsi que ses dérivées du premier ordre en t et du second ordre en $\mathbf{x}$, et pour laquelle les inégalités suivantes sont vérifiées

$$\sup_{0 \leq t \leq t_0} \left[\|\rho(t)\|_l + \sum_{k=2}^{n^s} \left\| \log \frac{\rho_k^{r_k}}{\rho_1^{r_1}}(t) \right\|_l + \sum_{i \in C} (\|v_i(t)\|_l + \|E_i(t)\|_l + \|B_i(t)\|_l) + \|T(t)\|_l \right] < +\infty,$$

$$\inf_{\bar{Q}_{t_0}} \rho(t, \mathbf{x}) > 0, \quad \inf_{\bar{Q}_{t_0}} T(t, \mathbf{x}) > 0,$$

$$\sup_{0 \leq t \leq t_0} \left[\|\partial_t \rho(t)\|_{l-1} + \sum_{i \in C} (\|\partial_t E_i(t)\|_{l-1} + \|\partial_t B_i(t)\|_{l-1}) \right] < +\infty,$$

$$\begin{aligned} \int_0^{t_0} \left[\sum_{k=2}^{n^s} \left\| \partial_t \log \frac{\rho_k^{r_k}}{\rho_1^{r_1}}(\tau) \right\|_{l-1}^2 + \sum_{i \in C} \|\partial_t v_i(\tau)\|_{l-1}^2 + \|\partial_t T(\tau)\|_{l-1}^2 + \right. \\ \left. \sum_{k=2}^{n^s} \left\| \log \frac{\rho_k^{r_k}}{\rho_1^{r_1}}(\tau) \right\|_{l+1}^2 + \sum_{i \in C} \|v_i(\tau)\|_{l+1}^2 + \|T(\tau)\|_{l+1}^2 \right] d\tau < +\infty. \end{aligned}$$

De plus, soit t_0 est aussi grand que l'on veut, soit il existe un temps t_1 tel que le théorème est vrai pour tout $t_0 < t_1$ et tel que lorsque $t_0 \rightarrow t_1^-$, la quantité

$$\begin{aligned} \|\rho(t_0)\|_{1,\infty} + \sum_{k=2}^{n^s} \left\| \log \frac{\rho_k^{r_k}}{\rho_1^{r_1}}(t_0) \right\|_{2,\infty} + \|T(t_0)\|_{2,\infty} \\ + \sum_{i \in C} \left(\|v_i(t_0)\|_{2,\infty} + \|E_i(t_0)\|_{1,\infty} + \|B_i(t_0)\|_{1,\infty} \right), \quad (\text{II.91}) \end{aligned}$$

ou la quantité $\sup_{\bar{Q}_{t_0}} 1/T$ n'est pas bornée.

La preuve de ce théorème repose sur l'étude théorique qui a été effectuée à la section II.4.2 et en particulier sur le théorème d'existence locale pour le système abstrait II.6 [VH72]. Il faut uniquement vérifier les nombreuses hypothèses de ce théorème après avoir défini la fonction $\mathcal{L}$ par $\mathcal{L}(\mathbf{W}_I, \mathbf{W}_{II}) = 1/\rho + 1/T$. De plus, on prouve que $\inf_{\mathbb{R}^3} \rho(t, \mathbf{x}) > 0$ tant que la quantité (II.91) reste finie, c'est-à-dire que seule la température T peut atteindre la borne de $\mathcal{O}_W$.

Preuve - II.14 -

On considère dans un premier temps que la viscosité volumique κ est strictement positive et non pas positive ou nulle (Tr_2).

On définit la fonction $\mathcal{L}$ par $\mathcal{L}(\mathbf{W}_I, \mathbf{W}_{II}) = 1/\rho + 1/T$. Comme on suppose que la condition initiale $\mathbf{W}^0$ vérifie $\mathbf{W}^0 \in V_l(\mathbb{R}^3)$, $\inf_{\mathbb{R}^3} \rho^0 > 0$ et $\inf_{\mathbb{R}^3} T^0 > 0$, on obtient immédiatement que la propriété (Ex_1) est vérifiée. La proposition II.13 implique clairement que les propriétés (Ex_2 - Ex_4) et (Ex_7) concernant la régularité des matrices et des vecteurs sont satisfaites. De plus, les propriétés (Ex_5 - Ex_6) concernant la symétrie des matrices $\bar{\mathbf{A}}_0^{I,I}$, $\bar{\mathbf{A}}_0^{II,II}$ et $\bar{\mathbf{A}}_i^{I,I}$, $i \in C$, sont obtenues en utilisant les propriétés (S_1 - S_2) du théorème II.12.

Pour montrer que la propriété (Ex_8) est satisfaite, on considère une fonction ϕ_{II} de $W_2^1(\mathbb{R}^3)$ écrite sous la forme $\phi_{II} = (\phi^e, \phi^v, \phi^T)^T$, avec $\phi^e \in \mathbb{R}^{n^s-1}$, indexé à partir de 2, c'est à dire que l'on a $\phi^e = (\phi_2^e, \dots, \phi_{n^s}^e)^T$, $\phi^v \in \mathbb{R}^3$ et $\phi^T \in \mathbb{R}$. En ce qui concerne la partie diffusive des matrices $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{II,II}$, $i, j \in S$, on obtient après quelques calculs

$$\sum_{i,j \in C} (\partial_i \phi_{II})^T \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}, II, II} (\partial_j \phi_{II}) = \frac{p}{T} \psi^{\parallel T} A^{\parallel} \psi^{\parallel} + \frac{p}{T} \sum_{k \in C} \psi_k^{\perp T} A^{\perp} \psi_k^{\perp},$$

où les vecteurs $\psi^\parallel$ et $\psi_k^\perp$ sont définis par

$$\begin{aligned}\psi^\parallel &= \sum_{i \in \mathbb{C}} \mathcal{B} \cdot \mathbf{e}_i \partial_i \phi^d, \\ \psi_k^\perp &= \sum_{i \in \mathbb{C}} (\mathbf{e}_i - \mathcal{B} \cdot \mathbf{e}_i \mathcal{B}) \cdot \mathbf{e}_k \partial_i \phi^d,\end{aligned}$$

avec le vecteur ϕ^d défini par $\phi^d = \left(\frac{1}{T} \phi^T, 0, \frac{T}{p} \rho_2 (\phi_2^o + \frac{r_2}{T} \phi^T), \dots, \frac{T}{p} \rho_{n^s} (\phi_{n^s}^o + \frac{r_{n^s}}{T} \phi^T) \right)^T$, et où la famille $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ est la base canonique de $\mathbb{R}^3$. On utilise alors l'hypothèse (Tr_3) sur les propriétés de positivité des matrices $A^\parallel$ et $A^\perp$. Comme la deuxième composante du vecteur ϕ^d est nulle, ϕ^d n'est proportionnel au vecteur $(0, \varrho^T)^T$ que si $\phi^d = 0$, ce qui permet d'obtenir les inégalités

$$\begin{aligned}\sum_{i,j \in \mathbb{C}} (\partial_i \phi_\Pi)^T \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}, \Pi, \Pi} (\partial_j \phi_\Pi) &\geq \alpha \sum_{k \in \mathbb{C}} \left[\left| \mathbf{e}_k \cdot (\partial_{\mathbf{x}} \phi^T)^\parallel \right|^2 + \left| \mathbf{e}_k \cdot (\partial_{\mathbf{x}} \phi^T)^\perp \right|^2 \right] \\ &\quad + \alpha \sum_{l=1}^{n^s} \sum_{k \in \mathbb{C}} \left[\left| \mathbf{e}_k \cdot (\partial_{\mathbf{x}} \phi_l^o)^\parallel \right|^2 + \left| \mathbf{e}_k \cdot (\partial_{\mathbf{x}} \phi_l^o)^\perp \right|^2 \right],\end{aligned}$$

et enfin

$$\sum_{i,j \in \mathbb{C}} (\partial_i \phi_\Pi)^T \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}, \Pi, \Pi} (\partial_j \phi_\Pi) \geq \alpha \left(|\partial_{\mathbf{x}} \phi^T|^2 + \sum_{l=2}^{n^s} |\partial_{\mathbf{x}} \phi_l^o|^2 \right), \quad (\text{II.92})$$

uniformément pour $\mathbf{W}$ dans un compact de $\mathcal{O}_W$. Concernant la partie visqueuse des matrices $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\Pi, \Pi}$, $i, j \in \mathbb{C}$, on obtient la relation

$$\begin{aligned}\sum_{i,j \in \mathbb{C}} (\partial_i \phi_\Pi)^T \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}, \Pi, \Pi} (\partial_j \phi_\Pi) &= \frac{\kappa}{T} \left[\sum_{i \in \mathbb{C}} \mathbf{e}_i \cdot \partial_i \phi^v \right]^2 + \frac{\eta_1 + \eta_3}{3T} \left[\sum_{i \in \mathbb{C}} \left(\mathbf{e}_i \cdot (\partial_i \phi^v) - 3\mathbf{e}_i^\parallel \cdot (\partial_i \phi^v)^\parallel \right) \right]^2 \\ &\quad + \frac{\eta_1 - \eta_3}{T} \left[\left[\sum_{i \in \mathbb{C}} \mathbf{e}_i^\perp \cdot (\partial_i \phi^v)^\perp \right]^2 + \left[\sum_{i \in \mathbb{C}} \mathbf{e}_i^\perp \cdot (\partial_i \phi^v)^\odot \right]^2 - 2 \sum_{i,j \in \mathbb{C}} \left(\mathbf{e}_i^\perp \cdot \mathbf{e}_j^\odot (\partial_i \phi^v)^\perp \cdot (\partial_j \phi^v)^\odot \right) \right] \\ &\quad + \frac{\eta_1 + \eta_4}{T} \left[\sum_{i \in \mathbb{C}} (\mathcal{B} \cdot \mathbf{e}_i (\partial_i \phi^v)^\perp + \mathcal{B} \cdot \partial_i \phi^v \mathbf{e}_i^\perp) \cdot \left[\sum_{j \in \mathbb{C}} (\mathcal{B} \cdot \mathbf{e}_j (\partial_j \phi^v)^\perp + \mathcal{B} \cdot \partial_j \phi^v \mathbf{e}_j^\perp) \right] \right].\end{aligned}$$

Pour montrer que cette quantité est minorée, on utilise l'invariance par changement de repères orthonormés et on choisit un repère orthonormé $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ tel que $\mathcal{B} = \mathbf{e}_1$. On obtient alors la relation

$$\begin{aligned}\sum_{i,j \in \mathbb{C}} (\partial_i \phi_\Pi)^T \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}, \Pi, \Pi} (\partial_j \phi_\Pi) &= \frac{\kappa}{T} (\partial_{\mathbf{x}} \cdot \phi^v)^2 + \frac{\eta_1 + \eta_4}{T} \left[(\mathbf{S}_{12}^\phi)^2 - (\mathbf{S}_{13}^\phi)^2 \right] \\ &\quad + \frac{3}{4} \frac{\eta_1 + \eta_3}{T} (\mathbf{S}_{11}^\phi)^2 + \frac{\eta_1 - \eta_3}{T} \left[\frac{1}{4} (\mathbf{S}_{22}^\phi - \mathbf{S}_{33}^\phi)^2 + (\mathbf{S}_{23}^\phi)^2 \right],\end{aligned}$$

où le tenseur $\mathbf{S}^\phi$ est défini par $\mathbf{S}^\phi = \partial_{\mathbf{x}}\phi^{\mathbf{v}} + (\partial_{\mathbf{x}}\phi^{\mathbf{v}})^{\mathsf{T}} - \frac{2}{3}(\partial_{\mathbf{x}} \cdot \phi^{\mathbf{v}})\mathbb{I}$. D'après l'hypothèse (Tr_2) sur la stricte positivité de $\eta_1 + \eta_4$, $\eta_1 + \eta_3$, $\eta_1 - \eta_3$, et en supposant la stricte positivité de κ , on a l'inégalité

$$\sum_{i,j \in \mathbf{C}} (\partial_i \phi_{\Pi})^{\mathsf{T}} \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}, \Pi, \Pi} (\partial_j \phi_{\Pi}) \geq \alpha \sum_{i,j \in \mathbf{C}} (\partial_i \phi_j^{\mathbf{v}} + \partial_j \phi_i^{\mathbf{v}})^2, \quad (\text{II.93})$$

uniformément pour $\mathbf{W}$ dans un compact de $\mathcal{O}_{\mathbf{W}}$. En combinant les estimations (II.92) et (II.93) avec l'identité

$$\int \sum_{i,j \in \mathbf{C}} (\partial_i \phi_j^{\mathbf{v}} + \partial_j \phi_i^{\mathbf{v}})^2 d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \int \sum_{i,j \in \mathbf{C}} (\partial_i \phi_j^{\mathbf{v}})^2 d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int \left(\sum_{i \in \mathbf{C}} \partial_i \phi_i^{\mathbf{v}} \right)^2 d\mathbf{x},$$

valide pour $\phi_i^{\mathbf{v}} \in W_2^1(\mathbb{R}^d)$, $i \in \mathbf{C}$, on obtient la propriété (Ex_8) .

Finalement, on observe que d'après l'équation de conservation de la masse ρ , obtenue en sommant les équations de conservation des masses des espèces (II.1), on a l'inégalité suivante

$$\rho(t, \mathbf{x}) \geq \inf_{\mathbb{R}^3} \rho^0(\mathbf{x}) \exp \left[- \int_0^t \|\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}(s)\|_{0,\infty} ds \right],$$

et donc $\inf_{\mathbb{R}^3} \rho(t, \mathbf{x}) > 0$ tant que la quantité (II.91) reste finie, c'est-à-dire que seule la température T peut atteindre les bords de $\mathcal{O}_{\mathbf{W}}$.

On s'intéresse à présent au cas où la viscosité volumique κ est seulement une fonction positive ou nulle. On va modifier l'équation de manière à ce ramener au cas précédent. On introduit le tenseur symétrique $\tilde{\mathbf{S}} = \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + (\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v})^{\mathsf{T}}$. On peut alors écrire

$$\sum_{i,j \in \mathbf{C}} \partial_i \left(\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}, \Pi, \Pi} \partial_j \mathbf{W}_{\Pi} \right) = (0_{1,n^s-1}, \Upsilon_{\mathbf{v}}, 0)^{\mathsf{T}},$$

où $\Upsilon_{\mathbf{v}}$ est définie par

$$\begin{aligned} \Upsilon_{\mathbf{v}} = & \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\frac{\eta_1 + \eta_3}{2T} (\tilde{\mathbf{S}} - \tilde{\mathbf{S}} M^{\parallel} - M^{\parallel} \tilde{\mathbf{S}} + 3M^{\parallel} \tilde{\mathbf{S}} M^{\parallel} - M^{\odot} \tilde{\mathbf{S}} M^{\odot}) + \frac{\kappa - \frac{2}{3}(\eta_1 + \eta_3)}{T} \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} \mathbb{I} \right] \\ & + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\frac{\eta_1 - \eta_3}{2T} (\tilde{\mathbf{S}} - \tilde{\mathbf{S}} M^{\parallel} - M^{\parallel} \tilde{\mathbf{S}} + M^{\parallel} \tilde{\mathbf{S}} M^{\parallel} + M^{\odot} \tilde{\mathbf{S}} M^{\odot}) \right] \\ & + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\frac{\eta_1 + \eta_4}{T} (\tilde{\mathbf{S}} M^{\parallel} + M^{\parallel} \tilde{\mathbf{S}} - 2M^{\parallel} \tilde{\mathbf{S}} M^{\parallel}) \right] \\ & + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\frac{\eta_2}{T} (M^{\odot} \tilde{\mathbf{S}} - \tilde{\mathbf{S}} M^{\odot}) \right] + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\frac{\eta_5}{T} (M^{\parallel} \tilde{\mathbf{S}} M^{\odot} - M^{\odot} \tilde{\mathbf{S}} M^{\parallel}) \right]. \end{aligned}$$

Par ailleurs, le premier terme de $\Upsilon_{\mathbf{v}}$ correspondant à $\eta_1 + \eta_3$ et noté $\Upsilon_{\mathbf{v}}^1$ se réécrit sous la forme

$$\begin{aligned} \Upsilon_{\mathbf{v}}^1 = \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\frac{\eta_1 + \eta_3}{2T} (\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} - \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} M^{\parallel} - M^{\parallel} \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + 3M^{\parallel} \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} M^{\parallel} - M^{\odot} \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} M^{\odot}) \right] \\ + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \left[\frac{\kappa + \frac{1}{6}(\eta_1 + \eta_3)}{T} \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v} \mathbb{I} \right] + \tilde{\Upsilon}_{\mathbf{v}}^1, \end{aligned}$$

où $\tilde{\Upsilon}_{\mathbf{v}}^1$ est une fonction de W_{II} et de $\partial_{\mathbf{x}} W_{\text{II}}$. Il est donc possible de modifier les matrices $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc, II, II}}$ et de compenser ces modifications grâce au vecteur $\bar{\Gamma}_{\text{II}}$. On est donc ramené au cas où κ est strictement positif, ce qui termine la preuve. ■

Références bibliographiques

Chapitre II

- [CC70] S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge Mathematical Library, third ed., 1970.
- [FK72] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [GG] V. Giovangigli and B. Graille, “The local Cauchy Problem for Ionized Magnetized Gas Mixtures”, *Math. Meth. Appl. Sci.* submitted.
- [GG03] ———, “Kinetic theory of partially ionized reactive gas mixtures”, *Physica A* **327** (2003), pp. 313–348.
- [Gio99] V. Giovangigli, *Multicomponent Flow Modeling*, Birkhäuser, 1999.
- [GM98] V. Giovangigli and M. Massot, “The Local Cauchy Problem for Multicomponent Reactive Flows in Full Vibrational Non-equilibrium”, *Math. Meth. Appl. Sci.* **21** (1998), pp. 1415–1469.
- [God62] S.K. Godunov, “The problem of a generalized solution in the theory of quasilinear equations and in gas dynamics”, *Russian Math. Survey* **17** (1962), pp. 145–156.
- [Kaw84] S. Kawashima, *Systems of a Hyperbolic-Parabolic Composite Type, with Applications to the equations of Magnetohydrodynamics*, Doctoral thesis, Kyoto University, 1984.
- [KS88] S. Kawashima and Y. Shizuta, “On the normal form of the symmetric hyperbolic-parabolic systems associated with the conservation laws”, *Tôhoku Math. J.* **40** (1988), pp. 449–464.
- [Moc80] M. Mock, “Systems of conservation laws of mixed type”, *J. Diff. Eq.* **37** (1980), pp. 70–88.
- [VH72] A.I. Vol’Pert and S.I. Hudjaev, “On the Cauchy Problem for composite systems of Nonlinear Differential Equations”, *Math USSR Sbornik.* **16** (1972), pp. 517–544.

- [VH85] ———, *Analysis in classes of discontinuous functions and equations of mathematical physics*, Mechanics Analysis 8, 1985.

Stabilité asymptotique des états d'équilibre pour les plasmas ambipolaires

Ce chapitre reprend et détaille un article paru dans la revue *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, volume 14, numéro 9 (2004), pages 1361–1399.

Résumé

On étudie un système d'équations aux dérivées partielles modélisant les plasmas ambipolaires. Le modèle ambipolaire—ou du courant nul—est obtenu à partir des équations des plasmas généraux sans champ magnétique lorsque la longueur de Debye tend vers zéro. Dans ce modèle, le champ électrique est exprimé sous la forme d'une combinaison linéaire des gradients des variables macroscopiques. On établit que les équations gouvernant ce modèle peuvent s'écrire sous une forme symétrique en utilisant les variables entropiques. Les matrices de dissipation correspondantes satisfont la propriété d'invariance des noyaux et le système d'équations aux dérivées partielles peut être écrit sous forme normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système composite symétrique hyperbolique-parabolique. En modifiant convenablement les termes sources chimiques et/ou les matrices de diffusion, on établit la stabilité asymptotique des états d'équilibre et on obtient des estimations de décroissance. On établit également que la solution globale est continue vis-à-vis de la masse de l'électron lorsque celle-ci s'annule.

III.1 Introduction

Les équations gouvernant les plasmas froids à haute densité peuvent être dérivées de la théorie cinétique des mélanges gazeux ionisés comme on l'a vu dans le chapitre I. Différents systèmes peuvent être obtenus selon les longueurs et temps caractéristiques des phénomènes étudiés. L'approximation ambipolaire est une approximation souvent utilisée dans la modélisation des plasmas de laboratoire ainsi que dans celle des plasmas spatiaux. Elle est obtenue en faisant tendre la longueur de Debye vers zéro [DBD97, RC93]. Le modèle correspondant est un modèle quasi-neutre où la densité de courant de conduction est prise nulle. Dans le cadre de cette approximation, il n'y a pas de champ magnétique et le champ électrique (interne) est éliminé grâce à la contrainte du courant nul. En effet, le champ électrique peut s'exprimer comme une combinaison linéaire des gradients des variables macroscopiques et les flux de transport résultants nécessitent de nouveaux coefficients de transport effectifs.

Les équations gouvernant les mélanges réactifs de gaz ionisés pour la limite ambipolaire constituent un système quasi-linéaire de lois de conservation du second ordre. La stabilité asymptotique des états d'équilibre pour ce système quasi-linéaire d'équations aux dérivées partielles est en elle-même une question importante. Cependant, le système dépend également de nombreux paramètres physiques comme la conductivité thermique et les constantes de réaction chimique.

Un de ces paramètres, souvent utilisé dans la modélisation physique, est la masse de l'électron, qui est habituellement prise nulle. Afin d'étudier cette limite, on doit s'intéresser à la dépendance des coefficients du système en la masse de l'électron car les diffusivités des électrons deviennent infinies lorsque la masse de l'électron tend vers zéro. Pour cela, on explicite la dépendance des matrices de diffusion multiespèces en les coefficients de diffusion binaires et on établit la régularité des coefficients effectifs du système vis-à-vis de la masse de l'électron.

On considère ensuite un système abstrait de lois de conservation qui dépend de façon régulière d'un paramètre. On étudie la symétrisabilité, la stabilité asymptotique des états d'équilibre et la continuité de la solution comme fonction de ce paramètre. On démontre tout d'abord la continuité de la solution locale en temps, puis celle de la solution globale en temps autour des états d'équilibre pour des normes appropriées. Des estimations de décroissance indépendantes du paramètre sont alors établies.

On applique alors ces résultats au système d'équations aux dérivées partielles modélisant les plasmas ambipolaires. On établit tout d'abord que le système se récrit dans une forme symétrique et qu'il admet une entropie au sens mathématique [Kaw84, KS88]. Les matrices de dissipation résultantes satisfont alors la propriété

d'invariance des noyaux introduite par Kawashima [Kaw84]. On écrit ensuite le système d'équations aux dérivées partielles sous une forme normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système composite hyperbolique-parabolique symétrique avec deux composantes hyperboliques, dont les coefficients sont réguliers en la masse de l'électron.

La structure et les propriétés des équations dans la limite ambipolaire sont dans un premier temps insuffisantes pour établir la stabilité asymptotique. On montre alors que le problème n'est qu'artificiel, qu'il est dû à un défaut de propriétés de dissipativité dans l'équation de la charge électrique, cette équation devant garantir que la charge est nulle pour les solutions physiques. On introduit alors deux formes modifiées du système dont les solutions physiques coïncident avec la solution physique du système original. Ces reformulations garantissent la stabilité asymptotique et la continuité des solutions globales en la masse de l'électron.

La première reformulation consiste à modifier les taux de production chimique dans la direction du vecteur charge et orthogonalement aux vecteurs des réactions chimiques. Cela induit un terme de consommation dans l'équation de la charge, ce qui assure suffisamment de dissipativité. Une seconde reformulation est proposée qui a d'intéressantes conséquences numériques : elle consiste à modifier les coefficients de diffusion dans la direction du produit dyadique du vecteur charge.

Dans la première section, on présente le modèle ambipolaire avec les équations de conservation, les expressions des flux de transport, les relations thermodynamiques, les expressions des termes sources chimiques et les hypothèses mathématiques sur les différents coefficients. Une deuxième section est consacrée à l'étude des propriétés des coefficients de transport lorsque la masse de l'électron tend vers zéro. On étudie dans une troisième partie l'existence locale pour un système abstrait dépendant d'un paramètre et dans une quatrième partie l'existence globale et la stabilité asymptotique autour des états d'équilibre. Les cinquième et sixième parties sont consacrées à l'application des théorèmes du système abstrait au système des plasmas ambipolaires et à l'explicitation des formes symétriques et normales.

III.2 Les mélanges gazeux réactifs ambipolaires

On considère un mélange gazeux réactif ionisé composé de n^s espèces chimiques en présence d'un champ électrique en dimension $d \geq 1$. Les équations générales gouvernant de tels mélanges ont été obtenues à partir de la théorie cinétique dans la section I. Elles peuvent se scinder en équations de conservation, expressions des flux de transport, relations thermodynamiques, expressions des taux de production

chimique et sont complétées par les équations de Maxwell pour un champ électrique [FK72, GG03]. Le système complet d'équations aux dérivées partielles est traité dans la section II. Dans le cadre de l'approximation ambipolaire, on simplifie ces équations en utilisant la nullité de la densité de courant de conduction.

III.2.1 Equations de conservation

On note $S = \{1, \dots, n^s\}$ l'ensemble des indices des espèces, n^s le nombre d'espèces dans le mélange, ρ_k la masse par unité de volume de la k^e espèce, γ_k le nombre de moles par unité de volume de la k^e espèce, z_k la charge molaire de la k^e espèce et m_k la masse molaire de la k^e espèce telle que $\rho_k = m_k \gamma_k$. Dans les travaux précédents [GM98] et également dans la section II, on utilise des quantités massiques $(\rho_1, \dots, \rho_{n^s})$ pour décrire l'état du mélange. On utilise ici une formulation molaire $(\gamma_1, \dots, \gamma_{n^s})$, qui est strictement équivalente lorsque les masses molaires des espèces m_k , $k \in S$, sont strictement positives. Toutefois, cette formulation molaire devient indispensable lorsque la masse de l'électron tend vers zéro.

Les équations de conservation molaires des espèces sont obtenues en divisant les équations massiques (I.85a) par les masses molaires m_k pour $k \in S$. Elles s'écrivent

$$\partial_t \gamma_k + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\gamma_k \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\gamma_k \mathbf{V}_k) = \omega_k, \quad k \in S, \quad (\text{III.1a})$$

où $\mathbf{v}$ est la vitesse macroscopique du mélange, $\mathbf{V}_k$ la vitesse de diffusion de la k^e espèce et ω_k le taux molaire de production de la k^e espèce par unité de volume.

En l'absence de champ magnétique, l'équation de conservation de la quantité de mouvement (I.85d) s'écrit sous la forme

$$\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p \mathbb{I}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{\Pi} = q \mathbf{E}, \quad (\text{III.1b})$$

où p est la pression, $\mathbb{I}$ la matrice identité de $\mathbb{R}^d$, $\mathbf{\Pi}$ est le tenseur de viscosité, q la charge volumique totale et $\mathbf{E}$ le champ électrique (interne). On n'ajoute pas pour ce modèle de force extérieure $\mathbf{g}$ pour pouvoir étudier la stabilité asymptotique des solutions qui convergent vers un état d'équilibre chimique.

Finalement, l'équation de conservation de l'énergie (I.85g) devient

$$\partial_t(\mathcal{E} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot ((\mathcal{E} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + p) \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{Q} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v}) = (q \mathbf{E} + \mathbf{j}) \cdot \mathbf{E}, \quad (\text{III.1c})$$

où $\mathcal{E}$ est l'énergie interne par unité de volume, $\mathbf{Q}$ le flux de chaleur et $\mathbf{j}$ la densité de courant de conduction. Dans la suite de ce chapitre, le champ électrique sera éliminé des équations de conservation par l'utilisation de la contrainte ambipolaire.

III.2.2 Flux de transport

En utilisant les expressions des flux de transport données dans le chapitre I en (I.97), (I.107) et (I.115), on obtient les expressions de ces flux en l'absence de champ magnétique. La vitesse de diffusion de la k^e espèce s'écrit

$$\mathbf{V}_k = - \sum_{l \in S} D_{kl} (\mathbf{d}_l + \chi_l \partial_{\mathbf{x}} \log T), \quad k \in S, \quad (\text{III.2})$$

où $\mathbf{d}_k$, $k \in S$, est la force de diffusion de la k^e espèce donnée par

$$\mathbf{d}_k = \frac{1}{p} (\partial_{\mathbf{x}} p_k - \gamma_k \mathbf{z}_k \mathbf{E}).$$

Dans ces relations, D_{kl} , $k, l \in S$, sont les coefficients de diffusion multiespèces, χ_k , $k \in S$, les taux de diffusion thermique, T la température absolue et p_k , $k \in S$, la pression partielle de la k^e espèce. L'expression du flux de chaleur est

$$\mathbf{Q} = -\lambda \partial_{\mathbf{x}} T + \sum_{k \in S} (p \chi_k + \gamma_k H_k) \mathbf{V}_k, \quad (\text{III.3})$$

où H_k , $k \in S$, est l'enthalpie par unité de mole de la k^e espèce et λ la conductivité thermique. Finalement, le tenseur de viscosité est donné par

$$\mathbf{\Pi} = -\kappa (\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \mathbb{I} - \eta \mathbf{S}, \quad (\text{III.4})$$

où $\mathbf{S}$ est le tenseur des taux de déformation, symétrique et à trace nulle,

$$\mathbf{S} = \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^T - \frac{2}{3} (\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \mathbb{I},$$

κ est la viscosité volumique et η la viscosité de cisaillement.

III.2.3 Contrainte du courant nul

Dans les mélanges ionisés, il y a un effet d'écrantage de la force de Coulomb qui s'exerce sur des particules chargées à des distances supérieures à la longueur de Debye. Lorsque la longueur de Debye est petite, le mélange peut être considéré comme quasi-neutre, c'est à dire que la charge globale q est nulle, même si le champ électrique n'est pas nul. Dans le cas où il n'y a pas de champ électrique externe et où la longueur de Debye est petite, il est naturel de supposer que les ions positifs et les électrons diffusent de concert [Bra65, DBD97, RC93], la densité de courant

de conduction disparaissant alors. C'est l'origine de la terminologie ambipolaire et cette approximation est compatible avec l'équation de la charge

$$\partial_t q + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (q \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{j} = 0.$$

En d'autres termes, le champ électrique interne de polarisation assure que la densité de courant de conduction s'annule. Dans cette situation, pourvu que la charge initiale soit nulle, on retrouve que la charge est nulle en tout temps.

On doit à présent éliminer le champ électrique en utilisant la contrainte du courant nul. La densité de courant de conduction, définie par

$$\mathbf{j} = \sum_{k \in S} \kappa_k \gamma_k \mathbf{V}_k,$$

peut se récrire sous la forme

$$\mathbf{j} = \langle \mathbf{q}, \mathbf{V} \rangle,$$

où $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_{n^s})^T$, $q_k = \gamma_k \kappa_k$, $k \in S$, $\mathbf{V} = (\mathbf{V}_1, \dots, \mathbf{V}_{n^s})^T$ et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ représente le produit scalaire entre des vecteurs de $\mathbb{R}^{n^s}$ ou de $(\mathbb{R}^d)^{n^s}$. D'un autre côté, grâce à l'isotropie des processus de diffusion en l'absence de champ magnétique, les relations exprimant les vitesses de diffusion peuvent se récrire sous la forme

$$\mathbf{V} = -D \left(\mathbf{d}^0 + \chi \partial_{\mathbf{x}} \log T + \mathbf{q} \frac{\mathbf{E}}{p} \right),$$

où $D = (D_{kl})_{k,l \in S}$, $\mathbf{d}^0 = (\mathbf{d}_1^0, \dots, \mathbf{d}_{n^s}^0)^T$, $\mathbf{d}_k^0 = (\partial_{\mathbf{x}} p_k)/p$, $k \in S$, et $\chi = (\chi_1, \dots, \chi_{n^s})^T$. Par conséquent, la contrainte $\mathbf{j} = 0$ implique que

$$\frac{\mathbf{E}}{p} = \frac{\langle \mathbf{q}, D(\mathbf{d}^0 + \chi \partial_{\mathbf{x}} \log T) \rangle}{\langle \mathbf{q}, D\mathbf{q} \rangle}.$$

En définissant la matrice carrée $\hat{D} = (\hat{D}_{kl})_{k,l \in S}$ par

$$\hat{D} = D - \frac{(D\mathbf{q}) \otimes (D\mathbf{q})}{\langle \mathbf{q}, D\mathbf{q} \rangle}, \quad (\text{III.5})$$

on obtient aisément l'expression suivante pour le vecteur des vitesses de diffusion

$$\mathbf{V} = -\hat{D}(\mathbf{d}^0 + \chi \partial_{\mathbf{x}} \log T), \quad (\text{III.6})$$

c'est-à-dire que $\mathbf{V}_k = -\sum_{l \in S} \hat{D}_{kl}(\mathbf{d}_l^0 + \chi_l \partial_{\mathbf{x}} \log T)$, $k \in S$. Ces expressions garantissent à présent que la densité de courant de conduction $\mathbf{j}$ est nulle et cela indépendamment des variables d'état et de leurs gradients.

III.2.4 Relations thermodynamiques

On récrit à présent les relations thermodynamiques en variables molaires. Ces propriétés ont été exposées dans le chapitre I en variables massiques.

La pression p , la masse par unité de volume ρ et la charge par unité de volume q peuvent s'écrire

$$p = \sum_{k \in S} RT \gamma_k, \quad \rho = \sum_{k \in S} m_k \gamma_k, \quad q = \sum_{k \in S} \varkappa_k \gamma_k,$$

où m_k , $k \in S$, est la masse par unité de mole de la k^e espèce, $\varkappa_k$, $k \in S$, la charge par unité de mole de la k^e espèce et R la constante des gaz parfaits.

L'énergie interne $\mathcal{E}$ et l'enthalpie $\mathcal{H}$ par unité de volume peuvent se décomposer sous la forme

$$\mathcal{E} = \sum_{k \in S} \gamma_k E_k, \quad \mathcal{H} = \sum_{k \in S} \gamma_k H_k,$$

où E_k , $k \in S$, et $H_k = E_k + RT$, $k \in S$, sont l'énergie interne et l'enthalpie par unité de mole de la k^e espèce et T la température absolue. L'énergie interne molaire E_k a pour expression

$$E_k(T) = E_k^{\text{st}} + \int_{T^{\text{st}}}^T C_{v,k}(\tau) d\tau,$$

où $E_k^{\text{st}} = E_k(T^{\text{st}})$, $k \in S$, est l'énergie de formation molaire de la k^e espèce à la température standard strictement positive T^{st} et $C_{v,k}$ est la chaleur spécifique molaire à volume constant de la k^e espèce.

L'entropie $\mathcal{S}$ et la fonction de Gibbs $\mathcal{G}$ par unité de volume s'expriment en fonction des entropies molaires des espèces S_k , $k \in S$, et des fonctions de Gibbs molaires G_k , $k \in S$, par les relations

$$\mathcal{S} = \sum_{k \in S} \gamma_k S_k, \quad \mathcal{G} = \sum_{k \in S} \gamma_k G_k,$$

où

$$S_k(T, \gamma_k) = S_k^{\text{st}} + \int_{T^{\text{st}}}^T \frac{C_{v,k}(\tau)}{\tau} d\tau - R \log \left(\frac{\gamma_k}{\gamma^{\text{st}}} \right),$$

S_k^{st} , $k \in S$, est l'entropie de formation à la température standard T^{st} et à la pression standard p^{st} , $\gamma^{\text{st}} = p^{\text{st}}/RT^{\text{st}}$ est la concentration standard et $G_k = H_k - TS_k$, $k \in S$. Le potentiel chimique réduit molaire des espèces μ_k , $k \in S$, s'écrit alors $\mu_k = G_k/RT$.

Finalement, les fonctions de Gibbs G_k , $k \in S$, et les potentiels chimiques réduits molaires μ_k , $k \in S$, sont des fonctions de γ_k et de T , qui peuvent s'écrire

$$G_k(\gamma_k, T) = G_k^u(T) + RT \log \gamma_k, \quad \mu_k(\gamma_k, T) = \mu_k^u(T) + \log \gamma_k,$$

où G_k^u , $k \in S$, sont les fonctions de Gibbs unitaires molaires et μ_k^u , $k \in S$, sont les potentiels chimiques réduits unitaires molaires.

III.2.5 Termes sources chimiques

On rappelle que l'on considère n^r réactions chimiques entre les n^s espèces, ce qui peut s'écrire formellement sous la forme

$$\sum_{k \in S} \nu_{kr}^f \mathfrak{M}_k \rightleftharpoons \sum_{k \in S} \nu_{kr}^b \mathfrak{M}_k, \quad r \in \mathfrak{R},$$

où $\mathfrak{M}_k$ est le symbole chimique de la k^e espèce, ν_{kr}^f et ν_{kr}^b les coefficients stœchiométriques direct et inverse de la k^e espèce dans la r^e réaction et $\mathfrak{R} = \{1, \dots, n^r\}$ est l'ensemble des indices des réactions.

Les taux moléculaires de production sont donnés par la théorie cinétique à la section I.6.5.5. On obtient donc

$$\omega_k = \sum_{r \in \mathfrak{R}} (\nu_{kr}^b - \nu_{kr}^f) \tau_r, \quad k \in S, \quad (\text{III.7})$$

où τ_r est le taux d'avancement de la r^e réaction dont la formulation symétrique [Gio99] est

$$\tau_r = \mathcal{K}_r \left(\exp \langle \nu_r^f, \mu \rangle - \exp \langle \nu_r^b, \mu \rangle \right), \quad (\text{III.8})$$

où $\nu_r^f = (\nu_{1r}^f, \dots, \nu_{n^s r}^f)^T$, $\nu_r^b = (\nu_{1r}^b, \dots, \nu_{n^s r}^b)^T$, $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_{n^s})^T$ et $\mathcal{K}_r$ est la constante de réaction de la r^e réaction. On rappelle les définitions des coefficients stœchiométriques $\nu_{kr} = \nu_{kr}^b - \nu_{kr}^f$, $k \in S$, $r \in \mathfrak{R}$, et des vecteurs stœchiométriques $\nu_r = (\nu_{1r}, \dots, \nu_{n^s r})^T$, $r \in \mathfrak{R}$, telles que $\nu_r = \nu_r^b - \nu_r^f$ et on note $\mathcal{R} = \text{Vect}\{\nu_r, r \in \mathfrak{R}\}$, l'espace vectoriel engendré par les vecteurs stœchiométriques ν_r , $r \in \mathfrak{R}$.

III.2.6 Hypothèses mathématiques

On décrit dans cette section les hypothèses mathématiques concernant la thermo-chimie ainsi qu'une partie de celles concernant les coefficients de transport.

III.2.6.1 Hypothèses sur la thermochimie

On suppose que les espèces du mélange sont constituées d'atomes neutres et d'électrons. On note $\mathfrak{A} = \{1, \dots, n^a\}$ l'ensemble des indices des atomes, n^a le nombre d'atomes dans le mélange, $\tilde{m}_l$, $l \in \mathfrak{A}$, la masse atomique du l^e atome, $\mathbf{a}_{kl}$, $k \in S$, $l \in \mathfrak{A}$, le nombre de l^e atomes dans la k^e espèce et $\mathbf{a}_{k0}$, $k \in S$, le nombre d'électrons dans la k^e espèce. De plus, pour alléger les expressions, on définit $\overline{\mathfrak{A}} = \{0\} \cup \mathfrak{A} = \{0, \dots, n^a\}$. On introduit également les vecteurs atomiques $\mathbf{a}_l$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, définis par

$$\mathbf{a}_l = (\mathbf{a}_{1l}, \dots, \mathbf{a}_{n^sl})^T, \quad l \in \overline{\mathfrak{A}}.$$

On suppose que l'espèce électron est présente dans le mélange ainsi qu'une espèce neutre et une espèce chargée positivement. Pour alléger les notations, on suppose que l'espèce électron est indexée par n^s , c'est-à-dire que c'est la dernière espèce du mélange. Comme on désire étudier la limite de la masse de l'électron tendant vers zéro, on suppose que la masse de l'électron m_{n^s} est seulement positive ou nulle, tandis que les masses des autres espèces sont strictement positives. On définit alors le vecteur des masses molaires $\mathbf{m}$ et le vecteur des charges molaires $\boldsymbol{\varkappa}$ par

$$\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_{n^s})^T, \quad \boldsymbol{\varkappa} = (\varkappa_1, \dots, \varkappa_{n^s})^T,$$

et on rappelle la définition du vecteur unitaire $\mathbf{u}$ de taille n^s , $\mathbf{u} = (1, \dots, 1)^T$. On introduit alors la fraction molaire de la k^e espèce X_k et la fraction massique de la k^e espèce Y_k par

$$X_k = \gamma_k / \sum_{l \in S} \gamma_l, \quad Y_k = \rho_k / \sum_{l \in S} \rho_l = m_k \gamma_k / \sum_{l \in S} m_l \gamma_l, \quad k \in S,$$

ainsi que les vecteurs des fractions molaires $\mathbf{X}$ et des fractions massiques $\mathbf{Y}$ par

$$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_{n^s})^T, \quad \mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_{n^s})^T.$$

(Th₁) *Les masses molaires des espèces autres que l'électron m_k , $k \in S$, $k \neq n^s$, et la constante des gaz parfaits R sont des constantes strictement positives. La masse molaire de l'électron $m_{n^s} = \tilde{m}_0$ est positive ou nulle. Les énergies de formation standard E_k^{st} , $k \in S$, et les entropies de formation standard S_k^{st} , $k \in S$, sont constantes. Les chaleurs spécifiques molaires $C_{v,k}$, $k \in S$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de la température $T \geq 0$ et il existe des constantes strictement positives $\underline{c}_v$ et $\bar{c}_v$ telles que $0 < \underline{c}_v \leq C_{v,k}(T) \leq \bar{c}_v$, pour tout $k \in S$ et pour tout $T \geq 0$.*

(Th₂) Les masses molaires atomiques $\tilde{m}_l$, $l \in \mathfrak{A}$, sont des constantes strictement positives et les masses molaires des espèces m_k , $k \in S$, sont données par les relations

$$m_k = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{m}_l \mathbf{a}_{kl} + \tilde{m}_0 \mathbf{a}_{k0}, \quad k \in S.$$

De plus, la charge molaire de la k^e espèce est proportionnelle au nombre d'électrons qu'elle possède selon la relation $\varkappa_k = -\alpha \mathbf{a}_{k0}$, $k \in S$, où α est une constante strictement positive qui représente la valeur absolue de la charge d'une mole d'électrons.

(Th₃) Les coefficients stœchiométriques ν_{kr}^f et ν_{kr}^b , $k \in S$, $r \in \mathfrak{R}$, et les coefficients atomiques $\mathbf{a}_{kl}$, $k \in S$, $l \in \mathfrak{A}$, sont des entiers positifs. Le nombre d'électrons $\mathbf{a}_{k0}$, $k \in S$, est un entier. Les vecteurs atomiques $\mathbf{a}_l$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, et les vecteurs des coefficients stœchiométriques ν_r , $r \in \mathfrak{R}$, vérifient les relations de conservation $\langle \nu_r, \mathbf{a}_l \rangle = 0$, $r \in \mathfrak{R}$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$. Ces relations expriment la conservation des atomes pour $l \in \mathfrak{A}$ et la conservation de la charge pour $l = 0$ dans la r^e réaction.

(Th₄) Les constantes de réaction $\mathcal{K}_r$, $r \in \mathfrak{R}$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ positives de $T > 0$.

(Th₅) Il existe au moins une espèce ionisée chargée positivement telle que $\varkappa_k > 0$, une espèce neutre telle que $\varkappa_k = 0$ et on suppose que la dernière espèce est constituée par les électrons, ainsi $\varkappa_{r^s} < 0$.

Ces hypothèses impliquent en particulier les propriétés vectorielles $\mathbf{a}_l \in \mathcal{R}^\perp$, $l \in \overline{\mathfrak{A}}$, où $\mathcal{R} = \text{Vect}\{\nu_r, r \in \mathfrak{R}\}$. En outre, on a les relations vectorielles

$$\mathbf{m} = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{m}_l \mathbf{a}_l + \tilde{m}_0 \mathbf{a}_0, \quad \varkappa = -\alpha \mathbf{a}_0,$$

qui impliquent $\mathbf{m} \in \mathcal{R}^\perp$ et $\varkappa \in \mathcal{R}^\perp$. On remarque de plus qu'avec l'hypothèse (Th₅), les vecteurs $\rho \mathbf{Y} = (\rho_1, \dots, \rho_{r^s})^T$ et $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_{r^s})^T$ sont linéairement indépendants, ainsi que les vecteurs $\mathbf{m}$ et $\varkappa$. En définissant $m'_k = \sum_{l \in \mathfrak{A}} \tilde{m}_l \mathbf{a}_{kl}$ et $\rho' = \sum_{1 \leq k \leq r^s-1} m'_k \gamma_k$, on a $\rho = \rho' - \tilde{m}_0 \mathbf{q} / \alpha$. Finalement, la présence d'une espèce neutre dans le modèle n'est pas strictement nécessaire, mais elle permet de simplifier la présentation et, en particulier, l'explicitation des formes normales.

III.2.6.2 Hypothèses sur les coefficients de transport

On introduit tout d'abord un ensemble d'hypothèses concernant les coefficients de transport qui n'est valide que si la masse de l'électron est strictement positive. Ces hypothèses seront généralisées dans la section suivante de façon à atteindre le cas limite de la masse de l'électron nulle.

- (tr₁) *Les coefficients de diffusion multiespèces D_{kl} , $k, l \in S$, les taux de diffusion thermique χ_k , $k \in S$, la viscosité volumique κ , la viscosité de cisaillement η et la conductivité thermique λ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de (T, γ) , où $\gamma = (\gamma_1, \dots, \gamma_{n^s})^T$, pour $T > 0$ et $\gamma > 0$.*
- (tr₂) *La conductivité thermique λ et la viscosité de cisaillement η sont des fonctions strictement positives. La viscosité volumique κ est une fonction positive ou nulle.*
- (tr₃) *Pour $\gamma > 0$ et $T > 0$, la matrice $D = (D_{kl})_{k,l \in S}$ est une matrice réelle symétrique semi-définie positive et son noyau est engendré par le vecteur $Y = (Y_1, \dots, Y_{n^s})^T$. Les taux de diffusion thermique χ_k , $k \in S$, vérifient la relation $\langle \chi, u \rangle = 0$.*

Ces propriétés ont d'importantes conséquences pour la matrice $\hat{D}$ des coefficients de diffusion effectifs définie en (III.5).

Lemme III.1

Sous les hypothèses (Th₁-Th₅) et (tr₁-tr₃), la matrice $\hat{D}$ est symétrique semi-définie positive. Son noyau est engendré par les vecteurs Y et q , où $q_k = \gamma_k \kappa_k$, $k \in S$. On a ainsi $N(\hat{D}) = \mathbb{R}Y \oplus \mathbb{R}q$ et $R(\hat{D}) = \text{Vect}(Y, q)^\perp$.

Preuve - III.1 -

On note tout d'abord que les vecteurs Y et q ne sont pas nuls car $\gamma > 0$ et ne sont pas proportionnels puisqu'il existe des espèces chargées positivement et négativement. Cela implique en particulier que $\langle D_{kl} q, q \rangle > 0$, la matrice $\hat{D}_{kl}$ est donc bien définie. Après quelques calculs, on obtient, pour $x \in \mathbb{R}^{n^s}$, la formule

$$\langle \hat{D}x, x \rangle = \left\langle D \left(x - \frac{\langle Dx, q \rangle}{\langle Dq, q \rangle} q \right), x - \frac{\langle Dx, q \rangle}{\langle Dq, q \rangle} q \right\rangle.$$

On déduit alors directement les propriétés de la matrice $\hat{D}$ de celles de la matrice D . ■

III.2.7 Formulation quasi-linéaire

Les relations (III.5) (III.6) impliquent que la densité de courant de conduction $\mathbf{j}$ est nulle, si bien que la charge q est constamment nulle si elle est initialement nulle. Par conséquent, les équations de conservation du moment et de l'énergie peuvent se simplifier sous la forme

$$\partial_t(\rho\mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho\mathbf{v} \otimes \mathbf{v} + p\mathbb{I}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{\Pi} = 0, \quad (\text{III.9})$$

$$\partial_t(\mathcal{E} + \frac{1}{2}\rho\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot ((\mathcal{E} + \frac{1}{2}\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + p)\mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{Q} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{v}) = 0. \quad (\text{III.10})$$

Chaque fois que le mélange est neutre, c'est à dire telle que la charge globale $q = 0$, il est possible d'exprimer la densité volumique γ_{n^e} en fonction des densités volumiques des espèces lourdes et éliminer ainsi complètement les électrons des équations du mélange. Cependant, on n'utilisera pas cette simplification car elle interdit toute symétrisation du système d'équations aux dérivées partielles résultant. De façon similaire, puisque la densité massique peut s'écrire $\rho = \rho' - \tilde{\mathbf{m}}'_0 q / \alpha$, avec $\rho' = \sum_{k=1}^{n^e-1} m'_k \gamma_k$, on pourrait utiliser ρ' au lieu de ρ dans les équations, mais cette formulation plus simple n'est pas nécessaire pour la suite.

On introduit une notation compacte qui sera utilisée dans toute la suite de ce chapitre. On définit la variable conservative $\mathbf{U}$ par

$$\mathbf{U} = (\gamma_1, \dots, \gamma_{n^e}, \rho\mathbf{v}^T, \mathcal{E} + \frac{1}{2}\rho\mathbf{v} \cdot \mathbf{v})^T, \quad (\text{III.11})$$

et la variable naturelle $\mathbf{Z}$ par

$$\mathbf{Z} = (\gamma_1, \dots, \gamma_{n^e}, \mathbf{v}^T, T)^T. \quad (\text{III.12})$$

Les composantes de $\mathbf{U}$ apparaissent naturellement comme les quantités conservées dans la formulation molaire du système d'équations aux dérivées partielles modélisant les plasmas ambipolaires. Par ailleurs, les composantes de $\mathbf{Z}$ sont plus pratiques d'utilisation pour les calculs des identités différentielles.

Les équations de conservation peuvent se récrire sous la forme compacte

$$\partial_t \mathbf{U} + \sum_{i \in C} \partial_i \mathbf{F}_i + \sum_{i \in C} \partial_i \mathbf{F}_i^{\text{diss}} = \Omega, \quad (\text{III.13})$$

où C est l'ensemble $\{1, \dots, d\}$, $\mathbf{F}_i$, $i \in C$, le flux convectif dans la i^e direction, $\mathbf{F}_i^{\text{diss}}$, $i \in C$, le flux dissipatif dans la i^e direction et Ω le terme source. Le terme source Ω est donné par

$$\Omega = (\omega_1, \dots, \omega_{n^e}, 0_{1,d}, 0)^T, \quad (\text{III.14a})$$

et le flux convectif F_i par

$$F_i = (\gamma_1 v_i, \dots, \gamma_{n^s} v_i, \rho v_i \mathbf{v}^T + p \mathbf{e}_i^T, (\mathcal{E} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + p) v_i)^T, \quad (\text{III.14b})$$

où $(\mathbf{e}_i)_{i \in C}$ est la base canonique de $\mathbb{R}^d$. Le flux dissipatif F_i^{diss} peut être décomposé en

$$F_i^{\text{diss}} = F_i^{\text{diff}} + F_i^{\text{visc}}, \quad (\text{III.14c})$$

où F_i^{visc} le flux visqueux et F_i^{diff} le flux diffusif sont définis par

$$F_i^{\text{visc}} = \left(0, \dots, 0, \Pi_{i1}, \dots, \Pi_{id}, \sum_{j \in C} \Pi_{ij} v_j \right)^T, \quad (\text{III.14d})$$

$$F_i^{\text{diff}} = \left(\gamma_1 V_{i1}, \dots, \gamma_{n^s} V_{in^s}, 0_{1,d}, \mathcal{Q}_i \right)^T. \quad (\text{III.14e})$$

Les flux convectifs et dissipatifs sont naturellement donnés comme des fonctions de la variable naturelle Z . Pour relier la variable naturelle Z à la variable conservative U , on étudie la fonction $Z \mapsto U$. On introduit les ouverts $\mathcal{O}_Z$ et $\mathcal{O}_U$ définis par

$$\mathcal{O}_Z = (\mathbb{R}_+^*)^{n^s} \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}_+^*,$$

$$\mathcal{O}_U = \left\{ u \in \mathbb{R}^{n^s+d+1} : u_1, \dots, u_{n^s} > 0, u_{n^s+d+1} > f(u) \right\},$$

où f est la fonction de $(\mathbb{R}_+^*)^{n^s} \times \mathbb{R}^d$ dans $\mathbb{R}$ donnée par

$$f(u) = \frac{1}{2} \frac{\sum_{i \in C} u_{n^s+i}^2}{\sum_{i \in S} m_i u_i} + \sum_{i \in S} u_i E_i^0, \quad (\text{III.15})$$

E_i^0 étant l'énergie interne par unité de mole de la i^e espèce à la température $T = 0$.

Lemme III.2

En supposant que les hypothèses (Th₁-Th₅) sont satisfaites, l'application $Z \mapsto U$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de l'ouvert $\mathcal{O}_Z$ sur l'ouvert convexe $\mathcal{O}_U$.

Preuve - III.2 -

De l'hypothèse (Th₁) sur les coefficients $C_{v,k}$, $k \in S$, on déduit immédiatement que l'application $Z \mapsto U$ est de classe $\mathcal{C}^\infty$ sur le domaine $\mathcal{O}_Z$. De plus, il est rapide de vérifier que l'application est injective et surjective sur l'ensemble $\mathcal{O}_U$ grâce à la stricte positivité des coefficients $C_{v,k}$, $k \in S$, ce qui est supposé dans (Th₁). La

matrice jacobienne $\partial_Z \mathbf{U}$ est donnée par

$$\partial_Z \mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{n^s, n^s} & 0_{n^s, d} & 0_{n^s, 1} \\ \mathbf{v} \otimes \mathbf{m} & \rho \mathbb{I}_{d, d} & 0_{d, 1} \\ \mathbf{E}^{\text{tot}} & \rho \mathbf{v}^T & \rho c_v \end{bmatrix},$$

où c_v est la chaleur spécifique massique du mélange définie par $\rho c_v = \sum_{k \in S} \gamma_k C_{v, k}$, $\mathbf{E}^{\text{tot}} = (E_1^{\text{tot}}, \dots, E_{n^s}^{\text{tot}})^T$, avec $E_k^{\text{tot}} = E_k + \frac{1}{2} m_k \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$, $k \in S$, énergie molaire totale de la k^e espèce. Cette matrice est inversible sur $\mathcal{O}_Z$ grâce à sa structure triangulaire et à l'hypothèse (Th₁) qui implique que $\rho c_v > 0$. On déduit alors du théorème d'inversion globale que l'application $Z \mapsto \mathbf{U}$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme sur $\mathcal{O}_U$. La convexité de l'ensemble $\mathcal{O}_U$ est finalement une conséquence directe de la convexité de la fonction f , qui est établie en évaluant sa dérivée seconde. ■

En utilisant ce lemme et les expressions des flux convectifs et dissipatifs en fonction de la variable naturelle, on récrit le système (III.13) sous la forme d'un système quasi-linéaire de la variable conservative $\mathbf{U}$.

Proposition III.3

Les flux convectifs $F_i(\mathbf{U})$, $i \in C$, et le terme source $\Omega(\mathbf{U})$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$. Les flux dissipatifs $F_i^{\text{diss}}(\mathbf{U}, \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{U})$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$ et de $\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{d(n^s + d + 1)}$. De plus, le système d'équations aux dérivées partielles (III.13) peut se récrire sous la forme quasi-linéaire

$$\partial_t \mathbf{U} + \sum_{i \in C} \mathbf{A}_i(\mathbf{U}) \partial_i \mathbf{U} = \sum_{i, j \in C} \partial_i (\mathbf{B}_{ij}(\mathbf{U}) \partial_j \mathbf{U}) + \Omega(\mathbf{U}), \quad (\text{III.16})$$

où les matrices $\mathbf{A}_i(\mathbf{U})$, $i \in C$, et $\mathbf{B}_{ij}(\mathbf{U})$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_U$ qui vérifient $\mathbf{A}_i(\mathbf{U}) = \partial_{\mathbf{U}} F_i(\mathbf{U})$ et $F_i^{\text{diss}}(\mathbf{U}, \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{U}) = - \sum_{j \in C} \mathbf{B}_{ij}(\mathbf{U}) \partial_j \mathbf{U}$, pour $i \in C$.

Preuve - III.3 -

On commence par remarquer qu'il est plus facile de différencier les flux selon la variable naturelle Z que selon la variable conservative $\mathbf{U}$. En utilisant l'expression (III.14b) des flux convectifs F_i , $i \in C$, et l'hypothèse (Th₁) sur la régularité des chaleurs spécifiques $C_{v, k}$, $k \in S$, on obtient immédiatement que les vecteurs $\mathbf{F}_i$, $i \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$. De plus, pour $i \in C$, la dérivée $\partial_Z F_i$ peut

s'écrire sous la forme

$$\partial_Z \mathbf{F}_i = \begin{bmatrix} v_i \mathbb{I}_{n^s, n^s} & \gamma \otimes \mathbf{e}_i & 0_{n^s, d} \\ v_i \mathbf{v} \otimes \mathbf{m} + RT \mathbf{e}_i^T & \rho(v_i \mathbb{I}_{d, d} + \mathbf{v} \otimes \mathbf{e}_i) & \Sigma_1 R \mathbf{e}_i \\ v_i \mathbf{H}^{\text{tot}} & \rho v_i \mathbf{v}^T + \mathcal{H}^{\text{tot}} \mathbf{e}_i^T & v_i \rho c_p \end{bmatrix},$$

où l'on a défini $(\mathbf{e}_i)_{i \in C}$ la base canonique de $\mathbb{R}^d$, $\mathbf{H}^{\text{tot}} = (H_1^{\text{tot}}, \dots, H_{n^s}^{\text{tot}})^T$, avec $H_k^{\text{tot}} = H_k + \frac{1}{2} m_k \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$, $k \in S$, $\mathcal{H}^{\text{tot}} = \mathcal{H} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = \sum_{k \in S} \gamma_k H_k^{\text{tot}}$, $\rho c_p = \rho c_v + \sum_{k \in S} \gamma_k R$ et $\Sigma_1 = \sum_{k \in S} \gamma_k$.

En ce qui concerne les flux dissipatifs, on écrit $\mathbf{F}_i^{\text{diss}} = \mathbf{F}_i^{\text{diff}} + \mathbf{F}_i^{\text{visc}}$, $i \in C$, et on traite les deux termes séparément, le premier correspondant aux termes diffusifs et le second aux termes visqueux. Les flux de transport $\mathbf{\Pi}$, $\gamma_k \mathbf{V}_k$, $k \in S$, et $\mathbf{Q}$ s'écrivent naturellement comme une combinaison linéaire des gradients de la variable naturelle Z . En particulier, on a pour le terme $\mathbf{F}_i^{\text{diff}}$

$$\mathbf{F}_i^{\text{diff}} = - \sum_{i \in C} \hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} \partial_j Z, \quad (\text{III.17})$$

où les matrices $\hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$ sont définies par

$$\hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} = \delta_{ij} \begin{bmatrix} \left[\frac{T}{p} \hat{D}_{kl} \gamma_k R \right]_{k, l \in S} & 0_{n^s, d} & \left[\gamma_k \sum_{l \in S} \hat{D}_{kl} \left(\frac{\gamma_l R}{p} + \frac{\chi_l}{T} \right) \right]_{k \in S} \\ 0_{d, n^s} & 0_{d, d} & 0_{d, 1} \\ \left[\frac{RT}{p} \sum_{k \in S} \hat{D}_{kl} (p \chi_k + \gamma_k H_k) \right]_{l \in S} & 0_{1, d} & \lambda + \sum_{k, l \in S} \hat{D}_{kl} (p \chi_k + \gamma_k H_k) \left(\frac{\gamma_l R}{p} + \frac{\chi_l}{T} \right) \end{bmatrix}. \quad (\text{III.18})$$

L'hypothèse (Th₁) concernant la régularité des coefficients $C_{v, k}$ et la stricte positivité de la constante des gaz parfaits R et l'hypothèse (tr₁) concernant la régularité des coefficients de transport permettent alors de déduire de l'expression (III.18) que les matrices $\hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$, $i, j \in C$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $Z \in \mathcal{O}_Z$. En ce qui concerne le terme $\mathbf{F}_i^{\text{visc}}$, on écrit

$$\mathbf{F}_i^{\text{visc}} = - \sum_{i \in C} \hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}} \partial_j Z, \quad (\text{III.19})$$

avec

$$\hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}} = \kappa \hat{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa + \eta \hat{\mathbf{B}}_{ij}^\eta, \quad (\text{III.20})$$

où les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa$ et $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^\eta$, $i, j \in \mathbf{C}$, sont définies par

$$\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, d} & 0_{n^s, 1} \\ 0_{d, n^s} & \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j & 0_{d, 1} \\ 0_{1, n^s} & v_i \mathbf{e}_j^\top & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{III.21})$$

$$\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^\eta = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, d} & 0_{n^s, 1} \\ 0_{d, n^s} & \frac{1}{2} \delta_{ij} \mathbb{I}_{d, d} + \frac{1}{2} \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i - \frac{1}{3} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j & 0_{d, 1} \\ 0_{1, n^s} & \frac{1}{2} \delta_{ij} \mathbf{v}^\top + \frac{1}{2} v_j \mathbf{e}_i^\top - \frac{1}{3} v_i \mathbf{e}_j^\top & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{III.22})$$

L'hypothèse (tr₁) concernant la régularité des viscosités κ et η permet alors de montrer que les matrices $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in \mathbf{C}$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$. En combinant la régularité des matrices de diffusion $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$, $i, j \in \mathbf{C}$, et les matrices de viscosité $\widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$, $i, j \in \mathbf{C}$, on obtient alors directement que les flux dissipatifs $\mathbf{F}_i^{\text{diss}}$, $i \in \mathbf{C}$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$ et de $\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{Z} \in \mathbb{R}^{d(n^s+d+1)}$ et que

$$\mathbf{F}_i^{\text{diss}} = - \sum_{j \in \mathbf{C}} \widehat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_j \mathbf{Z}, \quad \text{avec} \quad \widehat{\mathbf{B}}_{ij} = \widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}} + \widehat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}. \quad (\text{III.23})$$

Enfin en utilisant l'expression (III.14a) du terme source Ω et les hypothèses (Th₁) et (Th₄) concernant la régularité des coefficients $C_{v,k}$, $k \in \mathbf{S}$, et des constantes de réaction $\mathcal{K}_r$, $r \in \mathfrak{R}$, on obtient que le terme source Ω est une fonction $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{Z} \in \mathcal{O}_{\mathbf{Z}}$.

Pour obtenir la régularité par rapport à la variable conservative $\mathbf{U}$, on utilise l'application $\mathbf{Z} \mapsto \mathbf{U}$ dont les propriétés ont été étudiées au lemme III.2. Cette application étant de classe $\mathcal{C}^\infty$, on obtient que les flux convectifs $\mathbf{F}_i(\mathbf{U})$, $i \in \mathbf{C}$, et le terme source $\Omega(\mathbf{U})$ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_{\mathbf{U}}$ et que les flux dissipatifs $\mathbf{F}_i^{\text{diss}}(\mathbf{U}, \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{U})$, $i \in \mathbf{C}$, sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de $\mathbf{U} \in \mathcal{O}_{\mathbf{U}}$ et de $\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{3(n^s+d+1)}$. De plus on a les relations

$$\mathbf{A}_i = \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{F}_i = \partial_{\mathbf{Z}} \mathbf{F}_i \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z}, \quad (\text{III.24})$$

$$\mathbf{F}_i^{\text{diss}} = - \sum_{j \in \mathbf{C}} \mathbf{B}_{ij} \partial_j \mathbf{U}, \quad \mathbf{B}_{ij} = \widehat{\mathbf{B}}_{ij} \partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z}, \quad (\text{III.25})$$

où la matrice $\partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z}$ est donnée par

$$\partial_{\mathbf{U}} \mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbb{I}_{n^s, n^s} & 0_{n^s, d} & 0_{n^s, 1} \\ -\frac{1}{\rho} \mathbf{v} \otimes \mathbf{m} & \frac{1}{\rho} \mathbb{I}_{d, d} & 0_{d, 1} \\ -\frac{1}{\rho c_v} \mathbf{E}^{\text{red}} & -\frac{1}{\rho c_v} \mathbf{v}^\top & \frac{1}{\rho c_v} \end{bmatrix},$$

où on a défini le vecteur des énergies molaires réduites $\mathbf{E}^{\text{red}} = (E_1^{\text{red}}, \dots, E_{n^s}^{\text{red}})^T$, avec $E_k^{\text{red}} = E_k - \frac{1}{2}m_k \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}$, $k \in S$. ■

III.3 Nullité de la masse de l'électron

La stabilité asymptotique des états d'équilibre pour le système quasi-linéaire d'équations aux dérivées partielles modélisant les plasmas ambipolaires dissipatifs (III.16) est en soi une question importante. Cependant, on note que ce système dépend de nombreux paramètres comme la conductivité thermique ou les taux de réaction chimique, ce qui incite à étudier la dépendance des solutions en les paramètres du système. Cette étude est présentée dans les sections suivantes sous l'hypothèse que les coefficients du système dépendent de façon régulière des paramètres considérés.

Un de ces paramètres, souvent utilisé dans la modélisation physique, est la masse de l'électron $m_{e^s} = \tilde{m}_0$, qui est généralement prise égale à zéro. Pour étudier cette limite, il faut clarifier la dépendance des coefficients du système en la masse de l'électron. Les hypothèses thermodynamiques (Th₁-Th₅) peuvent être utilisées pour n'importe quelle masse électronique positive ou nulle et ne doivent pas être modifiées. En revanche, les propriétés de transport (tr₁-tr₃) ne sont valides que pour une masse électronique strictement positive et doivent être remplacées par d'autres propriétés.

Dans ce but, on explicite la dépendance des matrices de diffusion multiespèces en les coefficients de diffusion binaires et on étudie la limite des coefficients de diffusion effectifs $\hat{D}$ lorsque la masse de l'électron tend vers zéro.

III.3.1 Définition de D comme une inverse généralisée

On commence par rappeler les définitions de deux propriétés matricielles.

Définition III.1

Une matrice A de $\mathbb{R}^{n,n}$ est dite **irréductible** s'il n'existe pas de partition I, J de $\{1, \dots, n\}$ telle que $A_{ij} = 0$, pour $i \in I, j \in J$.

Définition III.2

Une matrice A de $\mathbb{R}^{n,n}$ est une **M-matrice** si elle s'écrit $A = \alpha \mathbb{I} - B$ avec $B_{ij} \geq 0$ et $\alpha \geq \rho(B)$, où $\rho(B)$ désigne le rayon spectral de la matrice B . On dira de plus que A

est une *M-matrice singulière* si $\alpha = \rho(B)$ et une *M-matrice non singulière* si $\alpha > \rho(B)$.

On introduit la matrice Δ définie par

$$\begin{cases} \Delta_{kk} = \sum_{\substack{l \in S \\ l \neq k}} \frac{X_k X_l}{\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}}, & k \in S, \\ \Delta_{kl} = -\frac{X_k X_l}{\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}}, & k, l \in S, \quad k \neq l, \end{cases} \quad (\text{III.26})$$

où $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$ est le coefficient de diffusion binaire pour la paire d'espèces (k, l) . Ces coefficients ne sont définis que lorsque les masses des espèces sont strictement positives. Dans le cadre d'une théorie du premier ordre, $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$ ne dépend que de la pression et de la température $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}} = \mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}(p, T)$. Plus généralement, pour obtenir des coefficients de diffusion multiespèces plus précis, les coefficients $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$, $k, l \in S$, sont définis comme les compléments de Schur issus de systèmes linéaires de transport de taille supérieure à n^s et sont des fonctions de T , p et γ , mais conservent des propriétés similaires [EG94]. Les propriétés suivantes de la matrice Δ s'établissent facilement [Gio91, Gio99].

Proposition III.4

En supposant que les coefficients $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$, $k, l \in S$, $k \neq l$, sont strictement positifs et symétriques et que $\gamma > 0$, la matrice Δ est une matrice symétrique semi-définie positive, $N(\Delta) = \mathbb{R}\mathbf{u}$, $R(\Delta) = \mathbf{u}^\perp$, Δ est irréductible et est une *M-matrice singulière*.

Preuve - III.4 -

D'après l'expression (III.26) des coefficients Δ_{kl} , $k, l \in S$, il est immédiat que la matrice Δ est symétrique. Pour $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_{n^s})^\text{T} \in \mathbb{R}^{n^s}$, la relation

$$\langle \Delta \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \sum_{\substack{k, l \in S \\ l \neq k}} \frac{X_k X_l}{\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}} \left(\frac{1}{2}(x_k^2 + x_l^2) - x_k x_l \right),$$

implique que Δ est semi-définie positive de noyau engendré par le vecteur $\mathbf{u}$ et donc d'image orthogonale au vecteur $\mathbf{u}$. Il est évident que Δ est irréductible puisque les coefficients Δ_{kl} sont tous non nuls. Pour montrer que la matrice Δ est une *M-matrice singulière*, on choisit $\alpha \geq \max(\Delta_{kk}, k \in S)$ et on définit $B = \alpha \mathbb{I} - \Delta$. Par construction, tous les coefficients de B sont positifs. De plus, le vecteur $\mathbf{u} = (1, \dots, 1)^\text{T}$ est tel que $B\mathbf{u} = \alpha\mathbf{u}$. Le théorème de Gershgorin permet alors de conclure que $\rho(B) = \alpha$. ■

La matrice de diffusion multiespèces D peut alors être définie comme une inverse généralisée de la matrice Δ [Gio91, Gio99].

Proposition III.5

En supposant vérifiées les hypothèses de la proposition III.4, la matrice D est l'inverse généralisée de Δ d'image $\mathbf{Y}^\perp$ et de noyau $\mathbb{R}\mathbf{Y}$. C'est-à-dire que D est l'unique matrice telle que $\Delta D \Delta = \Delta$, $D \Delta D = D$, $R(D) = \mathbf{Y}^\perp$ et $N(D) = \mathbb{R}\mathbf{Y}$. La matrice D est symétrique définie positive, on a $\Delta D = \mathbb{I} - \mathbf{Y} \otimes \mathbf{u}$, $D \Delta = \mathbb{I} - \mathbf{u} \otimes \mathbf{Y}$ et pour tous nombres positifs a, b tels que $ab = 1$, $D = (\Delta + a\mathbf{Y} \otimes \mathbf{Y})^{-1} - b\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}$. Les coefficients de D sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de (T, γ) pour $T > 0$ et $\gamma > 0$. Ainsi, toutes les hypothèses concernant la matrice D de $(\text{tr}_1\text{-tr}_3)$ sont satisfaites.

Ces résultats peuvent facilement s'étendre à la matrice $\hat{D}$. En effet, lorsque le mélange est neutre, c'est-à-dire que $q = \langle \mathbf{q}, \mathbf{u} \rangle = 0$, il existe un unique vecteur $\mathbf{w}$ de $\mathbb{R}^{n^s}$ tel que $\Delta \mathbf{w} = \mathbf{q}$ et $\langle \mathbf{w}, \mathbf{Y} \rangle = 0$. En introduisant la matrice $\hat{\Delta} = \Delta - \mathbf{q} \otimes \mathbf{q} / \langle \mathbf{w}, \mathbf{q} \rangle$, on peut établir que $\hat{D}$ est l'inverse généralisée de $\hat{\Delta}$ de noyau $\mathbb{R}\mathbf{Y} \oplus \mathbb{R}\mathbf{q}$ et d'image $\text{Vect}(\mathbf{Y}, \mathbf{q})^\perp$. Cependant, on n'utilisera pas ces résultats par la suite, on préférera la relation directe (III.5) définissant $\hat{D}$ à partir de D .

Par ailleurs, on tire de la théorie cinétique des gaz la relation

$$\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}} = \mathcal{O} \left(\frac{1}{\sqrt{m_k m_l}} \right), \quad (\text{III.27})$$

et on peut supposer que la quantité $\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}} \sqrt{m_k m_l}$ est régulière. On obtient donc que les diffusivités de l'électron $\mathcal{D}_{k n^s}^{\text{bin}}$, $k \in S$, $k \neq n^s$, explosent lorsque la masse de l'électron tend vers zéro.

III.3.2 Matrices de diffusion pour la masse électronique nulle

Dans cette section, on spécifie les hypothèses concernant la limite asymptotique de la masse de l'électron tendant vers zéro. On définit le petit paramètre ϵ par

$$\epsilon = (m_{n^s} / \bar{m})^{1/2},$$

où $\bar{m}$ est une masse caractéristique des espèces lourdes, c'est-à-dire autres que l'électron et on étudie le comportement des coefficients du système lorsque $\epsilon \rightarrow 0$. On notera $[0, \bar{\epsilon}]$, $\bar{\epsilon} > 0$ un intervalle des valeurs possibles de ϵ sur lequel les hypothèses

(Th₁-Th₅) sont vérifiées. Grâce à la relation (III.27), les diffusivités de l'électron $\mathcal{D}_{kn^s}^{\text{bin}}$, $k \in S$, $k \neq n^s$, tendent vers l'infini lorsque $\epsilon \rightarrow 0$ et on définit

$$\begin{cases} \mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}} = \check{\mathcal{D}}_{kl}^{\text{bin}}, & k \neq l, \quad k \neq n^s \text{ et } l \neq n^s, \\ \mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}} = \frac{1}{\epsilon} \check{\mathcal{D}}_{kl}^{\text{bin}}, & k \neq l, \quad k = n^s \text{ ou } l = n^s, \end{cases} \quad (\text{III.28})$$

où les coefficients $\check{\mathcal{D}}_{kl}^{\text{bin}}$ sont supposés être des fonctions régulières des variables d'état $T > 0$, $\gamma > 0$ et du paramètre $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$. Les propriétés (tr₁-tr₃) ne sont valides que pour des masses strictement positives, c'est-à-dire pour $\epsilon > 0$ et il faut à présent établir que la matrice $\hat{D}$ est régulière en la masse réduite ϵ et supprimer la singularité en $\epsilon = 0$.

Afin d'étudier la limite de $\hat{D}$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0$, il est pratique d'introduire une partition de l'ensemble des espèces $S = \{1, \dots, n^s\}$ entre les espèces lourdes $h = \{1, \dots, n^s - 1\}$ et les électrons $e = \{n^s\}$. On utilise alors la décomposition par blocs correspondant à cette partition. Pour un vecteur $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n^s}$, elle prend la forme

$$\mathbf{x} = (\mathbf{x}^{\text{hT}}, \mathbf{x}^{\text{e}})^{\text{T}},$$

et pour une matrice $M \in \mathbb{R}^{n^s, n^s}$,

$$M = \begin{bmatrix} M^{\text{hh}} & M^{\text{he}} \\ M^{\text{eh}} & M^{\text{ee}} \end{bmatrix}.$$

Autrement dit, pour deux vecteurs $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n^s}$ et une matrice $M \in \mathbb{R}^{n^s, n^s}$ tels que $\mathbf{y} = M\mathbf{x}$, on a les relations $\mathbf{y}^{\text{h}} = M^{\text{hh}}\mathbf{x}^{\text{h}} + M^{\text{he}}\mathbf{x}^{\text{e}}$ et $\mathbf{y}^{\text{e}} = M^{\text{eh}}\mathbf{x}^{\text{h}} + M^{\text{ee}}\mathbf{x}^{\text{e}}$. La matrice Δ admet en particulier la décomposition

$$\Delta = \begin{bmatrix} \Delta^{\text{hh}} & \Delta^{\text{he}} \\ \Delta^{\text{eh}} & \Delta^{\text{ee}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \check{\Delta}^{\text{hh}} & \epsilon \check{\Delta}^{\text{he}} \\ \epsilon \check{\Delta}^{\text{eh}} & \epsilon \check{\Delta}^{\text{ee}} \end{bmatrix}, \quad (\text{III.29})$$

où les coefficients de la matrice $\check{\Delta}$ sont des fonctions régulières de $T > 0$, $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$ définies par

$$\begin{aligned} \check{\Delta}_{kk}^{\text{hh}} &= \sum_{\substack{l \in h \\ l \neq k}} \frac{X_k X_l}{\check{\mathcal{D}}_{kl}^{\text{bin}}} + \epsilon \frac{X_k X_{n^s}}{\check{\mathcal{D}}_{kn^s}^{\text{bin}}}, & k \in h, & \quad \check{\Delta}_{kl}^{\text{hh}} = -\frac{X_k X_l}{\check{\mathcal{D}}_{kl}^{\text{bin}}}, & k, l \in h, \quad k \neq l, \\ \check{\Delta}_k^{\text{he}} &= -\frac{X_k X_{n^s}}{\check{\mathcal{D}}_{kn^s}^{\text{bin}}}, & k \in h, & \quad \check{\Delta}_l^{\text{eh}} = -\frac{X_{n^s} X_l}{\check{\mathcal{D}}_{n^s l}^{\text{bin}}}, & l \in h, & \quad \check{\Delta}^{\text{ee}} = \sum_{l \in h} \frac{X_{n^s} X_l}{\check{\mathcal{D}}_{n^s l}^{\text{bin}}}. \end{aligned} \quad (\text{III.30})$$

On notera de plus Δ_0^{hh} la matrice $\check{\Delta}^{\text{hh}}$ obtenue en $\epsilon = 0$ et $\mathbf{Y}_0^{\text{h}}$ le vecteur $\mathbf{Y}^{\text{h}}$ obtenu pour $\epsilon = 0$, en gardant à l'esprit que les masses m_k , $k \in \mathbf{S}$, dépendent de ϵ , d'après l'hypothèse (Th₂).

Proposition III.6

En supposant que les coefficients $\check{D}_{kl}^{\text{bin}}$, $k, l \in \mathbf{S}$, $k \neq l$, sont des fonctions strictement positives, symétriques et régulières de $T > 0$, $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$, il existe des coefficients $\check{D}$, fonctions régulières de $T > 0$, $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$ tels que pour tout $\epsilon > 0$, on a

$$D = \begin{bmatrix} \check{D}^{\text{hh}} & \check{D}^{\text{he}} \\ \check{D}^{\text{eh}} & \frac{1}{\epsilon} \check{D}^{\text{ee}} \end{bmatrix}.$$

De plus, la matrice $\check{D}_0^{\text{hh}}$ obtenue pour $\epsilon = 0$ est la matrice de diffusion entre les espèces lourdes en l'absence d'électrons, c'est-à-dire que $\check{D}_0^{\text{hh}}$ est l'inverse généralisé de Δ_0^{hh} dont le noyau est $\mathbb{R}\mathbf{Y}_0^{\text{h}}$ et d'image $(\mathbf{Y}_0^{\text{h}})^\perp$. Finalement, le coefficient scalaire $\check{D}_0^{\text{ee}}$ obtenu pour $\epsilon = 0$ est une fonction positive de $T > 0$ et $\gamma > 0$.

Preuve - III.6 -

D'après (III.29), on peut introduire les matrices

$$\Delta^{\text{up}} = \begin{bmatrix} \check{\Delta}^{\text{hh}} & \epsilon \check{\Delta}^{\text{he}} \\ \check{\Delta}^{\text{eh}} & \check{\Delta}^{\text{ee}} \end{bmatrix}, \quad \Delta^{\text{lo}} = \begin{bmatrix} \check{\Delta}^{\text{hh}} & \check{\Delta}^{\text{he}} \\ \epsilon \check{\Delta}^{\text{eh}} & \check{\Delta}^{\text{ee}} \end{bmatrix},$$

qui sont des fonctions régulières de $T > 0$, $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$. Des propriétés de Δ , on déduit facilement que pour tout $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$ on a $N(\Delta^{\text{up}}) = \mathbb{R}\mathbf{u}$, $R(\Delta^{\text{up}}) = \tilde{\mathbf{u}}^\perp$, $N(\Delta^{\text{lo}}) = \mathbb{R}\tilde{\mathbf{u}}$ et $R(\Delta^{\text{lo}}) = \mathbf{u}^\perp$, où on a défini $\tilde{\mathbf{u}} = (\mathbf{u}^{\text{h}}, \epsilon)^\text{T}$. D'après la définition de ϵ , on a également $\mathbf{Y} = (\mathbf{Y}^{\text{hT}}, \mathbf{Y}^{\text{e}})^\text{T}$ avec $\mathbf{Y}^{\text{e}} = \epsilon^2 \tilde{\mathbf{Y}}^{\text{e}}$, où $\tilde{\mathbf{Y}}^{\text{e}}$ est indépendant de ϵ et on définit $\tilde{\mathbf{Y}} = (\mathbf{Y}^{\text{hT}}, \epsilon \tilde{\mathbf{Y}}^{\text{e}})^\text{T}$. On introduit alors l'inverse généralisée D^{up} de Δ^{up} d'image $R(D^{\text{up}}) = \mathbf{Y}^\perp$ et de noyau $N(D^{\text{up}}) = \mathbb{R}\tilde{\mathbf{Y}}$, ainsi que l'inverse généralisée D^{lo} de Δ^{lo} d'image $R(D^{\text{lo}}) = \tilde{\mathbf{Y}}^\perp$ et de noyau $N(D^{\text{lo}}) = \mathbb{R}\mathbf{Y}$. Les matrices D^{up} et D^{lo} sont bien définies pour $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$ car $N(D^{\text{up}}) \oplus \mathbf{Y}^\perp = \mathbb{R}^{n^{\text{s}}}$, $R(D^{\text{up}}) \oplus \mathbb{R}\tilde{\mathbf{Y}} = \mathbb{R}^{n^{\text{s}}}$, $N(D^{\text{lo}}) \oplus \tilde{\mathbf{Y}}^\perp = \mathbb{R}^{n^{\text{s}}}$, $R(D^{\text{lo}}) \oplus \mathbb{R}\mathbf{Y} = \mathbb{R}^{n^{\text{s}}}$, grâce aux relations $\langle \mathbf{Y}, \mathbf{u} \rangle = \langle \tilde{\mathbf{Y}}, \tilde{\mathbf{u}} \rangle = 1$. De plus, les matrices D^{up} et D^{lo} sont des fonctions régulières de $T > 0$, $\gamma > 0$ et $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$ car pour tout α, β tels que $\alpha\beta = 1$, on a

$$(D^{\text{lo}} + \alpha \tilde{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{u})(\Delta^{\text{lo}} + \beta \mathbf{Y} \otimes \tilde{\mathbf{Y}}) = (D^{\text{up}} + \alpha \mathbf{u} \otimes \tilde{\mathbf{u}})(\Delta^{\text{up}} + \beta \tilde{\mathbf{Y}} \otimes \mathbf{Y}) = \mathbb{I}.$$

En notant M la matrice diagonale $M = \text{Diag}(1, \dots, 1, \epsilon)$, on voit immédiatement que pour tout $\epsilon > 0$ $\Delta = M\Delta^{\text{up}} = \Delta^{\text{lo}}M$ et $D = D^{\text{up}}M^{-1} = M^{-1}D^{\text{lo}}$. Ces relations impliquent en particulier $D^{\text{up}} = D^{\text{loT}}$ puis $D^{\text{hh}} = (D^{\text{up}})^{\text{hh}} = (D^{\text{lo}})^{\text{hh}}$, $D^{\text{he}} =$

$(D^{\text{up}})^{\text{he}}/\epsilon = (D^{\text{lo}})^{\text{he}}$, $D^{\text{eh}} = (D^{\text{up}})^{\text{eh}} = (D^{\text{lo}})^{\text{eh}}/\epsilon$, $D^{\text{ee}} = (D^{\text{up}})^{\text{ee}}/\epsilon = (D^{\text{lo}})^{\text{ee}}/\epsilon$. On obtient donc que D^{hh} , D^{he} et D^{eh} sont des fonctions régulières de $T > 0$, $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$. L'identification de Δ_0^{hh} résulte de manipulations algébriques simples utilisant les propriétés de Δ et de D grâce à la propriété $m_{\text{rs}} = \bar{m}\epsilon^2$. De plus, pour $\epsilon = 0$, on a $(D_0^{\text{up}})^{\text{ee}} = (D_0^{\text{lo}})^{\text{ee}} = 1/\Delta_0^{\text{ee}}$, et on déduit immédiatement des propriétés générales des coefficients de diffusion diagonaux [Gio99] que $\check{D}_0^{\text{ee}}$ est une fonction strictement positive de $T > 0$, $\gamma > 0$ et $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$. ■

On peut à présent établir que la matrice $\hat{D}$ est une fonction régulière de $T > 0$, $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$.

Proposition III.7

En supposant que les coefficients $\check{D}_{kl}^{\text{bin}}$, $k, l \in S$, $k \neq l$, sont des fonctions strictement positives, symétriques et régulières de $T > 0$, de $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$, la matrice $\hat{D}$ est une fonction régulière de $T > 0$, de $\gamma > 0$ et de $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$. De plus, en définissant $\tilde{q}_k = q_k/q_{\text{rs}}$, pour $k \in h$, sa limite lorsque ϵ tend vers zéro est donnée par

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{D}(\epsilon) = \begin{bmatrix} \check{D}_0^{\text{hh}} & -\check{D}_0^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h \\ -(\check{D}_0^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h)^{\text{T}} & \langle \check{D}_0^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h, \tilde{\mathbf{q}}^h \rangle \end{bmatrix}.$$

Preuve - III.7 -

La régularité de $\hat{D}$ pour $\epsilon > 0$ est une conséquence directe de la régularité de D . La partie non triviale de la proposition concerne le comportement lorsque le paramètre ϵ tend vers zéro. On commence par remarquer que

$$\langle D\mathbf{q}, \mathbf{q} \rangle = \frac{(q^e)^2}{\epsilon} \left(\check{D}^{\text{ee}} + 2\epsilon\check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^h + \epsilon\langle \check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h, \tilde{\mathbf{q}}^h \rangle \right),$$

on obtient alors l'expression du bloc $\hat{D}^{\text{hh}}$

$$\hat{D}^{\text{hh}} = \check{D}^{\text{hh}} - \epsilon \frac{(\check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h + \check{D}^{\text{he}})_{\otimes} (\check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h + \check{D}^{\text{he}})}{\check{D}^{\text{ee}} + 2\epsilon\check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^h + \epsilon\langle \check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h, \tilde{\mathbf{q}}^h \rangle}.$$

Cette expression montre que $\hat{D}^{\text{hh}}$ est régulier lorsque ϵ tend vers zéro et que sa limite est $\hat{D}_0^{\text{hh}}$. Pour le terme $\hat{D}^{\text{he}}$ on peut écrire que

$$\hat{D}^{\text{he}} = \check{D}^{\text{he}} - \frac{(\check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h + \check{D}^{\text{he}})(\epsilon\check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^h + \check{D}^{\text{ee}})}{\check{D}^{\text{ee}} + 2\epsilon\check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^h + \epsilon\langle \check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^h, \tilde{\mathbf{q}}^h \rangle},$$

ce qui entraîne que $\widehat{D}^{\text{he}}$ est régulier en $\epsilon = 0$ et converge vers $-\check{D}_0^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}}$ lorsque ϵ tend vers zéro. Grâce à la symétrie de $\widehat{D}$, le terme $\widehat{D}^{\text{eh}}$ est identique. Finalement, le dernier terme s'écrit

$$\widehat{D}^{\text{ee}} = \frac{1}{\epsilon} \left(\check{D}^{\text{ee}} - \frac{(\epsilon \check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}} + \check{D}^{\text{ee}})^2}{\check{D}^{\text{ee}} + 2\epsilon \check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}} + \epsilon \langle \check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}}, \tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}} \rangle} \right),$$

ce qui se simplifie en

$$\widehat{D}^{\text{ee}} = \frac{\check{D}^{\text{ee}} \langle \check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}}, \tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}} \rangle - \epsilon (\check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}})^2}{\check{D}^{\text{ee}} + 2\epsilon \check{D}^{\text{eh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}} + \epsilon \langle \check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}}, \tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}} \rangle},$$

où on observe une remarquable disparition de la singularité. Ce terme est alors régulier en $\epsilon = 0$ et converge vers $\langle \check{D}^{\text{hh}}\tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}}, \tilde{\mathbf{q}}^{\text{h}} \rangle$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0$. ■

III.3.3 Hypothèses lorsque la masse de l'électron est nulle

Grâce aux résultats obtenus dans la section précédente, on reformule les hypothèses sur les coefficients de transport.

- (Tr₁) *Les coefficients de diffusion multispèces effectifs $\widehat{D}_{kl}$, $k, l \in S$, les taux de diffusion thermique χ_k , $k \in S$, la viscosité volumique κ , la viscosité de cisaillement η et la conductivité thermique λ sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de (T, γ, ϵ) pour $T > 0$, $\gamma > 0$ et $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$.*
- (Tr₂) *La conductivité thermique λ et la viscosité de cisaillement η sont des fonctions strictement positives. La viscosité volumique κ est une fonction positive.*
- (Tr₃) *Pour $\gamma > 0$, $T > 0$ et $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$, la matrice des coefficients de diffusion $\widehat{D} = (\widehat{D}_{kl})_{k, l \in S}$ est une matrice réelle symétrique semi-définie positive et son noyau est engendré par les vecteurs $\mathbf{Y}$ et $\mathbf{q}$. Le vecteur des taux de diffusion thermique $\chi = (\chi_k)_{k \in S}$, vérifient la relation $\langle \chi, \mathbf{u} \rangle = 0$.*

On peut finalement récrire le système quasi-linéaire (III.16) sous la forme

$$\partial_t \mathbf{U} + \sum_{i \in C} \mathbf{A}_i(\mathbf{U}, \epsilon) \partial_i \mathbf{U} = \sum_{i, j \in C} \partial_i (\mathbf{B}_{ij}(\mathbf{U}, \epsilon) \partial_j \mathbf{U}) + \Omega(\mathbf{U}, \epsilon), \quad (\text{III.31})$$

où on a explicité la dépendance des coefficients en le paramètre ϵ de la masse réduite de l'électron. Les coefficients du système (III.31) sont naturellement définis sur l'ouvert $\mathcal{O}_{(U,\epsilon)}$ défini par

$$\mathcal{O}_{(U,\epsilon)} = \left\{ (u, \epsilon) \in \mathbb{R}^{n^s+d+2} : u_1, \dots, u_{n^s} > 0, \epsilon > 0, u_{n^s+d+1} > f(u, \epsilon) \right\}, \quad (\text{III.32})$$

où f est l'application introduite en (III.15) qui dépend de ϵ au travers des masses des espèces m_k , $k \in S$. De plus, on a vu que les coefficients du système ont une extension régulière en $\epsilon = 0$.

III.4 Existence locale pour un système abstrait

Dans cette section, on étudie la symétrisation et l'existence locale de solutions pour des systèmes hyperboliques-paraboliques dépendant d'un paramètre.

III.4.1 Symétrisation conservative

On considère un système quasi-linéaire abstrait du second ordre dépendant d'un paramètre de la forme

$$\partial_t U^* + \sum_{i \in C^*} A_i^*(U^*, \epsilon^*) \partial_i U^* = \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (B_{ij}^*(U^*, \epsilon^*) \partial_j U^*) + \Omega^*(U^*, \epsilon^*), \quad (\text{III.33})$$

où $(U^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$, $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ est un ouvert de $\mathbb{R}^{n^*} \times \mathbb{R}^{m^*}$ et $C^* = \{1, \dots, d\}$ représente les indices des directions de $\mathbb{R}^d$. L'exposant $*$ est utilisé pour distinguer le système du second ordre abstrait (III.33) de taille n^* dans $\mathbb{R}^d$ avec ϵ^* de taille m^* du système particulier des plasmas ambipolaires (III.31) de taille n^s+4 dans $\mathbb{R}^d$ où ϵ est la masse réduite de l'électron. Toutes les quantités associées à ce système abstrait ont un exposant $*$, comme par exemple le vecteur inconnu U^* . On considère des ouverts $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ par souci de simplicité et on suppose que les coupes

$$\mathcal{O}_{U^*}^{\epsilon^*} = \{U^* \in \mathbb{R}^{n^*}; (U^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}\}$$

sont convexes pour tout ϵ^* . On suppose de plus que les propriétés suivantes sont satisfaites par le système (III.33).

(Edp₁) Les flux convectifs F_i^* , $i \in C^*$, les matrices de dissipations B_{ij}^* , $i, j \in C^*$, et le terme source Ω^* sont des fonctions régulières de la variable $(U^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$.

On introduit à présent la définition d'une forme symétrique (conservative) pour le système (III.33) qui est adaptée de celle de Kawashima et Shizuta [KS88].

Définition III.3

Soit $(U^*, \epsilon^*) \mapsto (V^*, \epsilon^*)$ un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme d'un ouvert $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ dans un ouvert $\mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$. On considère le système écrit dans la variable V^*

$$\tilde{A}_0^*(V^*, \epsilon^*) \partial_t V^* + \sum_{i \in C^*} \tilde{A}_i^*(V^*, \epsilon^*) \partial_i V^* = \sum_{i, j \in C^*} \partial_i (\tilde{B}_{ij}^*(V^*, \epsilon^*) \partial_j V^*) + \tilde{\Omega}^*(V^*, \epsilon^*), \quad (\text{III.34})$$

où

$$\begin{cases} \tilde{A}_0^* = \partial_{V^*} U^*, & \tilde{A}_i^* = A_i^* \partial_{V^*} U^* = \partial_{V^*} F_i^*, \\ \tilde{B}_{ij}^* = B_{ij}^* \partial_{V^*} U^*, & \tilde{\Omega}^* = \Omega^*. \end{cases} \quad (\text{III.35})$$

Le système est dit sous forme **symétrique** si les matrices $\tilde{A}_0^*$, $\tilde{A}_i^*$, $i \in C^*$, et $\tilde{B}_{ij}^*$, $i, j \in C^*$, vérifient les propriétés suivantes (S₁-S₄).

- (S₁) La matrice $\tilde{A}_0^*(V^*, \epsilon^*)$ est symétrique définie positive pour $(V^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$.
- (S₂) Les matrices $\tilde{A}_i^*(V^*, \epsilon^*)$, $i \in C^*$, sont symétriques pour $(V^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$.
- (S₃) On a $\tilde{B}_{ij}^*(V^*, \epsilon^*)^T = \tilde{B}_{ji}^*(V^*, \epsilon^*)$ pour $i, j \in C^*$ et $(V^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$.
- (S₄) La matrice $\tilde{B}^*(V^*, \epsilon^*, \xi) = \sum_{i, j \in C^*} \tilde{B}_{ij}^*(V^*, \epsilon^*) \xi_i \xi_j$ est symétrique semi-définie positive pour $(V^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$ et $\xi \in \Sigma^{d-1}$, où Σ^{d-1} est la sphère unité en dimension d .

On introduit alors la définition généralisée d'une fonction entropie, adaptée de celle de Kawashima [Kaw84] et de Kawashima et Shizuta [KS88].

Définition III.4

Soit $\sigma^*(U^*, \epsilon^*)$ une fonction $\mathcal{C}^\infty$ définie sur l'ouvert $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ tel que les coupes $\mathcal{O}_{U^*}^{\epsilon^*}$ sont convexes. La fonction σ^* est une **fonction entropie** pour le système (III.33) si les propriétés (E₁-E₄) sont vérifiées.

- (E₁) La fonction σ^* est une fonction strictement convexe de $U^* \in \mathcal{O}_{U^*}^{\epsilon^*}$ au sens où la matrice Hessienne est définie positive sur chaque coupe $\mathcal{O}_{U^*}^{\epsilon^*}$.
- (E₂) Il existe des fonctions réelles $\mathcal{C}^\infty$ $q_i^* = q_i^*(U^*, \epsilon^*)$ telles que

$$(\partial_{U^*} \sigma^*) A_i^* = \partial_{U^*} q_i^*, \quad i \in C^*, \quad (U^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}.$$

(E₃) On a les relations

$$(\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^{-1} B_{ij}^{*T} = B_{ji}^* (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^{-1}, \quad i, j \in C^*, \quad (U^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}.$$

(E₄) La matrice $\tilde{B}^* = \sum_{i,j \in C^*} B_{ij}^*(U^*, \epsilon^*) (\partial_{U^*}^2 \sigma^*(U^*, \epsilon^*))^{-1} \xi_i \xi_j$ est symétrique semi-définie positive pour $(U^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ et $\xi \in \Sigma^{d-1}$.

Kawashima et Shizuta ont établi [KS88, Gio99] l'équivalence entre la symétrisabilité conservative et l'existence d'une fonction entropie. Pour les systèmes dépendant d'un paramètre ϵ^* , certaines limitations sur le domaine $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ semblent nécessaires, comme la régularité des coupes $\epsilon^* \mapsto \mathcal{O}_{U^*}^{\epsilon^*}$ en utilisant des cartes locales. On donne ici une version simplifiée du théorème d'équivalence, suffisante pour l'application aux plasmas ambipolaires.

Théorème III.8

Si le système (III.33) admet une fonction entropie σ^* définie sur l'ouvert $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$, alors il peut être symétrisé sur $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ avec pour variable symétrique $V^* = (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^T$. Réciproquement, si le système (III.33) est symétrisable et si, par souci de simplicité, l'ouvert $\mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$ est de la forme $\mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)} = \mathcal{O}_{V^*} \times \mathcal{O}_{\epsilon^*}$, où $\mathcal{O}_{V^*} \subset \mathbb{R}^n$ est indépendant de ϵ^* et $\mathcal{O}_{\epsilon^*} \subset \mathbb{R}^{m^*}$ est indépendant de V^* , alors il existe une fonction entropie définie sur $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ telle que $V^* = (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^T$.

Preuve - III.8 -

On suppose dans un premier temps qu'il existe une entropie σ^* définie sur l'ouvert $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ et on définit la variable $V^* = (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^T$. L'application $(U^*, \epsilon^*) \mapsto (V^*, \epsilon^*)$ est alors un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme car les coupes $\mathcal{O}_{U^*}^{\epsilon^*}$ sont convexes et la matrice Jacobienne $\partial_{U^*} V^* = \partial_{U^*}^2 \sigma^*$ est symétrique définie positive. On peut alors définir les fonctions régulières suivantes

$$\hat{\sigma}^*(V^*, \epsilon^*) = U^{*T} V^* - \sigma^*(U^*, \epsilon^*) \quad \text{et} \quad \hat{q}_i^*(V^*, \epsilon^*) = F_i^*(U^*, \epsilon^*)^T V^* - q_i^*(U^*, \epsilon^*), \quad i \in C^*.$$

En différenciant ces égalités selon la variable V^* , on obtient directement les relations $(\partial_{V^*} \hat{\sigma}^*)^T = U^*$ et $(\partial_{V^*} \hat{q}_i^*)^T = F_i^*$, $i \in C^*$, grâce à la propriété (E₂). L'utilisation des propriétés (E₁-E₂) permet alors de montrer que $\tilde{A}_0^* = \partial_{V^*} U^* = (\partial_{U^*} V^*)^{-1} = (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^{-1}$ et $\tilde{A}_i^* = \partial_{V^*} F_i^* = \partial_{V^*}^2 \hat{q}_i^*$, $i \in C^*$, la matrice $\tilde{A}_0^*$ est ainsi symétrique définie positive et les matrices $\tilde{A}_i^*$, $i \in C^*$, sont symétriques. De plus, on déduit directement des propriétés (E₃-E₄) que les matrices $\tilde{B}_{ij}^* = B_{ij}^* (\partial_{U^*}^2 \sigma^*)^{-1}$, $i, j \in C^*$, vérifient les propriétés (S₃-S₄).

Réciproquement, on suppose que le système est symétrisable au sens de la définition III.3. Comme les matrices $\partial_{V^*} U^*$ et $\partial_{V^*} F_i^*$, $i \in C^*$, sont symétriques et que $\mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)} =$

$\mathcal{O}_{V^*} \times \mathcal{O}_{\epsilon^*}$ avec $\mathcal{O}_{V^*}$ simplement connexe, il existe des fonctions $\widehat{\sigma}^*$ et $\widehat{q}_i^*$, $i \in C^*$, définies sur $\mathcal{O}_{V^*}$, telles que $(\partial_{V^*} \widehat{\sigma}^*)^T = U^*$, $(\partial_{V^*} \widehat{q}_i^*)^T = F_i^*$, $i \in C^*$. On peut alors définir les fonctions

$$\sigma^*(U^*, \epsilon^*) = U^{*T} V^* - \widehat{\sigma}^*(V^*, \epsilon^*) \quad \text{et} \quad q_i^*(U^*, \epsilon^*) = F_i^{*T} V^* - \widehat{q}_i^*(V^*, \epsilon^*), \quad i \in C^*.$$

En différenciant ces relations et en utilisant les propriétés (S₁-S₃), on établit facilement que σ^* est une fonction entropie, que q_i^* , $i \in C^*$, sont les flux associés et que l'on a $V^* = (\partial_{U^*} \sigma^*)^T$. ■

III.4.2 Forme normale

On supposera que le système quasi-linéaire abstrait (III.33) satisfait la propriété suivante, ce qui permet exactement de pouvoir le récrire sous une forme symétrique.

(Edp₂) *Le système (III.33) admet une fonction entropie σ^* sur l'ouvert $\mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}$ et les coupes $\mathcal{O}_{U^*}^{\epsilon^*} = \{U^* \in \mathbb{R}^{n^*}; (U^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(U^*, \epsilon^*)}\}$ sont convexes.*

On introduit alors la variable symétrique $V^* = (\partial_{U^*} \sigma^*)^T$. Le système symétrique correspondant (III.34) vérifie donc les propriétés (S₁-S₄). Selon l'image des matrices de dissipation $\widetilde{B}_{ij}^*$, $i, j \in C^*$, le système se trouve entre les deux cas limites d'un système hyperbolique et d'un système fortement parabolique. De façon à séparer les variables hyperboliques des variables paraboliques, on met le système sous une forme normale, c'est-à-dire sous la forme d'un système composite symétrique hyperbolique-parabolique.

En introduisant une nouvelle variable W^* , associée à un difféomorphisme de $\mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$ sur $\mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$, et en multipliant la forme symétrique conservative (III.34) à gauche par la transposée de la matrice $\partial_{W^*} V^*$, on obtient un nouveau système en la variable W^* et on a la définition suivante d'une forme normale [KS88].

Définition III.5

On considère un système sous forme symétrique, au sens de la définition III.3, et un difféomorphisme $(V^, \epsilon^*) \mapsto (W^*, \epsilon^*)$ de l'ouvert $\mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$ sur l'ouvert $\mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$. Le système en la nouvelle variable W^**

$$\begin{aligned} \overline{A}_0^*(W^*, \epsilon^*) \partial_t W^* + \sum_{i \in C^*} \overline{A}_i^*(W^*, \epsilon^*) \partial_i W^* &= \sum_{i, j \in C^*} \partial_i (\overline{B}_{ij}^*(W^*, \epsilon^*) \partial_j W^*) \\ &\quad + \overline{T}^*(W^*, \epsilon^*, \partial_x W^*) + \overline{\Omega}^*(W^*, \epsilon^*), \end{aligned} \quad (\text{III.36})$$

où les coefficients matriciels et vectoriels

$$\begin{cases} \bar{A}_0^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{A}_0^* (\partial_{W^*} V^*), & \bar{A}_i^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{A}_i^* (\partial_{W^*} V^*), \\ \bar{B}_{ij}^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{B}_{ij}^* (\partial_{W^*} V^*), & \bar{\Omega}^* = (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{\Omega}^*, \\ \bar{T}^* = - \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (\partial_{W^*} V^*)^T \tilde{B}_{ij}^* (\partial_{W^*} V^*) \partial_j W^*, \end{cases} \quad (\text{III.37})$$

satisfont les propriétés $(\bar{S}_1 - \bar{S}_4)$.

($\bar{S}_1$) La matrice $\bar{A}_0^*(W^*, \epsilon^*)$ est symétrique définie positive pour $(W^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$.

($\bar{S}_2$) Les matrices $\bar{A}_i^*(W^*, \epsilon^*)$, $i \in C^*$, sont symétriques pour $(W^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$.

($\bar{S}_3$) On a $\bar{B}_{ij}^*(W^*, \epsilon^*)^T = \bar{B}_{ji}^*(W^*, \epsilon^*)$ pour $i, j \in C^*$ et $(W^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$.

($\bar{S}_4$) La matrice $\bar{B}^*(W^*, \epsilon^*, \xi) = \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^*(W^*, \epsilon^*) \xi_i \xi_j$ est symétrique semi-définie positive pour $(W^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$ et $\xi \in \Sigma^{d-1}$, où Σ^{d-1} est la sphère unité en dimension d .

Le système (III.36) est dit sous forme **normale** lorsqu'il existe une partition de $\{1, \dots, n^*\}$ en $I = \{1, \dots, n_0^*\}$ et $II = \{n_0^*+1, \dots, n^*\}$, telle que les propriétés (**Nor**₁-**Nor**₃) sont vérifiées.

(Nor**₁)** Les matrices $\bar{A}_0^*$ et $\bar{B}_{ij}^*$, $i, j \in C^*$, ont la structure blocs suivante

$$\bar{A}_0^* = \begin{pmatrix} \bar{A}_0^{*I,I} & 0 \\ 0 & \bar{A}_0^{*II,II} \end{pmatrix}, \quad \bar{B}_{ij}^* = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \bar{B}_{ij}^{*II,II} \end{pmatrix}.$$

(Nor**₂)** La matrice $\bar{B}^{*II,II}(W^*, \epsilon^*, \xi) = \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \xi_i \xi_j$ est une matrice symétrique définie positive, pour $(W^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$ et $\xi \in \Sigma^{d-1}$.

(Nor**₃)** En notant $\partial_x = (\partial_1, \dots, \partial_d)^T$, on a

$$\bar{T}^*(W^*, \epsilon^*, \partial_x W^*) = \left(\bar{T}_I^*(W^*, \epsilon^*, \partial_x W_{II}^*), \bar{T}_{II}^*(W^*, \epsilon^*, \partial_x W^*) \right)^T.$$

On a utilisé la structure blocs vectorielle et matricielle induite par la partition de $\{1, \dots, n^*\}$ en $I = \{1, \dots, n_0^*\}$ et $II = \{n_0^*+1, \dots, n^*\}$. On a par exemple $W^* = (W_I^{*T}, W_{II}^{*T})^T$.

Une condition suffisante pour que le système (III.34) puisse être mis sous forme normale est que le noyau naturellement associé aux matrices de dissipation soit un sous-espace fixe de $\mathbb{R}^{n^*}$. C'est la Condition N introduite par Kawashima et Shizuta que l'on supposera à présent vérifiée. On renforce cette condition en supposant qu'il existe une représentation explicite régulière de ce noyau par rapport à ϵ^* .

(Edp₃) (Invariance des noyaux) *Le noyau de la matrice*

$$\tilde{B}^*(V^*, \epsilon^*, \xi) = \sum_{i,j \in C^*} \tilde{B}_{ij}^*(V^*, \epsilon^*) \xi_i \xi_j,$$

ne dépend ni de $V^ \in \mathcal{O}_{V^*}$ ni de $\xi \in \Sigma^{d-1}$, on note n_0^* sa dimension, $n_0^* = \text{Dim}(N(\tilde{B}^*))$, et on a $\tilde{B}_{ij}^*(V^*, \epsilon^*) N(\tilde{B}^*) = 0$, $i, j \in C^*$. De plus, il existe une application $\mathcal{C}^\infty \epsilon^* \mapsto P^*(\epsilon^*)$, telle que les n_0^* premières colonnes de la matrice $P^*(\epsilon^*)$ engendrent le noyau $N(\tilde{B}^*)$.*

Afin de caractériser plus facilement les formes normales pour les systèmes symétriques de lois de conservation satisfaisant les propriétés (Edp₁-Edp₃), on introduit les variables auxiliaires [GM98, Gio99] $U^{*'} = P^{*T}U^*$ et $V^{*'} = P^{*-1}V^*$. Les matrices de dissipation correspondant à ces variables auxiliaires n'ont de coefficients non nuls que dans le bloc en bas à droite de taille $n^* - n_0^*$, où $n_0^* = \text{Dim}(N(\tilde{B}^*))$. Les formes symétriques normales sont alors obtenues par équivalence à partir de l'équation en la variable symétrique $V^{*'}$ [GM98, Gio99]. Un examen attentif de la preuve de Giovangigli et Massot montre que le théorème suivant est vérifié.

Théorème III.9

On considère un système de lois de conservation (III.34) sous forme symétrique au sens de la définition III.3 et on suppose que la propriété d'invariance du noyau (Edp₃) est satisfaite. En notant $U^{'} = P^{*T}U^*$ et $V^{*'} = P^{*-1}V^*$, les variables auxiliaires usuelles, toute forme normale du système (III.34) est donnée par un changement de variables de la forme*

$$W^* = (\phi_I(U_I^{*'}, \epsilon^*), \phi_{II}(V_{II}^{*'}, \epsilon^*))^T,$$

où ϕ_I et ϕ_{II} sont deux difféomorphismes de $\mathbb{R}^{n_0^} \times \mathbb{R}^{m^*}$ et $\mathbb{R}^{n^* - n_0^*} \times \mathbb{R}^{m^*}$ respectivement et on a*

$$\overline{T}^*(W^*, \epsilon^*, \partial_x W^*) = \left(0, \overline{T}_{II}^*(W^*, \epsilon^*, \partial_x W_{II}^*)\right)^T.$$

III.4.3 Existence locale

Dans cette section, on étudie l'existence locale de solutions autour des états d'équilibre et la dépendance continue des solutions en un paramètre. On considère un

système de lois de conservation satisfaisant les propriétés (Edp₁-Edp₃) ainsi que la propriété (Edp₄) suivante.

(Edp₄) *Le système (III.33) admet un point d'équilibre U^{*e} indépendant de ϵ^* .*

On désignera par V^{*e} et W^{*e} le point d'équilibre dans la variable V^* et W^* respectivement. On suppose pour simplifier que le domaine $\mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$ contient un sous-ensemble de la forme $\mathcal{O}_{W^*} \times K_{\epsilon^*}$, où $\mathcal{O}_{W^*}$ est un ouvert de $\mathbb{R}^{n^*}$ indépendant de ϵ^* , tel que $W^{*e} \in \mathcal{O}_{W^*}$, et où K_{ϵ^*} est un compact de $\mathbb{R}^{m^*}$. Dans la suite, on étudie la dépendance des solutions locales en le paramètre ϵ^* . On note $\|\cdot\|_A$ la norme dans un espace fonctionnel A , sauf lorsque A est l'espace de Sobolev $W_2^l(\mathbb{R}^d)$, où on la note $\|\cdot\|_l$.

Théorème III.10

Soient $d \geq 1$ et $l \geq [d/2] + 2$ des entiers, où $[\cdot]$ désigne la partie entière, et soit $b > 0$. Soit $\mathcal{O}_0$ un ouvert tel que $\overline{\mathcal{O}_0} \subset \mathcal{O}_{W^*}$, et soit d_1 tel que $0 < d_1 < d(\overline{\mathcal{O}_0}, \partial\mathcal{O}_{W^*})$. On définit $\mathcal{O}_1 = \{W^* \in \mathcal{O}_{W^*}; d(W^*, \overline{\mathcal{O}_0}) < d_1\}$. Il existe alors $\bar{\tau} > 0$ suffisamment petit, qui ne dépend que de $\mathcal{O}_1$, b et K_{ϵ^*} , tel que pour tout $W^{*0} \in \overline{\mathcal{O}_0}$ avec $\|W^{*0} - W^{*e}\|_l < b$ et pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, il existe une unique solution locale W^* au système

$$\bar{A}_0^* \partial_t W^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^* \partial_i W^* = \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (\bar{B}_{ij}^* \partial_j W^*) + \bar{T}^* + \bar{\Omega}^*, \quad (\text{III.38})$$

sous la condition initiale

$$W^*(0, \mathbf{x}) = W^{*0}(\mathbf{x}),$$

telle que

$$W^*(t, \mathbf{x}) \in \mathcal{O}_1,$$

et

$$\begin{aligned} W_I^* - W_I^{*e} &\in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \bar{\tau}], W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \\ W_{II}^* - W_{II}^{*e} &\in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \bar{\tau}], W_2^{l-2}(\mathbb{R}^d)) \cap L^2((0, \bar{\tau}), W_2^{l+1}(\mathbb{R}^d)). \end{aligned}$$

De plus, il existe une constante $C > 0$, qui ne dépend que de l'ouvert $\mathcal{O}_1$, de b et de K_{ϵ^*} , tel que

$$\sup_{0 \leq \tau \leq \bar{\tau}} \|W^*(\tau) - W^{*e}\|_l^2 + \int_0^{\bar{\tau}} \|W_{II}^*(\tau) - W_{II}^{*e}\|_{l+1}^2 d\tau \leq C \|W^{*0} - W^{*e}\|_l^2. \quad (\text{III.39})$$

Finalement, si W^* est la solution correspondant à l'état initial W^{*0} et au paramètre ϵ^* et $\hat{W}^*$ la solution correspondant à l'état initial $\hat{W}^{*0}$ et au paramètre $\hat{\epsilon}^*$, on a

l'estimation

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq \tau \leq \bar{\tau}} \|W^*(\tau) - \widehat{W}^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \int_0^{\bar{\tau}} \|W_{\Pi}^*(\tau) - \widehat{W}_{\Pi}^*(\tau)\|_l^2 d\tau \\ \leq C \left(\|W^{*0} - \widehat{W}^{*0}\|_{l-1}^2 + \delta_{l-1}^2(\epsilon^*, \hat{\epsilon}^*) \right), \end{aligned} \quad (\text{III.40})$$

où $C > 0$ ne dépend que de l'ouvert $\mathcal{O}_1$, de b et de K_{ϵ^*} et où

$$\begin{aligned} \delta_{l-1}(\epsilon^*, \hat{\epsilon}^*) = & \|\bar{A}_0^*(\cdot, \epsilon^*) - \bar{A}_0^*(\cdot, \hat{\epsilon}^*)\|_{\mathcal{C}^{l-1}(\bar{\mathcal{O}}_1)} + \sum_{i \in C^*} \|\bar{A}_i^*(\cdot, \epsilon^*) - \bar{A}_i^*(\cdot, \hat{\epsilon}^*)\|_{\mathcal{C}^{l-1}(\bar{\mathcal{O}}_1)} \\ & + \sum_{i,j \in C^*} \|\bar{B}_{ij}^*(\cdot, \epsilon^*) - \bar{B}_{ij}^*(\cdot, \hat{\epsilon}^*)\|_{\mathcal{C}^{l-1}(\bar{\mathcal{O}}_1)} + \|\bar{\Omega}^*(\cdot, \epsilon^*) - \bar{\Omega}^*(\cdot, \hat{\epsilon}^*)\|_{\mathcal{C}^{l-1}(\bar{\mathcal{O}}_1)}. \end{aligned}$$

Preuve - III.10 -

Les solutions du système non linéaire (III.38) sont les points fixes $\widetilde{W}^* = W^*$ des équations linéaires [Kaw84]

$$\begin{cases} \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \partial_t \widetilde{W}_I^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \partial_i \widetilde{W}_I^* = f_I^*(W^*, \partial_x W_{\Pi}^*, \epsilon^*), \\ \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \partial_t \widetilde{W}_{\Pi}^* - \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \partial_i \partial_j \widetilde{W}_{\Pi}^* = f_{\Pi}^*(W^*, \partial_x W^*, \epsilon^*), \end{cases} \quad (\text{III.41})$$

où les seconds membres f_I^* et f_{Π}^* sont définis par

$$\begin{aligned} f_I^* &= - \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,II}(W^*, \epsilon^*) \partial_i W_{\Pi}^* + \bar{\Omega}_I^*(W^*, \epsilon^*), \\ f_{\Pi}^* &= - \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \partial_i W_{\Pi}^* - \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*II,I}(W^*, \epsilon^*) \partial_i W_I^* \\ &\quad + \bar{\mathcal{T}}_{\Pi}^*(W^*, \partial_x W^*, \epsilon^*) + \bar{\Omega}_{\Pi}^*(W^*, \epsilon^*) + \sum_{i,j \in C^*} \partial_i \left(\bar{B}_{ij}^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \right) \partial_j W_{\Pi}^*. \end{aligned}$$

Ce système est formé de deux équations non couplées, la première est hyperbolique symétrique en $\widetilde{W}_I^*$ et la seconde fortement parabolique symétrique en $\widetilde{W}_{\Pi}^*$. Les points

fixes de ce système sont étudiés dans l'espace $X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M, M_1)$ défini par

$$W^* \in X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M, M_1) \iff \begin{cases} W^* \in \mathcal{O}_1, \\ W_I^* - W_I^{*e} \in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^l(\mathbb{R}^d)), \\ \partial_t W_I^* \in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \\ W_{II}^* - W_{II}^{*e} \in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap L^2(\mathbb{R}^d)((0, \bar{\tau}), W_2^{l+1}(\mathbb{R}^d)), \\ \partial_t W_{II}^* \in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^{l-2}(\mathbb{R}^d)) \cap L^2(\mathbb{R}^d)((0, \bar{\tau}), W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \\ \sup_{0 \leq \tau \leq \bar{\tau}} \|W^*(\tau) - W^{*e}\|_l^2 + \int_0^{\bar{\tau}} \|W_{II}^*(\tau) - W_{II}^{*e}\|_{l+1}^2 d\tau \leq M^2, \\ \int_0^{\bar{\tau}} \|\partial_t W^*(\tau)\|_{l-1}^2 d\tau \leq M_1^2. \end{cases}$$

On obtient alors [Kaw84] que pour tout $W^* \in X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M, M_1)$, il existe une unique solution $\tilde{W}^*$ du système (III.41) telle que $\tilde{W}_I^* - W_I^{*e} \in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^l(\mathbb{R}^d))$, $\tilde{W}_{II}^* - W_{II}^{*e} \in \mathcal{C}^0([0, \bar{\tau}], W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap L^2((0, \bar{\tau}), W_2^{l+1}(\mathbb{R}^d))$ et telle que les estimations suivantes sont vérifiées pour $2 \leq k \leq l$ et $0 \leq t \leq \bar{\tau}$,

$$\begin{aligned} \|\tilde{W}^*(t) - W^{*e}\|_k^2 + \int_0^t \|\tilde{W}_{II}^*(\tau) - W_{II}^{*e}\|_{k+1}^2 d\tau &\leq C_1^2 \exp(C_2(t + M_1\sqrt{t})) \\ &\times \left(\|W^{*0} - W^{*e}\|_k^2 + C_2 t \int_0^t \|f_I^*(\tau)\|_k^2 d\tau + C_2 \int_0^t \|f_{II}^*(\tau)\|_{k-1}^2 d\tau \right), \end{aligned} \quad (\text{III.42})$$

où $C_1 = C_1(\mathcal{O}_1, K_{\epsilon^*})$ ne dépend que de $\mathcal{O}_1$ et de K_{ϵ^*} et $C_2 = C_2(\mathcal{O}_1, M, K_{\epsilon^*})$ ne dépend que de $\mathcal{O}_1$, de M et de K_{ϵ^*} et est une fonction croissante de M . En utilisant l'estimation classique pour une fonction f de classe $\mathcal{C}^l$ et une fonction ϕ de $W_2^l(\mathbb{R}^d)$,

$$\|f(\phi) - f(0)\|_{l-1} \leq C_0 \|f\|_{\mathcal{C}^l(|\cdot| \leq \|\phi\|_{L^\infty})} (1 + \|\phi\|_{L^\infty})^{l-1} \|\phi\|_l,$$

où C_0 est une constante universelle, on obtient les majorations suivantes

$$\|f_I^*(t)\|_{l-1}^2 + \|f_{II}^*(t)\|_{l-1}^2 \leq C_2 M^2, \quad \int_0^t \|f_I^*(\tau)\|_l^2 d\tau \leq C_2(1+t)M^2. \quad (\text{III.43})$$

On déduit des équations de bilan l'inégalité suivante

$$\int_0^{\bar{\tau}} \|\partial_t \tilde{W}^*(\tau)\|_{l-1}^2 d\tau \leq C_3^2(\bar{M}^2 + \bar{\tau}(M^2 + \bar{M}^2)), \quad (\text{III.44})$$

où $\bar{M}$ est définie pour $\tilde{W}^*$ comme M pour W^* et $C_3 = C_3(\mathcal{O}_1, M, K_{\epsilon^*})$ ne dépend que de $\mathcal{O}_1$, de M et de K_{ϵ^*} et est une fonction croissante de M . Pour $\alpha \in (0, b]$, on définit

$$M_\alpha = 2C_1(\mathcal{O}_1, K_{\epsilon^*})\alpha, \quad M_{1\alpha} = 2C_3(\mathcal{O}_1, M_b, K_{\epsilon^*})2C_1(\mathcal{O}_1, K_{\epsilon^*})\alpha.$$

On choisit ensuite $\bar{\tau} \leq 3/2$ et $b > 0$ suffisamment petits pour que

$$\begin{aligned} \exp(C_2(\mathcal{O}_1, M_b, K_{\epsilon^*})(\bar{\tau} + M_{1b}\sqrt{\bar{\tau}})) &\leq 2, \\ C_2^2(\mathcal{O}_1, M_b, K_{\epsilon^*})\bar{\tau}(1 + \bar{\tau})4C_1^2(\mathcal{O}_1, K_{\epsilon^*}) &\leq 1, \\ C_0M_{1b}\sqrt{\bar{\tau}} &< d_1, \end{aligned}$$

où la constante C_0 est la norme de l'injection de $L^\infty(\mathbb{R}^d)$ dans $W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)$, c'est-à-dire que $\|\phi\|_{L^\infty} \leq C_0\|\phi\|_{l-1}$.

Alors, pour tout $\alpha \in (0, b]$, $W^* \in X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M_\alpha, M_{1\alpha})$ et W^{*0} tels que $W^{*0} - W^{*e} \in W_2^l(\mathbb{R}^d)$, $W^{*0} \in \bar{\mathcal{O}}_0$ et $\|W^{*0} - W^{*e}\|_l < \alpha$ et pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, la solution $\tilde{W}^*$ des équations linéaires (III.41) est dans le même espace $X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M_\alpha, M_{1\alpha})$. Plus précisément, les relations (III.42) et (III.43) fournissent l'estimation

$$\tilde{M}^2 \leq 2C_1^2\alpha^2(1 + 4C_1^2C_2^2\bar{\tau}(1 + 2\bar{\tau})) \leq 4C_1^2\alpha^2 = M_\alpha^2,$$

on déduit de (III.44) que

$$\tilde{M}_1^2 \leq 4C_1^2C_3^2\alpha^2(1 + 2\bar{\tau}) \leq M_{1\alpha}^2,$$

et finalement que

$$\|\tilde{W}^* - W^{*0}\|_{L^\infty} \leq C_0M_{1\alpha}\sqrt{\bar{\tau}} < d_1.$$

Pour déterminer les points fixes, on montre que, pour $\bar{\tau}$ suffisamment petit, l'application $W^* \mapsto \tilde{W}^*$ est une contraction de l'espace $X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M_\alpha, M_{1\alpha})$ pour tout $\alpha \in (0, b]$ et pour la norme

$$\sup_{0 \leq \tau \leq \bar{\tau}} \|W^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \int_0^{\bar{\tau}} \|W_{II}^*(\tau)\|_l^2 d\tau.$$

Et on établit simultanément l'inégalité (III.40). On considère W^* et $\hat{W}^*$ dans l'espace $X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M_b, M_{1b})$, des conditions initiales W^{*0} et $\hat{W}^{*0}$ dans l'espace $\bar{\mathcal{O}}_0$ telles que

$$\begin{aligned} W^{*0} - W^{*e} &\in W_2^l(\mathbb{R}^d), \quad \|W^{*0} - W^{*e}\|_l < \alpha, \\ \hat{W}^{*0} - W^{*e} &\in W_2^l(\mathbb{R}^d), \quad \|\hat{W}^{*0} - W^{*e}\|_l < \alpha, \end{aligned}$$

et ϵ^* et $\hat{\epsilon}^*$ des paramètres de K_{ϵ^*} . On définit $\delta W^* = W^* - \hat{W}^*$ et $\delta \tilde{W}^* = \tilde{W}^* - \hat{\tilde{W}}^*$. En formant la différence des équations linéaires, on obtient le système

$$\begin{cases} \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*)\partial_t \delta \tilde{W}_I^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,I}(W^*, \epsilon^*)\partial_i \delta \tilde{W}_I^* = \delta_{W^*} f_I^* + \delta_{\epsilon^*} f_I^*, \\ \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*)\partial_t \delta \tilde{W}_{II}^* - \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^{*II,II}(W^*, \epsilon^*)\partial_i \partial_j \delta \tilde{W}_{II}^* = \delta_{W^*} f_{II}^* + \delta_{\epsilon^*} f_{II}^*, \end{cases} \quad (\text{III.45})$$

avec

$$\begin{aligned} \delta_{W^*} f_I^* &= f_I^*(W^*, \partial_x W_{II}^*, \epsilon^*) - \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} f_I^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}_{II}^*, \epsilon^*) \\ &\quad + \sum_{i \in C^*} \left(\bar{A}_i^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) - \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} \bar{A}_i^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*) \right) \partial_i \hat{W}_I^*, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{\epsilon^*} f_I^* &= \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \left(\bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} - \bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*)^{-1} \right) f_I^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}_{II}^*, \epsilon^*) \\ &\quad + \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} \left(f_I^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}_{II}^*, \epsilon^*) - f_I^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}_{II}^*, \hat{\epsilon}^*) \right) \\ &\quad + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \left(\bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} - \bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*)^{-1} \right) \bar{A}_i^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*) \partial_i \hat{W}_I^* \\ &\quad + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_0^{*I,I}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*I,I}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*)^{-1} \left(\bar{A}_i^{*I,I}(\hat{W}^*, \epsilon^*) - \bar{A}_i^{*I,I}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*) \right) \partial_i \hat{W}_I^*, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{W^*} f_{II}^* &= f_{II}^*(W^*, \partial_x W^*, \epsilon^*) - \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} f_{II}^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}^*, \epsilon^*) \\ &\quad - \sum_{i,j \in C^*} \left(\bar{B}_{ij}^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) - \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} \bar{B}_{ij}^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*) \right) \partial_i \hat{W}_{II}^* \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \delta_{\epsilon^*} f_{II}^* &= \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \left(\bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} - \bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*)^{-1} \right) f_{II}^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}^*, \epsilon^*) \\ &\quad + \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} \left(f_{II}^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}^*, \epsilon^*) - f_{II}^*(\hat{W}^*, \partial_x \hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*) \right) \\ &\quad - \sum_{i \in C^*} \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \left(\bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*)^{-1} - \bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*)^{-1} \right) \bar{B}_{ij}^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*) \partial_i \hat{W}_{II}^* \\ &\quad - \sum_{i \in C^*} \bar{A}_0^{*II,II}(W^*, \epsilon^*) \bar{A}_0^{*II,II}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*)^{-1} \left(\bar{B}_{ij}^{*II,II}(\hat{W}^*, \epsilon^*) - \bar{B}_{ij}^{*II,II}(\hat{W}^*, \hat{\epsilon}^*) \right) \partial_i \hat{W}_{II}^*. \end{aligned}$$

Ces expressions impliquent en particulier les relations

$$\begin{aligned} \|\delta_{W^*} f_I^*\|_{l-1}^2 &\leq C_4 (\|\delta W_I^*\|_{l-1}^2 + \|\delta W_{II}^*\|_l^2), \\ \|\delta_{W^*} f_{II}^*\|_{l-2}^2 &\leq C_4 (\|\delta W_I^*\|_{l-1}^2 + \|\delta W_{II}^*\|_{l-1}^2), \\ \|\delta_{\epsilon^*} f_I^*\|_{l-1}^2 + \|\delta_{\epsilon^*} f_{II}^*\|_{l-2}^2 &\leq C_5 \delta_{l-1}^2(\epsilon^*, \hat{\epsilon}^*), \end{aligned}$$

et on en déduit alors l'estimation

$$\begin{aligned} \sup_{0 \leq \tau \leq \bar{\tau}} \|\delta \tilde{W}^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \int_0^{\bar{\tau}} \|\delta \tilde{W}_{II}^*(\tau)\|_l^2 d\tau &\leq C_6 \left(\|W^{*0} - \hat{W}^{*0}\|_{l-1}^2 + \delta_{l-1}^2(\epsilon^*, \hat{\epsilon}^*) \right) \\ &\quad + C_7 \bar{\tau} (1 + \bar{\tau}) \left(\sup_{0 \leq \tau \leq \bar{\tau}} \|\delta W^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \int_0^{\bar{\tau}} \|\delta W_{II}^*(\tau)\|_l^2 d\tau \right), \quad (\text{III.46}) \end{aligned}$$

où les constantes C_4 , C_5 , C_6 et C_7 dépendent de $\mathcal{O}_1$, de b et de K_{ϵ^*} .

A présent, si $\bar{\tau}$ est suffisamment petit pour que $C_7\bar{\tau}(1 + \bar{\tau}) < 1/2$, en posant $W^{*0} = \widehat{W}^{*0}$ et $\epsilon^* = \hat{\epsilon}^*$, on obtient que l'application $W^* \mapsto \widetilde{W}^*$ est une contraction dans l'espace $X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M_\alpha, M_{1\alpha})$, pour $\alpha \in (0, b]$, pour la norme

$$\sup_{0 \leq \tau \leq \bar{\tau}} \|W^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \int_0^{\bar{\tau}} \|W_{II}^*(\tau)\|_l^2 d\tau.$$

On introduit alors la suite $(W^{*(n)})_{n \geq 0}$ définie ainsi par itération

$$W^{*(0)}(t, \mathbf{x}) = W^{*0}(\mathbf{x}), \quad W^{*(n+1)} = \widetilde{W}^{*(n)},$$

c'est-à-dire que $W^{*(n+1)}$ est la solution des équations linéaires en prenant $W^* = W^{*(n)}$. La suite $(W^{*(n)})_{n \geq 0}$ converge alors vers une solution locale des équations non linéaires qui satisfait de plus les estimations (III.39) au rang $l-1$. L'inégalité (III.40) est alors obtenue par passage à la limite dans (III.46). Finalement les estimations (III.39) au rang l sont obtenues car pour tout $\alpha \in (0, b]$, l'espace $X_{\bar{\tau}}(\mathcal{O}_1, M_\alpha, M_{1\alpha})$ est invariant, ce qui complète la preuve. ■

III.5 Existence globale et stabilité asymptotique pour un système abstrait

Dans cette section, on étudie la stabilité asymptotique des états d'équilibre pour un système abstrait de lois de conservation sous forme normale et la continuité de la dépendance des solutions en un paramètre. On considère un système de lois de conservation satisfaisant les propriétés (Edp₁-Edp₄) et on suppose pour simplifier que le domaine $\mathcal{O}_{(W^*, \epsilon^*)}$ contient un sous-espace de la forme $\mathcal{O}_{W^*} \times K_{\epsilon^*}$, où $\mathcal{O}_{W^*}$ est un ouvert de $\mathbb{R}^{n^*}$ indépendant de ϵ^* et K_{ϵ^*} un compact de $\mathbb{R}^{m^*}$ indépendant de W^* , ou bien plus généralement qu'il existe une extension régulière des coefficients du système à un tel domaine.

III.5.1 Dissipativité locale

En linéarisant le système (III.36) autour d'un état d'équilibre constant W^{*e} , on obtient un système linéaire en la variable $w^* = W^* - W^{*e}$

$$\bar{A}_0^*(W^{*e}, \epsilon^*) \partial_t w^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^*(W^{*e}, \epsilon^*) \partial_i w^* = \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^*(W^{*e}, \epsilon^*) \partial_i \partial_j w^* - \bar{L}^*(W^{*e}, \epsilon^*) w^*, \quad (\text{III.47})$$

où $\bar{L}^*$ est définie par $\bar{L}^* = -\partial_{W^*} \bar{\Omega}^*$. Par une transformation de Fourier, le problème spectral associé à ce système linéaire s'écrit

$$\lambda \bar{A}_0^*(W^{*e}, \epsilon^*) \phi + \left(\zeta \bar{A}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) - \zeta^2 \bar{B}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) + \bar{L}^*(W^{*e}, \epsilon^*) \right) \phi = 0, \quad (\text{III.48})$$

où $\zeta \in i\mathbb{R}$, $i^2 = -1$, $\xi \in \Sigma^{d-1}$, $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ et les matrices $\bar{A}^*$ et $\bar{B}^*$ sont définies par

$$\bar{A}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) = \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^*(W^{*e}, \epsilon^*) \xi_i, \quad \bar{B}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) = \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^*(W^{*e}, \epsilon^*) \xi_i \xi_j.$$

On notera $\Lambda(\zeta, \xi, \epsilon^*)$ l'ensemble des nombres complexes λ tels qu'il existe un vecteur $\phi \in \mathbb{C}^{n^*}$, $\phi \neq 0$, satisfaisant (III.48).

Les résultats de Shizuta et Kawashima [SK85] peuvent directement être généralisés aux situations dépendant d'un paramètre.

Théorème III.11

Les propriétés suivantes sont équivalentes.

(Spe₁) *Il existe une matrice de compensation K définie et $\mathcal{C}^\infty$ sur $\Sigma^{d-1} \times K_{\epsilon^*}$. Pour tout $\xi \in \Sigma^{d-1}$ et pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, la matrice $K(\xi, \epsilon^*)$ est réelle, le produit $K(\xi, \epsilon^*) \bar{A}_0^*(W^{*e}, \epsilon^*)$ est antisymétrique, $K(-\xi, \epsilon^*) = -K(\xi, \epsilon^*)$ et la matrice*

$$K(\xi, \epsilon^*) \bar{A}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) + \bar{B}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) + \bar{L}^*(W^{*e}, \epsilon^*)$$

est définie positive.

(Spe₂) *Soit $\zeta \in i\mathbb{R}$, $\zeta \neq 0$, $\xi \in \Sigma^{d-1}$ et $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. Alors toutes les valeurs propres λ de $\Lambda(\zeta, \xi, \epsilon^*)$ ont une partie réelle négative.*

(Spe₃) *Soit $\Psi \in \mathbb{R}^{n^*} \setminus \{0\}$ tel que $\bar{B}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) \Psi = \bar{L}^*(W^{*e}, \epsilon^*) \Psi = 0$ pour $\xi \in \Sigma^{d-1}$ et $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. Alors on a $\zeta \bar{A}_0^*(W^{*e}, \epsilon^*) \Psi + \bar{A}^*(W^{*e}, \xi, \epsilon^*) \Psi \neq 0$ pour tout $\zeta \in \mathbb{R}$.*

(Spe₄) *Il existe $\delta > 0$ tel que pour tout $\zeta \in i\mathbb{R}$, $\xi \in \Sigma^{d-1}$, $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ et pour toute valeur propre λ de $\Lambda(W^*, \xi, \epsilon^*)$, on a*

$$\Re(\lambda) \leq -\delta \frac{|\zeta|^2}{1 + |\zeta|^2}.$$

Remarque - *Il n'est pas prouvé que la matrice de compensation $K(\xi, \epsilon^*)$ est de la forme $\sum_{j \in C^*} K^j(\epsilon^*) \xi_j$. Cependant, pour les applications pratiques, il est généralement possible d'obtenir des matrices de compensation de cette forme.*

Ce théorème est démontré en prouvant les implications suivantes (Spec₁) implique (Spec₄), (Spec₄) implique (Spec₂), (Spec₂) implique (Spec₃) et enfin (Spec₃) implique (Spec₁), après avoir remarqué que l'on peut se ramener au cas où la matrice $\bar{A}_0^*$ vaut l'identité. L'implication la plus délicate est la dernière pour laquelle il faut exhiber une matrice de compensation qui ait les propriétés recherchées. Elle se montre en étudiant les espaces propres de la matrice $\bar{A}^*(\xi, \epsilon^*)$ qui est symétrique par hypothèse et en utilisant les opérateurs de projection totale sur chaque espace propre. La régularité des matrices de compensation est alors une conséquence de leur représentation explicite en utilisant les calculs opérationnels matriciels [SK85].

III.5.2 Existence globale et stabilité asymptotique

On étudie à présent l'existence des solutions globales en temps autour des états d'équilibre. On suppose que le système est strictement dissipatif au sens du théorème III.11 et que le terme source est dissipatif au sens où les propriétés (Dis₁-Dis₄) sont vérifiées.

(Dis₁) *Pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, la matrice $\bar{A}_0^*(W^*, \epsilon^*)$ est symétrique définie positive, les matrices $\bar{A}_i^*(W^*, \epsilon^*)$, $i \in C^*$, sont symétriques, on a les relations de symétrie $\bar{B}_{ij}^*(W^*, \epsilon^*)^T = \bar{B}_{ji}^*(W^*, \epsilon^*)$, $i, j \in C^*$ et la matrice $\bar{L}^*(W^*, \epsilon^*)$ est symétrique semi-définie positive.*

(Dis₂) *Le système linéarisé a une structure strictement dissipative au sens du théorème III.11.*

(Dis₃) *Le plus petit sous-espace vectoriel contenant le terme source $\tilde{\Omega}^*(V^*, \epsilon^*)$, pour tout $(V^*, \epsilon^*) \in \mathcal{O}(V^*, \epsilon^*)$, est inclus dans l'image de $\tilde{L}^*(V^*, \epsilon^*)$, avec $\tilde{L}^* = (\partial_{V^*} W^*)^T \bar{L}^* \partial_{V^*} W^*$.*

(Dis₄) Pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, il existe un voisinage de (V^{*e}, ϵ^*) dans $\mathcal{O}_{(V^*, \epsilon^*)}$ et une constante strictement positive $\delta > 0$ telle que pour tout (V^*, ϵ^*) dans ce voisinage, on a

$$\delta |\tilde{\Omega}^*(V^*, \epsilon^*)|^2 \leq -\langle V^* - V^{*e}, \tilde{\Omega}^*(V^*, \epsilon^*) \rangle.$$

Théorème III.12

Soient $d \geq 1$ et $l \geq [d/2] + 2$ des entiers. Il existe alors $b > 0$ suffisamment petit tel que si W^{*0} satisfait $\|W^{*0} - W^{*e}\|_l < b$, il existe une unique solution globale W^* pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ au problème de Cauchy

$$\bar{A}_0^* \partial_t W^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^* \partial_i W^* = \sum_{i,j \in C^*} \partial_i (\bar{B}_{ij}^* \partial_j W^*) + \bar{T}^* + \bar{\Omega}^*,$$

avec la condition initiale

$$W^*(0, \mathbf{x}) = W^{*0}(\mathbf{x}),$$

telle que

$$\begin{aligned} W_I^* - W_I^{*e} &\in \mathcal{C}^0([0, \infty), W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \infty), W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \\ W_{II}^* - W_{II}^{*e} &\in \mathcal{C}^0([0, \infty), W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \infty), W_2^{l-2}(\mathbb{R}^d)), \\ \partial_{\mathbf{x}} W_I^* &\in L^2((0, \infty), W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \quad \partial_{\mathbf{x}} W_{II}^* \in L^2((0, \infty), W_2^l(\mathbb{R}^d)). \end{aligned}$$

De plus, W^* satisfait les estimations

$$\|W^*(t) - W^{*e}\|_l^2 + \int_0^t (\|\partial_{\mathbf{x}} W_I^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \|\partial_{\mathbf{x}} W_{II}^*(\tau)\|_l^2) d\tau \leq C \|W^{*0} - W^{*e}\|_l^2,$$

uniformément en ϵ^* , où C est une constante strictement positive, et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} |W^*(t, \mathbf{x}) - W^{*e}(\mathbf{x})| = 0,$$

uniformément en ϵ^* . Finalement, si on explicite la dépendance en ϵ^* en notant $W^*(t, \mathbf{x}, \epsilon^*)$ la solution obtenue pour $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, on a pour tout $\alpha^* \in K_{\epsilon^*}$

$$\lim_{\substack{\epsilon^* \rightarrow \alpha^* \\ \epsilon^* \in K_{\epsilon^*}}} \sup_{t \geq 0} \|W^*(t, \cdot, \epsilon^*) - W^*(t, \cdot, \alpha^*)\|_{\mathcal{C}^{l-[d/2]+2}} = 0.$$

L'idée principale est que toutes les estimations usuelles peuvent être faites uniformément en ϵ^* car on considère que ce paramètre varie dans un ensemble compact K_{ϵ^*} . Grâce au théorème d'existence locale et aux estimations uniformes, les solutions globales sont obtenues pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. De plus, la continuité en le paramètre

ϵ^* est une conséquence de la continuité sur les intervalles de temps finis et de la stabilité asymptotique uniforme.

On définit $N_l(t) = N_l(0, t)$ où

$$N_l(t_1, t_2)^2 = \sup_{t_1 \leq \tau \leq t_2} \|W^*(\tau) - W^{*e}\|_l^2 + \int_{t_1}^{t_2} (\|\partial_x W_I^*(\tau)\|_{l-1}^2 + \|\partial_x W_{II}^*(\tau)\|_l^2) d\tau.$$

Lemme III.13

On note $\bar{\sigma}^*$ l'entropie modifiée suivante

$$\bar{\sigma}^*(W^*, \epsilon^*) = \sigma^*(W^*, \epsilon^*) - \sigma^*(W^{*e}, \epsilon^*) - (\partial_{W^*} \sigma^*(W^{*e}, \epsilon^*))(W^* - W^{*e}).$$

Alors il existe un voisinage $\mathfrak{B}$ de W^{*e} et des constantes $\underline{c}$ et $\bar{c}$ strictement positives tels que

$$\forall W^* \in \mathfrak{B} \quad \forall \epsilon^* \in K_{\epsilon^*}, \quad \underline{c}|W^* - W^{*e}|^2 \leq \bar{\sigma}^*(W^*, \epsilon^*) \leq \bar{c}|W^* - W^{*e}|^2. \quad (\text{III.49})$$

Preuve - III.13 -

Un développement limité de σ^* en W^{*e} fournit la relation

$$\bar{\sigma}^*(W^*, \epsilon^*) = \frac{1}{2}(W^* - W^{*e})^T \partial_{W^*}^2 \sigma^*(W^{*e}, \epsilon^*) (W^* - W^{*e}) + \mathcal{O}(\|W^* - W^{*e}\|^3).$$

La propriété (E₁) permet de conclure en utilisant la stricte convexité de l'entropie σ^* et la compacité de K_{ϵ^*} . On obtient en effet l'existence de deux constantes strictement positives c_1 et c_2 telles que

$$c_1\|X\| \leq X^T \partial_{W^*}^2 \sigma^*(W^{*e}, \epsilon^*) X \leq c_2\|X\|,$$

pour tout $X \in \mathbb{R}^{n^*}$, $W^* \in \mathcal{O}_{W^*}$ et $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. ■

Lemme III.14

Soient $d \geq 1$, $l \geq [d/2] + 1$ des entiers et $\mathfrak{B}$ un voisinage borné de W^{*e} . Il existe alors une constante $\beta_0(\mathfrak{B})$, indépendante de ϵ^* telle que

$$\forall \epsilon^* \in K_{\epsilon^*}, \quad N_l(\tau) \leq \beta_0(\mathfrak{B}) \implies W^* \in \mathfrak{B}, \quad (t, x) \in [0, \tau] \times \mathbb{R}^d.$$

Preuve - III.14 -

Soit $\mathfrak{B}$ un voisinage borné de W^{*e} . Comme $l \geq [d/2] + 1$, l'injection de l'espace $W_2^l(\mathbb{R}^d)$ dans $L^\infty(\mathbb{R}^d)$ entraîne l'existence d'une constante $C(\mathfrak{B})$ telle que

$$\|W^* - W^{*e}\|_l \leq C(\mathfrak{B}) \implies W^* \in \mathfrak{B}.$$

On en déduit immédiatement que si $N_l(\tau) \leq C(\mathfrak{B})$, $\mathbf{W}^* \in \mathfrak{B}$, pour $(t, \mathbf{x}) \in [0, \tau] \times \mathbb{R}^d$. ■

Proposition III.15

Soient $d \geq 1$, $l \geq [d/2] + 2$ des entiers. On suppose que la condition initiale $\mathbf{W}^{*0}$ est telle que $\mathbf{W}^{*0} - \mathbf{W}^{*e} \in W_2^l(\mathbb{R}^d)$, et que $\mathbf{W}^*$ est une solution sur $[0, \tau]$ telle que

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_I^* - \mathbf{W}_I^{*e} &\in \mathcal{C}^0([0, \tau], W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \tau], W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \\ \mathbf{W}_{II}^* - \mathbf{W}_{II}^{*e} &\in \mathcal{C}^0([0, \tau], W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \tau], W_2^{l-2}(\mathbb{R}^d)) \cap L^2((0, \tau), W_2^{l+1}(\mathbb{R}^d)), \end{aligned}$$

et telle que $N_l(\tau) \leq \beta_0(\mathfrak{B})$. Il existe alors des constantes $b' \leq \beta_0(\mathfrak{B})$ et $C' > 1$ indépendantes de $\epsilon^* \in \mathbf{K}_{\epsilon^*}$ telles que

$$N_l(\tau) \leq b' \Rightarrow N_l(\tau) \leq C' \|\mathbf{W}^{*0} - \mathbf{W}^{*e}\|_l.$$

Preuve - III.15 -

On montre que si b est assez petit, on a

$$N_l(\tau) \leq b \implies N_l(\tau)^2 \leq C \left(\|\mathbf{W}^{*0} - \mathbf{W}^{*e}\|_l^2 + N_l(\tau)^3 \right),$$

et on prend alors

$$b' = \inf \left(b, \frac{1}{2C} \right), \quad C' = \sqrt{\frac{C}{1-Cb'}}.$$

La preuve de cette proposition repose sur trois estimations. Elle généralise celle proposée par Kawashima [Kaw84] qui ne tient pas compte du terme source chimique et qui ne dépend pas d'un paramètre. De plus, la forme des matrices de compensation que l'on considère ici est plus générale.

La première estimation correspond à une majoration des normes $\|\cdot\|_0$ [GM98] : pour tout $t \in [0, \tau]$

$$\|\mathbf{W}^*(t) - \mathbf{W}^{*e}\|_0^2 + \int_0^t \left(\|\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{W}_{II}^*(s)\|_0^2 + \|\overline{\Omega}^*(s)\|_0^2 \right) ds \leq C_1 \left(\|\mathbf{W}^{*0} - \mathbf{W}^{*e}\|_0^2 + N_l(\tau)^3 \right), \quad (\text{III.50})$$

où C_1 est une constante indépendante de $\epsilon^* \in \mathbf{K}_{\epsilon^*}$. On estime ensuite le gradient de la variable hyperbolique : pour tout $t \in [0, \tau]$

$$\begin{aligned} \int_0^t \|\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{W}_I^*(s)\|_0^2 ds - C_2 \int_0^t \left(\|\mathcal{P} \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{W}^*(s)\|_0^2 + \|\partial_{\mathbf{x}} \mathbf{W}_{II}^*(s)\|_1^2 + \|\overline{\Omega}^*(s)\|_0^2 \right) ds \\ - C_2 \|\mathbf{W}^*(s) - \mathbf{W}^{*e}\|_1^2 \leq C_2 \left(\|\mathbf{W}^{*0} - \mathbf{W}^{*e}\|_1^2 + N_l(\tau)^3 \right), \quad (\text{III.51}) \end{aligned}$$

où C_2 est une constante indépendante de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ et $\mathcal{P}$ est l'opérateur de projection orthogonale sur l'image de la matrice $\bar{\Gamma}^*(W^{*e})$. Enfin la troisième estimation permet de majorer les normes supérieures des gradients : pour tout $t \in [0, \tau]$

$$\begin{aligned} \|\partial_x W^*(t)\|_{l-1}^2 + \int_0^t \left(\|\mathcal{P} \partial_x W^*(s)\|_{l-1}^2 + \|\partial_x^2 W_{\Pi}^*(s)\|_{l-1}^2 + \|\partial_x^2 W_I^*(s)\|_{l-2}^2 \right) ds \\ \leq C_3 \left(\|\partial_x W^{*0}\|_{l-1}^2 + N_l(\tau)^3 \right), \end{aligned} \quad (\text{III.52})$$

où C_3 est une constante indépendante de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$.

Pour prouver la première estimation (III.50), on utilise l'entropie modifiée $\bar{\sigma}^*$ et son équation de conservation. D'après les inégalités (III.49) du lemme III.13, on obtient

$$\int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \partial_t \bar{\sigma}^*(W^*(s, \mathbf{x}, \epsilon^*), \epsilon^*) d\mathbf{x} ds \geq \underline{c} \|W^*(t) - W^{*e}\|_0^2 - \bar{c} \|W^{*0} - W^{*e}\|_0^2. \quad (\text{III.53})$$

L'équation de conservation de l'entropie modifiée

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{\sigma}^* + \sum_{i \in C^*} \partial_i [\mathbf{q}_i^*(U^*) - \mathbf{q}_i^*(U^{*e}) - \mathbf{V}^{*eT} (F_i^*(U^*) - F_i^*(U^{*e}))] \\ = \sum_{i,j \in C^*} (\mathbf{V}^* - \mathbf{V}^{*e})^T \partial_i (\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^* \partial_j \mathbf{V}^*) + (\mathbf{V}^* - \mathbf{V}^{*e})^T \tilde{\Omega}^*, \end{aligned}$$

permet alors de montrer que

$$\begin{aligned} \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \partial_t \bar{\sigma}^*(W^*(s, \mathbf{x}, \epsilon^*), \epsilon^*) d\mathbf{x} ds = - \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i,j \in C^*} (\partial_i \mathbf{V}^*)^T \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^* \partial_j \mathbf{V}^* d\mathbf{x} ds \\ + \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} (\mathbf{V}^* - \mathbf{V}^{*e})^T \tilde{\Omega}^* d\mathbf{x} ds. \end{aligned} \quad (\text{III.54})$$

En utilisant alors l'inégalité

$$\int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i,j \in C^*} (\partial_i \mathbf{V}^*)^T \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^* \partial_j \mathbf{V}^* d\mathbf{x} ds \geq \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i,j \in C^*} (\partial_i W_{\Pi}^*)^T \bar{\mathbf{B}}_{ij}^*(W^{*e}) \partial_j W_{\Pi}^* d\mathbf{x} ds - C_1^1 N_l(\tau)^3,$$

où C_1^1 est une constante qui ne dépend pas de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, la propriété (Nor₂) et en effectuant une transformée de Fourier en espace, on obtient que

$$\int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i,j \in C^*} (\partial_i \mathbf{V}^*)^T \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^* \partial_j \mathbf{V}^* d\mathbf{x} ds \geq C_1^2 \int_0^t \|\partial_x W_{\Pi}^*(s)\|_0^2 ds - C_1^1 N_l(\tau)^3, \quad (\text{III.55})$$

où la constante C_1^2 ne dépend pas de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. En combinant les inégalités (III.53), (III.55) et l'égalité (III.55), et en utilisant la propriété (Dis₄) concernant le terme source $\tilde{\Omega}^*$, on a immédiatement la première estimation (III.50).

On montre ensuite la deuxième estimation concernant le gradient de la variable hyperbolique $\partial_x W_I^*$. En utilisant l'équation (III.36), on écrit

$$\begin{aligned} \bar{A}_0^*(W^{*e})\partial_t W^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^*(W^{*e})\partial_i W^* - \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^*(W^{*e})\partial_i \partial_j W^* \\ - \bar{A}_0^*(W^{*e})(\bar{A}_0^*(W^*))^{-1}\bar{\Omega}^* = \mathfrak{h}^*, \end{aligned} \quad (\text{III.56})$$

où le second membre $\mathfrak{h}^*$ est défini par

$$\begin{aligned} \mathfrak{h}^* = \sum_{i \in C^*} \bar{A}_0^*(W^{*e}) \left[(\bar{A}_0^*(W^{*e}))^{-1} \bar{A}_i^*(W^{*e}) - (\bar{A}_0^*(W^*))^{-1} \bar{A}_i^*(W^*) \right] \partial_i W^* \\ - \sum_{i,j \in C^*} \bar{A}_0^*(W^{*e}) \left[(\bar{A}_0^*(W^{*e}))^{-1} \bar{B}_{ij}^*(W^{*e}) - (\bar{A}_0^*(W^*))^{-1} \bar{B}_{ij}^*(W^*) \right] \partial_i \partial_j W^* \\ + \bar{A}_0^*(W^{*e})(\bar{A}_0^*(W^*))^{-1} \left[\sum_{i,j \in C^*} \partial_W^* \bar{B}_{ij}^*(W^*) \partial_i W^* \partial_j W^* + \bar{T}^* \right]. \end{aligned}$$

On effectue ensuite la transformée de Fourier en espace de l'équation (III.56), puis on multiplie par $i|\xi|K(\xi/|\xi|)$, on prend le produit scalaire avec le conjugué de la transformée de Fourier du vecteur W^* , on intègre sur l'espace $\mathbb{R}^d$ et sur le temps $(0, t)$ et enfin on prend la partie réelle du résultat. On remarque que Kawashima n'a pas besoin d'utiliser la transformée de Fourier car il suppose que la matrice de compensation K possède une forme particulière. En utilisant alors la propriété (Spe₁) concernant la matrice de compensation K , l'hypothèse (Dis₁) sur la positivité de la matrice $\bar{L}^*(W^{*e})$ et les hypothèses (Nor₁-Nor₂) sur la matrice $\bar{B}_{ij}^*$, on obtient la deuxième estimation (III.51).

On s'intéresse ensuite à la troisième estimation concernant les normes supérieures des gradients. Il est suffisant de la démontrer pour des fonctions régulières car on peut approcher une fonction par une suite de fonctions régulières et passer à la limite dans l'inégalité. L'utilisation de fonctions régulières permet de dériver l'équation sans avoir à multiplier par des fonctions tests. Le vecteur des variables hyperboliques et celui des variables paraboliques sont traités différemment. On écrit le système sous la forme

$$\begin{aligned} \partial_t W_I^* + (\bar{A}_0^{*I,I})^{-1} \left[\sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,I} \partial_i W_I^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,II} (W^{*e}) \partial_i W_{II}^* + \bar{L}^{*I,I} (W^{*e}) (W_I^* - W_I^{*e}) \right. \\ \left. + \bar{L}^{*I,II} (W^{*e}) (W_{II}^* - W_{II}^{*e}) \right] = (\bar{A}_0^{*I,I})^{-1} \tilde{f}_I^*, \end{aligned} \quad (\text{III.57})$$

$$\begin{aligned} \partial_t W_{\Pi}^* + (\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi})^{-1} \left[\sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*\Pi,I} (W^{*e}) \partial_i W_I^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*\Pi,\Pi} (W^{*e}) \partial_i W_{\Pi}^* - \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^{*\Pi,\Pi} \partial_i \partial_j W_{\Pi}^* \right. \\ \left. + \bar{L}^{*\Pi,I} (W^{*e}) (W_I^* - W_I^{*e}) + \bar{L}^{*\Pi,\Pi} (W^{*e}) (W_{\Pi}^* - W_{\Pi}^{*e}) \right] = (\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi})^{-1} \tilde{f}_{\Pi}^*, \quad (\text{III.58}) \end{aligned}$$

où les vecteurs $\tilde{f}_I^*$ et $\tilde{f}_{\Pi}^*$ vérifient

$$\tilde{f}_I^* = \mathcal{O}(|W^* - W^{*e}| + |\partial_x W_{\Pi}^*|^2), \quad \tilde{f}_{\Pi}^* = \mathcal{O}(|W^* - W^{*e}| + |\partial_x W^*|^2).$$

On dérive ensuite k fois par rapport à la variable d'espace $\mathbf{x}$ les équations (III.57) et (III.58) pour $1 \leq k \leq l$ et on multiplie la première équation par $\bar{A}_0^{*I,I}$ et la seconde par $\bar{A}_i^{*\Pi,\Pi} (W^{*e})$. On notera $D_{\mathbf{x}}^k$ la k^e dérivation générique, c'est à dire k dérivations successives selon une variable d'espace $D_{\mathbf{x}}^k = \partial_{x_1} \dots \partial_{x_k}$ où $x_1, \dots, x_k$ sont des directions d'espace quelconques. En utilisant la notation

$$[D_{\mathbf{x}}^k, u]v = D_{\mathbf{x}}^k(uv) - uD_{\mathbf{x}}^k v,$$

on obtient les relations

$$\begin{aligned} \bar{A}_0^{*I,I} D_{\mathbf{x}}^k \partial_t W_I^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,I} D_{\mathbf{x}}^k \partial_i W_I^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*I,\Pi} D_{\mathbf{x}}^k \partial_i W_{\Pi}^* + \bar{L}^{*I,I} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k W_I^* \\ + \bar{L}^{*I,\Pi} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k W_{\Pi}^* = \mathfrak{F}_1^{*k}, \quad (\text{III.59}) \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} \mathfrak{F}_1^{*k} = \bar{A}_0^{*I,I} D_{\mathbf{x}}^k \left((\bar{A}_0^{*I,I})^{-1} \tilde{f}_I^* \right) - \bar{A}_0^{*I,I} \sum_{i \in C^*} [D_{\mathbf{x}}^k, (\bar{A}_0^{*I,I})^{-1} \bar{A}_i^{*I,I}] \partial_i W_I^* \\ - \bar{A}_0^{*I,I} \sum_{i \in C^*} [D_{\mathbf{x}}^k, (\bar{A}_0^{*I,I})^{-1}] \bar{A}_i^{*I,\Pi} (W^{*e}) \partial_i W_{\Pi}^* \\ - \bar{A}_0^{*I,I} [D_{\mathbf{x}}^k, (\bar{A}_0^{*I,I})^{-1}] \left(\bar{L}^{*I,I} (W^{*e}) (W_I^* - W_I^{*e}) + \bar{L}^{*I,\Pi} (W^{*e}) (W_{\Pi}^* - W_{\Pi}^{*e}) \right), \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \bar{A}_0^{*\Pi,\Pi} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k \partial_t W_{\Pi}^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*\Pi,I} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k \partial_i W_I^* + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^{*\Pi,\Pi} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k \partial_i W_{\Pi}^* \\ - \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^{*\Pi,\Pi} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k \partial_i \partial_j W_{\Pi}^* + \bar{L}^{*I,I} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k W_I^* + \bar{L}^{*I,\Pi} (W^{*e}) D_{\mathbf{x}}^k W_{\Pi}^* = D_{\mathbf{x}}^k \mathfrak{f}_2^*, \quad (\text{III.60}) \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned}
\mathfrak{h}_2^* &= \bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e})(\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi})^{-1}\tilde{f}_I^* \\
&\quad - \bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}) \left[(\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi})^{-1} - (\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}))^{-1} \right] \sum_{i \in C^*} \left[\bar{A}_i^{*\Pi,I}(W^{*e})\partial_i W_I^* + \bar{A}_i^{*\Pi,\Pi}(W^{*e})\partial_i W_{II}^* \right] \\
&\quad + \bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}) \sum_{i,j \in C^*} \left[(\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi})^{-1} \bar{B}_{ij}^{*\Pi,\Pi} - (\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}))^{-1} \bar{B}_{ij}^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}) \right] \partial_i \partial_j W_{II}^* \\
&\quad - \bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}) \left[(\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi})^{-1} - (\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}))^{-1} \right] \bar{\Gamma}^{*\Pi,I}(W^{*e})(W_I^* - W_I^{*e}) \\
&\quad - \bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}) \left[(\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi})^{-1} - (\bar{A}_0^{*\Pi,\Pi}(W^{*e}))^{-1} \right] \bar{\Gamma}^{*\Pi,\Pi}(W^{*e})(W_{II}^* - W_{II}^{*e}).
\end{aligned}$$

Puis on prend le produit scalaire de l'équation (III.59) avec le vecteur $D_{\mathbf{x}}^k W_I^*$, le produit scalaire de l'équation (III.60) avec le vecteur $D_{\mathbf{x}}^k W_{II}^*$, on somme les deux résultats, on intègre sur l'espace $\mathbb{R}^d$ et sur le temps $(0, t)$ et on somme sur l'indice k variant de 1 à l . En utilisant les propriétés $(\bar{S}_1)$ et (Nor_1) concernant la matrice $\bar{A}_0^*$, la propriété $(\bar{S}_2)$ sur la symétrie des matrices $\bar{A}_i^*$, $i \in C^*$, la propriété (Nor_2) sur la positivité de la matrice $\bar{B}^{*\Pi,\Pi}$ et la propriété (Dis_1) sur la positivité de la matrice $\bar{\Gamma}^*$, on obtient l'inégalité

$$\|\partial_{\mathbf{x}} W^*(t)\|_{l-1}^2 + \int_0^t \left(\|\partial_{\mathbf{x}}^2 W_{II}^*\|_{l-1}^2 + \|\mathcal{P} \partial_{\mathbf{x}} W^*\|_{l-1}^2 \right) ds \leq C_3^1 \left[\|\partial_{\mathbf{x}} W^*(0)\|_{l-1}^2 + \int_0^t \mathfrak{G}^* ds \right], \quad (\text{III.61})$$

où $\mathfrak{G}^*$ est la fonction du temps définie par

$$\begin{aligned}
\mathfrak{G}^* &= \sum_{k=1}^l \int_{\mathbb{R}^d} \left[|\partial_t \bar{A}_0^{*1,I}| + \sum_{i \in C^*} |\partial_i \bar{A}_i^{*1,I}| \right] |D_{\mathbf{x}}^k W_I^*|^2 + |\mathfrak{F}_1^{*k}| |D_{\mathbf{x}}^k W_I^*| d\mathbf{x} \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}^d} |D_{\mathbf{x}} \mathfrak{h}_2^*| |D_{\mathbf{x}} W_{II}^*| + \sum_{k=2}^l |D_{\mathbf{x}}^{k-1} \mathfrak{h}_2^*| |D_{\mathbf{x}}^{k+1} W_{II}^*| d\mathbf{x}.
\end{aligned}$$

On utilise alors les estimations classiques suivantes

$$\begin{aligned}
\|uv\|_k &\leq C \|u\|_s \|v\|_l, \quad k \leq \min\{s, l, s+l - [d/2] + 1\}, \\
\|D_{\mathbf{x}} F(v)\|_{j-1} &\leq C \|F\|_{\mathcal{C}^j(|\cdot| \leq \|v\|_{L^\infty})} (1 + \|v\|_{L^\infty})^{j-1} \|D_{\mathbf{x}} v\|_{j-1}, \\
\sum_{k=0}^l \|[D_{\mathbf{x}}^k, u]v\|_0 &\leq C \|D_{\mathbf{x}} u\|_{s-1} \|v\|_{l-1}, \quad 1 \leq l \leq s, \quad s \geq [d/2] + 2,
\end{aligned}$$

pour obtenir la majoration

$$\int_0^t \mathfrak{G}^* ds \leq C_3^2 N_l(\tau)^3, \quad (\text{III.62})$$

où C_3^2 est une constante qui ne dépend pas de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. En combinant les inégalités (III.61) et (III.62), on obtient directement la troisième estimation (III.52). ■

Preuve - III.12 -

D'après le lemme III.14, il existe une constante $\beta_0(\mathfrak{B})$ indépendante de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ telle que

$$\forall \epsilon^* \in K_{\epsilon^*}, \quad N_l(\tau) \leq \beta_0(\mathfrak{B}) \implies W^* \in \mathfrak{B}, \quad (t, x) \in [0, \tau] \times \mathbb{R}^d.$$

On applique alors le théorème d'existence locale III.10 avec $b_0 = \beta_0(\mathfrak{B})$, $\mathcal{O}_0 = \mathfrak{B}$ et d_1 tel que $0 < d_1 < d(\overline{\mathcal{O}_0}, \partial \mathcal{O}_{W^*})$. Il existe alors une unique solution locale définie sur l'intervalle $[0, \bar{\tau}]$ pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, dès que $\|W^{*0} - W^{*e}\|_l < b_0$. De plus, d'après le théorème III.10, on a les estimations

$$N_l(\tau) \leq C \|W^{*0} - W^{*e}\|_l, \quad \forall \tau \in [0, \bar{\tau}],$$

où $C > 1$ ne dépend que de $\mathcal{O}_1$, $b_0 = \beta_0(\mathfrak{B})$ et de K_{ϵ^*} . D'après la proposition III.15, il existe des constantes $b' \leq \beta_0(\mathfrak{B})$ et $C' > 1$ indépendantes de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ telles que, pour tout $\tau \in [0, \bar{\tau}]$,

$$N_l(\tau) \leq b' \implies N_l(\tau) \leq C' \|W^{*0} - W^{*e}\|_l. \quad (\text{III.63})$$

On définit alors

$$\bar{b} = \inf \left(\frac{b'}{C}, \frac{b'}{C' \sqrt{1 + C^2}} \right),$$

et on suppose que $\|W^{*0} - W^{*e}\| \leq \bar{b}$. Pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, on a une première solution définie sur $[0, \bar{\tau}]$ telle que

$$N_l(\bar{\tau}) \leq C \|W^{*0} - W^{*e}\|_l \leq C \bar{b} \leq b' \leq b_0 = \beta_0(\mathfrak{B}).$$

De plus, comme $N_l(\bar{\tau}) \leq b'$, on a également $N_l(\bar{\tau}) \leq C' \|W^{*0} - W^{*e}\|_l \leq C' \bar{b}$.

On peut à présent appliquer une deuxième fois le théorème d'existence locale à partir de $W^*(\bar{\tau})$ puisque $\|W^*(\bar{\tau}) - W^{*e}\|_l \leq N_l(\bar{\tau}) \leq b_0$ et on obtient une solution définie sur l'intervalle $[\bar{\tau}, 2\bar{\tau}]$ qui vérifie l'estimation $N_l(\bar{\tau}, 2\bar{\tau}) \leq C \|W^*(\bar{\tau}) - W^{*e}\|_l$. Par conséquent, la relation suivante est satisfaite

$$N_l(2\bar{\tau})^2 \leq N_l(\bar{\tau})^2 + N_l(\bar{\tau}, 2\bar{\tau})^2 \leq (1 + C^2) N_l(\bar{\tau})^2 \leq (1 + C^2) C'^2 \bar{b}^2 \leq b'^2 \leq b_0^2.$$

De plus, la relation (III.63) permet d'avoir l'estimation supplémentaire $N_l(2\bar{\tau}) \leq C' \bar{b}$. On peut alors recommencer à partir de $W^*(2\bar{\tau})$ et une récurrence immédiate

montre que la solution est définie pour tout temps et que pour tout $t \geq 0$, on a $N_l(t) \leq C' \|W^{*0} - W^{*e}\|$ uniformément en $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$.

On explicite à présent la dépendance en le paramètre $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ en notant $W^*(t, x, \epsilon^*)$ la solution obtenue pour $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ et on introduit

$$\Phi(t, \epsilon^*) = \|\partial_x W^*(t, \cdot, \epsilon^*)\|_{l-2}^2.$$

En utilisant l'équation (III.38) vérifiée par la solution W^* , on obtient après quelques calculs que pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$,

$$\int_0^\infty |\Phi(t, \epsilon^*)| dt + \int_0^\infty |\partial_t \Phi(t, \epsilon^*)| dt \leq C \|W^{*0} - W^{*e}\|_l^2, \quad (\text{III.64})$$

où C est indépendant de $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. On en déduit que $\|\partial_x W^*(t, \cdot, \epsilon^*)\|_{l-2}^2$ tend vers 0 lorsque t tend vers l'infini, uniformément en $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. En utilisant l'inégalité d'interpolation

$$\|f\|_{L^\infty} \leq C \|\partial_x^{l-1} f\|_0^\alpha \|f\|_0^{1-\alpha},$$

pour $\alpha = d/(2l-1) > 0$, on obtient que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |W^*(t, x) - W^{*e}(x)| = 0,$$

uniformément en ϵ^* .

On étudie enfin la dépendance de la solution en $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$. On se donne ϵ^* et α^* dans K_{ϵ^*} et un réel $a > 0$. Grâce à l'estimation (III.64), il existe un temps $\tau_a > 0$ tel que pour tout $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$ et pour tout $t \geq \tau_a$, $\|\partial_x W^*(t, \cdot, \epsilon^*)\|_{l-2} \leq a/2$, ce qui implique

$$\forall t \geq \tau_a, \forall \epsilon^*, \alpha^* \in K_{\epsilon^*}, \quad \|\partial_x W^*(t, \cdot, \epsilon^*) - \partial_x W^*(t, \cdot, \alpha^*)\|_{l-2} \leq a.$$

On divise alors le temps en intervalle de longueur $\bar{\tau}$. Il existe un entier noté I_a tel que $(I_a - 1)\bar{\tau} \leq \tau_a \leq I_a \bar{\tau}$. En appliquant les estimations (III.40) sur chacun des intervalles $[i\bar{\tau}, (i+1)\bar{\tau}]$ pour $i = 0, \dots, I_a - 1$, on obtient par récurrence que

$$\sup_{0 \leq \tau \leq I_a \bar{\tau}} \|W^*(\tau, \cdot, \epsilon^*) - W^*(\tau, \cdot, \alpha^*)\|_{l-1}^2 \leq (1 + C)^{I_a} \delta_{l-1}^2(\epsilon^*, \alpha^*).$$

On en déduit que $W^*(t, \cdot, \epsilon^*)$ converge uniformément sur $t \in [0, I_a \bar{\tau}]$ vers $W^*(t, \cdot, \alpha^*)$ pour la norme de $W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)$ lorsque ϵ^* tend vers α^* dans K_{ϵ^*} . On a ainsi établi que

$$\lim_{\substack{\epsilon^* \rightarrow \alpha^* \\ \epsilon^* \in K_{\epsilon^*}}} \sup_{t \geq 0} \|\partial_x W^*(t, \cdot, \epsilon^*) - \partial_x W^*(t, \cdot, \alpha^*)\|_{l-2} = 0,$$

et en utilisant l'inégalité d'interpolation

$$\|f\|_{\mathcal{C}^{l-([d/2]+2)}} \leq C_0 \|\partial_x^{l-1} f\|_0^a \|f\|_0^{1-a},$$

pour $a = d/(2l - 1) > 0$, on conclut que

$$\lim_{\substack{\epsilon^* \rightarrow \alpha^* \\ \epsilon^* \in K_{\epsilon^*}}} \sup_{t \geq 0} \|W^*(t, \cdot, \epsilon^*) - W^*(t, \cdot, \alpha^*)\|_{\mathcal{C}^{l-([d/2]+2)}} = 0,$$

ce qui termine la preuve du théorème d'existence globale. ■

III.5.3 Estimations de décroissance

La compacité de K_{ϵ^*} permet d'obtenir des estimations de décroissance uniforme en ϵ^* . Ces estimations peuvent être utilisées pour prouver la continuité par rapport au paramètre ϵ^* dans l'espace $W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)$ au lieu de $\mathcal{C}^{l-([d/2]+2)}$.

Théorème III.16

Soient $d \geq 2$, $l \geq [d/2] + 3$ des entiers et W^{*0} une condition initiale telle que

$$W^{*0} - W^{*e} \in W_2^l(\mathbb{R}^d) \cap L^p(\mathbb{R}^d),$$

avec $p \in [1, 2)$. Alors, si $\|W^{*0} - W^{*e}\|_l$ et $\|W^{*0} - W^{*e}\|_{L^p}$ sont assez petites, l'unique solution globale du problème de Cauchy satisfait l'estimation de décroissance

$$\|W^*(t) - W^{*e}\|_{l-2} \leq C(1+t)^{-\gamma} (\|W^{*0} - W^{*e}\|_{l-2} + \|W^{*0} - W^{*e}\|_{L^p}), \quad 0 \leq t,$$

uniformément en $\epsilon^* \in K_{\epsilon^*}$, où C est une constante strictement positive et $\gamma = d(1/2p - 1/4)$. Finalement, pour tout $\alpha^* \in K_{\epsilon^*}$, on a

$$\lim_{\substack{\epsilon^* \rightarrow \alpha^* \\ \epsilon^* \in K_{\epsilon^*}}} \sup_{t \geq 0} \|W^*(t, \cdot, \epsilon^*) - W^*(t, \cdot, \alpha^*)\|_{l-1} = 0.$$

Preuve - III.16 -

La preuve des estimations de décroissance est similaire au cas sans paramètre [GM98, Kaw84] grâce à la compacité de K_{ϵ^*} . On introduit la nouvelle variable

$$z(U^*) = (\partial_{U^*} W^*(U^{*e}))(U^* - U^{*e}),$$

et en utilisant l'équation (III.36), on obtient l'équation vérifiée par cette nouvelle variable

$$\bar{A}_0^*(W^{*e})\partial_t z + \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^*(W^{*e})\partial_i z - \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^*(W^{*e})\partial_i \partial_j z + \bar{L}^*(W^{*e})z = \mathfrak{g}_1^* + \mathfrak{g}_2^*, \quad (\text{III.65})$$

où le premier terme $\mathfrak{g}_1^*$ s'écrit sous forme conservative

$$\mathfrak{g}_1^* = \sum_{i \in C^*} \partial_i (\mathfrak{k}_i + \mathfrak{k}'_i),$$

avec

$$\begin{aligned} \mathfrak{k}_i &= (\partial_{W^*} V^*(W^{*e}))^T (F_i^*(W^{*e}) - F_i^*(W^*)) + \bar{A}_i^*(W^{*e}) z, \\ \mathfrak{k}'_i &= \sum_{j \in C^*} \left((\partial_{W^*} V^*(W^{*e}))^T B_{ij}^*(U^*) \partial_{W^*} U^*(W^{*e}) - \bar{B}_{ij}^*(W^{*e}) \right) \partial_j z. \end{aligned}$$

Le second terme $\mathfrak{g}_2^*$ a pour expression

$$\mathfrak{g}_2^* = (\partial_{W^*} V^*(W^{*e}))^T \tilde{\Omega}^* + \bar{L}^*(W^{*e})z,$$

et on déduit de l'hypothèse (Dis₃) qu'il est inclus dans l'image $R(\bar{L}^*(W^{*e}))$, ce qui implique que $(\mathbb{I} - \mathcal{P})\mathfrak{g}_2^* = 0$, où $\mathcal{P}$ est le projecteur orthogonal sur l'image de la matrice $\bar{L}^*(W^{*e})$. On introduit alors le symbole associé à la partie linéaire de l'équation (III.65)

$$\bar{\mathfrak{S}}(\xi) = \bar{A}_0^*(W^{*e})^{-1/2} \left[i \sum_{i \in C^*} \bar{A}_i^*(W^{*e}) \xi_i + \sum_{i,j \in C^*} \bar{B}_{ij}^*(W^{*e}) \xi_i \xi_j + \bar{L}^*(W^{*e}) \right] \bar{A}_0^*(W^{*e})^{-1/2},$$

et pour $\phi \in L^2(\mathbb{R}^d)$ on définit

$$\exp(-t\bar{\mathfrak{S}})\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \exp(i x \cdot \xi) \exp(-t\bar{\mathfrak{S}}(\xi)) \hat{\phi}(\xi) d\xi,$$

où $\hat{\phi}$ est la transformée de Fourier de ϕ . On peut alors exprimer la solution de l'équation (III.65) par la relation [Kaw84]

$$z(t) = \exp(-t\bar{\mathfrak{S}})z(0) + \int_0^t \exp(-(t-s)\bar{\mathfrak{S}}) (\mathfrak{g}_1^*(s) + \mathfrak{g}_2^*(s)) ds, \quad (\text{III.66})$$

et on estime $\|\mathbf{z}(t)\|_{l-2}$ en deux étapes. Dans un premier temps, comme le terme non linéaire $\mathbf{g}_2^*$ vérifie $(\mathbb{I} - \mathcal{P})\mathbf{g}_2^* = 0$, on déduit de la proposition 3.12 de [Kaw84] l'estimation

$$\left\| \exp(-t\overline{\mathfrak{S}})\mathbf{z}(0) + \int_0^t \exp(-(t-s)\overline{\mathfrak{S}})\mathbf{g}_2^*(s) \, ds \right\|_{l-2} \leq \beta(1+t)^{-\gamma} (\|\mathbf{z}(0)\|_{l-2} + \|\mathbf{z}(0)\|_{L^p}), \quad (\text{III.67})$$

où $\gamma = d(1/2p - 1/4)$ et β est une constante strictement positive qui ne dépend pas de $\epsilon^* \in \mathbf{K}_{\epsilon^*}$. Par ailleurs, en utilisant l'estimation 3.A.14 de [Kaw84] ou le théorème 1.2 de [SK85], on obtient également l'inégalité

$$\begin{aligned} \left\| \int_0^t \exp(-(t-s)\overline{\mathfrak{S}})\mathbf{g}_1^*(s) \, ds \right\|_{l-2} &\leq \beta \int_0^t \exp(-\delta(t-s)) \|\mathbf{g}_1^*(s)\|_{l-2} \, ds \\ &+ \beta \int_0^t (1+t-s)^{-d/4-1/2} \left[\sum_{i \in \mathbf{C}^*} \|(\mathfrak{k}_i + \mathfrak{k}'_i)(s)\|_{L^1} \right] \, ds, \end{aligned} \quad (\text{III.68})$$

où δ et β sont des constantes strictement positives qui ne dépendent pas de $\epsilon^* \in \mathbf{K}_{\epsilon^*}$. Comme la donnée initiale $\mathbf{W}^{*0}$ est supposée être suffisamment proche de $\mathbf{W}^{*e}$ dans $W_2^l(\mathbb{R}^d) \cap L^p(\mathbb{R}^d)$, ces estimations montrent que $\|\mathbf{z}\|_l$ reste petit pour tout temps. En particulier, on peut écrire que $\mathfrak{k}_i = \mathcal{O}(|\mathbf{z}|^2)$ et $\mathfrak{k}'_i = \mathcal{O}(|\partial_x \mathbf{z}|) \mathcal{O}(|\mathbf{z}|)$, ce qui implique que, pour $l \geq [d/2] + 3$ et pour $\|\mathbf{z}\|_l$ suffisamment petit, on a les deux estimations

$$\sum_{i \in \mathbf{C}^*} (\|\mathfrak{k}_i\|_{L^1} + \|\mathfrak{k}'_i\|_{L^1}) \leq \beta \|\mathbf{z}\|_1^2, \quad (\text{III.69})$$

$$\sum_{i \in \mathbf{C}^*} (\|\partial_i \mathfrak{k}_i\|_{l-2} + \|\partial_i \mathfrak{k}'_i\|_{l-2}) \leq \beta \|\mathbf{z}\|_{l-2} \|\mathbf{z}\|_l. \quad (\text{III.70})$$

En combinant l'égalité (III.66) avec les estimations (III.67), (III.68), (III.69) et (III.70), on obtient finalement

$$\begin{aligned} \|\mathbf{z}(t)\|_{l-2} &\leq \beta(1+t)^{-\gamma} (\|\mathbf{z}(0)\|_{l-2} + \|\mathbf{z}(0)\|_{L^p}) + \beta \int_0^t (1+t-s)^{-d/4-1/2} \|\mathbf{z}(s)\|_1^2 \, ds \\ &+ \beta \int_0^t \exp(-\delta(t-s)) \|\mathbf{z}(s)\|_l \|\mathbf{z}(s)\|_{l-2} \, ds. \end{aligned} \quad (\text{III.71})$$

En définissant alors $\|\mathbf{z}(t)\|_{l-2,\gamma} = \sup_{0 \leq s \leq t} (1+s)^\gamma \|\mathbf{z}(s)\|_{l-2}$, l'inégalité (III.71) se récrit

$$\|\mathbf{z}(t)\|_{l-2,\gamma} \leq \beta (\|\mathbf{z}(0)\|_{l-2} + \|\mathbf{z}(0)\|_{L^p}) + \beta \mathfrak{I}_1(t) \|\mathbf{z}(0)\|_l \|\mathbf{z}(t)\|_{l-2,\gamma} + \beta \mathfrak{I}_2(t) \|\mathbf{z}(t)\|_{l-2,\gamma}^2,$$

où

$$\begin{aligned} \mathfrak{l}_1(t) &= \sup_{0 \leq s \leq t} (1+s)^\gamma \int_0^s \exp(-\delta(s-\tau))(1+\tau)^{-\gamma} d\tau, \\ \mathfrak{l}_2(t) &= \sup_{0 \leq s \leq t} (1+s)^\gamma \int_0^s (1+s-\tau)^{-d/4-1/2} (1+\tau)^{-2\gamma} d\tau. \end{aligned}$$

Comme $\mathfrak{l}_1(t)$ et $\mathfrak{l}_2(t)$ sont uniformément bornés et comme β est indépendant de $\epsilon^* \in \mathbf{K}_{\epsilon^*}$, on obtient l'estimation désirée pour $\|\mathbf{z}(0)\|_{l-2,\gamma}$ suffisamment petit. Cette estimation combinée à celle obtenue au théorème III.12 impliquent que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|\mathbf{W}^*(t, \cdot, \epsilon^*) - \mathbf{W}^{*e}\|_{l-1} = 0,$$

uniformément en $\epsilon^* \in \mathbf{K}_{\epsilon^*}$, et on procède comme pour la preuve du théorème III.12. ■

Remarque - *Il est possible d'obtenir les mêmes estimations de décroissance pour la dimension un, $d = 1$ si les estimations [Kaw84] de l'exponentielle de la matrice $(\bar{\mathbf{A}}_0^*)^{-1/2}(\zeta \bar{\mathbf{A}}^* - \zeta^2 \bar{\mathbf{B}}^* + \bar{\mathbf{L}}^*)(\bar{\mathbf{A}}_0^*)^{-1/2}$ en $(\mathbf{W}^{*e}, \epsilon^*)$ peuvent être obtenues autour de $\zeta = 0$ uniformément en $\epsilon^* \in \mathbf{K}_{\epsilon^*}$.*

III.6 Symétrisation pour les plasmas ambipolaires _____

On étudie dans cette section les formes symétriques du système d'équations aux dérivées partielles modélisant les plasmas ambipolaires (III.31).

III.6.1 Entropie et forme conservative symétrique

On définit l'entropie mathématique σ par

$$\sigma = - \sum_{k \in \mathbf{S}} \frac{\gamma_k S_k}{R}, \quad (\text{III.72})$$

où le facteur $1/R$ n'est introduit que pour simplifier la présentation des résultats. La variable entropique correspondante $\mathbf{V}$ s'écrit

$$\mathbf{V} = (\partial_{\mathbf{U}} \sigma)^T = \frac{1}{RT} \left(G_1 - \frac{1}{2} m_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \dots, G_{n^s} - \frac{1}{2} m_{n^s} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \mathbf{v}^T, -1 \right)^T. \quad (\text{III.73})$$

Théorème III.17

La fonction σ est une entropie mathématique pour le système (III.31). L'application $(U, \epsilon) \mapsto (V, \epsilon)$ est un C^∞ difféomorphisme de $\mathcal{O}_{(U, \epsilon)}$ dans $\mathcal{O}_{(V, \epsilon)} = \mathcal{O}_V \times \mathcal{O}_\epsilon$, où $\mathcal{O}_V = \mathbb{R}^{n^s+d} \times (-\infty, 0)$ est indépendant de ϵ et où $\mathcal{O}_\epsilon = (0, \bar{\epsilon})$ est indépendant de V . De plus, ce difféomorphisme admet une extension régulière en $\epsilon = 0$ et en $\epsilon = \bar{\epsilon}$. Le système écrit en la variable entropique V

$$\tilde{A}_0 \partial_t V + \sum_{i \in C} \tilde{A}_i \partial_i V = \sum_{i, j \in C} \partial_i (\tilde{B}_{ij} \partial_j V) + \tilde{\Omega}, \quad (\text{III.74})$$

avec

$$\tilde{A}_0 = \partial_V U, \quad \tilde{A}_i = A_i \partial_V U, \quad \tilde{B}_{ij} = B_{ij} \partial_V U \quad \text{et} \quad \tilde{\Omega} = \Omega,$$

est sous forme symétrique, c'est-à-dire que les matrices $\tilde{A}_0, \tilde{A}_i, i \in C$, et $\tilde{B}_{ij}, i, j \in C$, vérifient les propriétés (S₁-S₄). La matrice $\tilde{A}_0$ est donnée par

$$\tilde{A}_0 = \begin{bmatrix} [\gamma_k \delta_{kl}]_{k, l \in S} & & \text{Sym} \\ [\gamma_l m_l v_\mu]_{\substack{\mu \in C \\ l \in S}} & \rho RT \mathbb{I}_{d,d} + \Sigma_{m^2} \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} & \\ [\gamma_l E_l^{\text{tot}}]_{l \in S} & (\rho RT + \Sigma_{me}) \mathbf{v}^T & \Upsilon_e \end{bmatrix},$$

où

$$\begin{aligned} \Sigma_{m^2} &= \sum_{k \in S} \gamma_k m_k^2, & \Sigma_{me} &= \sum_{k \in S} \gamma_k m_k E_k^{\text{tot}}, \\ \Upsilon_e &= \sum_{k \in S} \gamma_k (E_k^{\text{tot}})^2 + \rho RT (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + c_v T). \end{aligned}$$

Comme la matrice $\tilde{A}_0$ est symétrique, on n'a indiqué que la partie triangulaire inférieure gauche et écrit "Sym" dans la partie supérieure droite. Etant donné $\boldsymbol{\xi} = (\xi_i)_{i \in C}^T$ un vecteur quelconque de $\mathbb{R}^d$, les matrices $\tilde{A}_i, i \in C$, sont données par

$$\sum_{i \in C} \xi_i \tilde{A}_i = \begin{bmatrix} [\gamma_k \delta_{kl} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}]_{k, l \in S} & & \text{Sym} \\ [\gamma_l m_l v_\mu \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} + \gamma_l RT \xi_\mu]_{\substack{\mu \in C \\ l \in S}} & \rho RT (\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbb{I}_{d,d} + \mathbf{v} \otimes \boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\xi} \otimes \mathbf{v}) \\ & + \Sigma_{m^2} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} \\ [\gamma_l H_l^{\text{tot}} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}]_{l \in S} & (\rho RT + \Sigma_{mh}) \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{v}^T & \Upsilon_h \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \\ & + RT H^{\text{tot}} \boldsymbol{\xi}^T \end{bmatrix},$$

avec

$$\Sigma_{mh} = \sum_{k \in S} \gamma_k m_k H_k^{\text{tot}}, \quad \Upsilon_h = \sum_{k \in S} \gamma_k (H_k^{\text{tot}})^2 + \rho RT (\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + c_p T).$$

De plus, les matrices de diffusion $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$ se décomposent sous la forme

$$\tilde{\mathbf{B}}_{ij} = \delta_{ij} \mathbf{R} T \tilde{\mathbf{B}}^D + \kappa \mathbf{R} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa + \eta \mathbf{R} T \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\eta,$$

avec

$$\tilde{\mathbf{B}}^D = \frac{1}{p} \begin{bmatrix} \left[\hat{D}_{kl} \gamma_k \gamma_l \right]_{k,l \in \mathbf{S}} & & \text{Sym} \\ 0_{d,n^s} & 0_{d,d} & \\ \left[\sum_{k \in \mathbf{S}} \gamma_l \hat{D}_{kl} (p\chi_k + \gamma_k H_k) \right]_{l \in \mathbf{S}} & 0_{1,d} & \Upsilon_D \end{bmatrix},$$

où

$$\Upsilon_D = \lambda p T + \sum_{k,l \in \mathbf{S}} \hat{D}_{kl} (p\chi_k + \gamma_k H_k) (p\chi_l + \gamma_l H_l),$$

et, en notant $\boldsymbol{\xi} = (\xi_i)_{i \in \mathbf{C}}$ et $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_i)_{i \in \mathbf{C}}$ des vecteurs quelconques de $\mathbb{R}^d$, les matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa$ et $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\eta$, $i, j \in \mathbf{C}$, sont données par

$$\sum_{i,j \in \mathbf{C}} \xi_i \zeta_j \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, d} & 0_{n^s, 1} \\ 0_{d, n^s} & \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\zeta} & \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{\xi} \\ 0_{1, n^s} & \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\zeta}^T & \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\zeta} \end{bmatrix},$$

et

$$\sum_{i,j \in \mathbf{C}} \xi_i \zeta_j \tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\eta = \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, d} & 0_{n^s, 1} \\ 0_{d, n^s} & \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbb{I}_{d,d} + \boldsymbol{\zeta} \otimes \boldsymbol{\xi} - \frac{2}{3} \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\zeta} & \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\zeta} - \frac{2}{3} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{\xi} \\ 0_{1, n^s} & \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbf{v}^T + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{\xi}^T - \frac{2}{3} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\zeta}^T & \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{3} \boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{v} \boldsymbol{\zeta} \cdot \mathbf{v} \end{bmatrix}.$$

Preuve - III.17 -

Les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_0$, $\tilde{\mathbf{A}}_i$, $i \in \mathbf{C}$, $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathbf{C}$, sont facilement évaluées en utilisant la variable naturelle $\mathbf{Z}$. On voit alors immédiatement que les matrices $\tilde{\mathbf{A}}_0$, $\tilde{\mathbf{A}}_i$, $i \in \mathbf{C}$, sont symétriques et que les matrices $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathbf{C}$, vérifient $(\tilde{\mathbf{B}}_{ij})^T = \tilde{\mathbf{B}}_{ji}$. De plus, la matrice $\tilde{\mathbf{A}}_0$ est définie positive car pour tout vecteur $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n^s+d+1}$ écrit sous la forme $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^T, \mathbf{x}^T, x)^T$, où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n^s}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ et $x \in \mathbb{R}$, on a

$$\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{A}}_0 \mathbf{X} = \rho \mathbf{R} c_v T^2 x^2 + \rho \mathbf{R} T (\mathbf{x} + x \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{x} + x \mathbf{v}) + \sum_{k \in \mathbf{S}} \gamma_k (\mathbf{x}_k + m_k \mathbf{v} \cdot \mathbf{x} + x E_k^{\text{tot}})^2.$$

De même, la matrice $\tilde{\mathbf{B}}$ est définie positive d'après la relation

$$\begin{aligned} \frac{1}{RT} \mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{X} = & \frac{1}{p} \sum_{k,l \in \mathcal{S}} \hat{D}_{kl} (\gamma_k \mathbf{x}_k + (p\chi_k + \gamma_k H_k)x) (\gamma_l \mathbf{x}_l + (p\chi_l + \gamma_l H_l)x) + \lambda T x^2 \\ & + \eta(\mathbf{x} + x\mathbf{v}) \cdot (\mathbf{x} + x\mathbf{v}) + (\kappa + \frac{1}{3}) (\boldsymbol{\xi} \cdot (\mathbf{x} + x\mathbf{v}))^2. \end{aligned}$$

On déduit alors du théorème d'équivalence III.8 que la fonction σ est une entropie mathématique. ■

III.6.2 Variable normale

On étudie à présent les formes normales du système (III.31). On commence par établir la propriété d'invariance des noyaux.

Lemme III.18

Le noyau de la matrice

$$\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{V}, \epsilon, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{i,j \in \mathcal{C}} \tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V}, \epsilon) \xi_i \xi_j$$

ne dépend ni de $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_{\mathbf{V}}$ ni de $\boldsymbol{\xi} \in \Sigma^{d-1}$, où Σ^{d-1} est la sphère unité en dimension d . Pour tout $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$, ce noyau $N(\tilde{\mathbf{B}})$ est engendré par les vecteurs

$$(\mathbf{m}^T, 0_{1,d}, 0)^T, \quad (\boldsymbol{\varkappa}^T, 0_{1,d}, 0)^T,$$

et on a $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V})N(\tilde{\mathbf{B}}) = 0$, $i, j \in \mathcal{C}$, pour tout $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_{\mathbf{V}}$, $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$.

Preuve - III.18 -

L'expression de $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{X}$ dans la preuve du théorème III.17 montre immédiatement que $\mathbf{X}^T \tilde{\mathbf{B}} \mathbf{X} = 0$ si, et seulement si, $\mathbf{x} = 0$, $x = 0$ et $\mathbf{x} \in N(\hat{D})$. En utilisant le lemme III.1, on obtient que $N(\tilde{\mathbf{B}})$ est engendré par les vecteurs $(\mathbf{m}^T, 0_{1,3}, 0)^T$ et $(\boldsymbol{\varkappa}^T, 0_{1,3}, 0)^T$. Un calcul direct permet alors de montrer $\tilde{\mathbf{B}}_{ij}(\mathbf{V})N(\tilde{\mathbf{B}}) = 0$, $i, j \in \mathcal{C}$, pour tout $\mathbf{V} \in \mathcal{O}_{\mathbf{V}}$, $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$. ■

En utilisant la base explicite du noyau $N(\tilde{\mathbf{B}})$, on définit la matrice $\mathbf{P}$ par

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} m_1 & \varkappa_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ m_2 & \varkappa_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ m_3 & \varkappa_3 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ m_{n^s} & \varkappa_{n^s} & 0 & \dots & 0 & 1 \\ & & 0_{d+1, n^s} & & & \mathbb{I}_{d+1, d+1} \end{bmatrix}. \quad (\text{III.75})$$

D'après le lemme III.18 et les hypothèses (Th₁-Th₅), en supposant par exemple que la première espèce est neutre et que la seconde est chargée positivement, on obtient aisément que la matrice $\mathbf{P}$ est toujours inversible, que ses deux premières colonnes engendrent le noyau $N(\tilde{\mathbf{B}})$ et enfin que la matrice $\mathbf{P}$ est une fonction régulière du paramètre $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$.

On peut alors introduire la variable auxiliaire $\mathbf{U}' = \mathbf{P}^T \mathbf{U}$ et la variable entropique correspondante $\mathbf{V}' = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{V}$ qui s'écrivent

$$\mathbf{U}' = \left(\rho, q, \gamma_3, \dots, \gamma_{n^s}, \rho \mathbf{v}^T, \mathcal{E} + \frac{1}{2} \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \right)^T,$$

et

$$\mathbf{V}' = \frac{1}{RT} \left(\frac{\varkappa_2 G_1 - \varkappa_1 G_2}{\varkappa_2 m_1 - \varkappa_1 m_2} - \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v}, \frac{m_2 G_1 - m_1 G_2}{\varkappa_2 m_1 - \varkappa_1 m_2}, G_3 - \alpha_3 G_1 - \beta_3 G_2, \dots, \right. \\ \left. G_{n^s} - \alpha_{n^s} G_1 - \beta_{n^s} G_2, \mathbf{v}^T, -1 \right)^T,$$

où on a défini les coefficients α_k et β_k , pour $3 \leq k \leq n^s$, par

$$\alpha_k = \frac{\varkappa_2 m_k - \varkappa_k m_2}{\varkappa_2 m_1 - \varkappa_1 m_2}, \quad \beta_k = \frac{\varkappa_k m_1 - \varkappa_1 m_k}{\varkappa_2 m_1 - \varkappa_1 m_2}.$$

D'après le théorème III.9, la propriété d'invariance des noyaux étant vérifiée d'après le lemme III.18, les variables normales sont de la forme $\mathbf{W} = (\phi_I(\mathbf{U}'_I, \epsilon), \phi_{II}(\mathbf{V}'_{II}, \epsilon))^T$, où ϕ_I et ϕ_{II} sont deux difféomorphismes de $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ et $\mathbb{R}^{n^s+d-1} \times \mathbb{R}$, $\mathbf{U}'_I$ est le vecteur des deux premières composantes de $\mathbf{U}'$ et $\mathbf{V}'_{II}$ est le vecteur des $n^s + d - 1$ dernières composantes de $\mathbf{V}'$. On choisit alors la variable normale $\mathbf{W}$ suivante

$$\mathbf{W} = \left(\rho, q, \log(\gamma_3 / \gamma_1^{\alpha_3} \gamma_2^{\beta_3}), \dots, \log(\gamma_{n^s} / \gamma_1^{\alpha_{n^s}} \gamma_2^{\beta_{n^s}}), \mathbf{v}^T, T \right)^T. \quad (\text{III.76})$$

Théorème III.19

L'application $(V, \epsilon) \mapsto (W, \epsilon)$ est un $\mathcal{C}^\infty$ difféomorphisme de l'ouvert $\mathcal{O}_{(V, \epsilon)}$ sur l'ouvert $\mathcal{O}_{(W, \epsilon)} = \mathcal{O}_{\rho, q} \times \mathbb{R}^{n^s + d - 2} \times (0, \infty) \times \mathbb{R}$, où

$$\mathcal{O}_{\rho, q} = \left\{ (u_1, u_2) \in \mathbb{R}^2 : u_1 > 0, \min_{k \in S} \frac{\varkappa_k}{m_k} u_1 < u_2 < \max_{k \in S} \frac{\varkappa_k}{m_k} u_1 \right\}.$$

Ce difféomorphisme admet une extension régulière en $\epsilon = 0$ et en $\epsilon = \bar{\epsilon}$. Le système écrit en terme de la variable W

$$\bar{A}_0 \partial_t W + \sum_{i \in C} \bar{A}_i \partial_i W = \sum_{i, j \in C} \partial_i (\bar{B}_{ij} \partial_j W) + \bar{T} + \bar{\Omega}, \quad (\text{III.77})$$

où

$$\begin{cases} \bar{A}_0 = (\partial_W V)^T \tilde{A}_0 (\partial_W V), & \bar{A}_i = (\partial_W V)^T A_i (\partial_W V), \\ \bar{B}_{ij} = (\partial_W V)^T \tilde{B}_{ij} (\partial_W V), & \bar{\Omega} = (\partial_W V)^T \tilde{\Omega}, \\ \bar{T} = - \sum_{i, j \in C} \partial_i (\partial_W V)^T \tilde{B}_{ij} (\partial_W V) \partial_j W, \end{cases}$$

est sous forme normale. La matrice $\bar{A}_0$ est donnée par

$$\bar{A}_0 = \begin{bmatrix} \bar{A}_0^{I, I} & 0_{2, n^s + d - 1} \\ 0_{n^s + d - 1, 2} & \bar{A}_0^{II, II} \end{bmatrix},$$

avec

$$\bar{A}_0^{I, I} = \frac{1}{\Sigma_{\varkappa^2} \Sigma_{m^2} - \Sigma_{m \varkappa}^2} \begin{bmatrix} \Sigma_{\varkappa^2} & \text{Sym} \\ -\Sigma_{m \varkappa} & \Sigma_{m^2} \end{bmatrix}, \quad \bar{A}_0^{II, II} = \begin{bmatrix} \bar{\mathcal{A}}^{II, II} & \text{Sym} \\ 0_{d, n^s - 2} & \frac{\rho}{RT} \mathbb{I}_{d, d} \\ 0_{1, n^s - 2} & 0_{1, d} & \frac{\rho c_v}{RT^2} \end{bmatrix},$$

$$\Sigma_{m^2} = \sum_{k \in S} \gamma_k m_k^2, \quad \Sigma_{m \varkappa} = \sum_{k \in S} \gamma_k m_k \varkappa_k, \quad \Sigma_{\varkappa^2} = \sum_{k \in S} \gamma_k \varkappa_k^2,$$

et $\bar{\mathcal{A}}^{II, II}$ est la matrice carrée de taille $n^s - 2$ dont les coefficients sont

$$\bar{\mathcal{A}}_{kl}^{II, II} = \gamma_k \delta_{kl} - \gamma_k \gamma_l \frac{m_k m_l \Sigma_{\varkappa^2} - (m_k \varkappa_l + m_l \varkappa_k) \Sigma_{m \varkappa} + \varkappa_k \varkappa_l \Sigma_{m^2}}{\Sigma_{\varkappa^2} \Sigma_{m^2} - \Sigma_{m \varkappa}^2}, \quad 3 \leq k, l \leq n^s.$$

En notant $\xi = (\xi_i)_{i \in C}^T$ un vecteur quelconque de $\mathbb{R}^d$, les matrices $\bar{A}_i$, $i \in C$, sont données par

$$\sum_{i \in C} \xi_i \bar{A}_i = \bar{A}_0 v \cdot \xi + \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & \text{Sym} \\ \bar{A}^\alpha & 0_{d, d} \\ 0_{1, n^s} & \frac{p}{RT^2} \xi^T & 0 \end{bmatrix},$$

où on définit les colonnes de la matrice $\bar{\mathbf{A}}^\alpha$ par

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{A}}_{1\bullet}^\alpha &= \frac{\rho\Sigma_{\mathcal{X}^2} - q\Sigma_{m\mathcal{X}}}{\Sigma_{\mathcal{X}^2}\Sigma_{m^2} - \Sigma_{m\mathcal{X}}^2}\boldsymbol{\xi}, & \bar{\mathbf{A}}_{2\bullet}^\alpha &= \frac{q\Sigma_{m^2} - \rho\Sigma_{m\mathcal{X}}}{\Sigma_{\mathcal{X}^2}\Sigma_{m^2} - \Sigma_{m\mathcal{X}}^2}\boldsymbol{\xi}, \\ \bar{\mathbf{A}}_{l\bullet}^\alpha &= \gamma_l \left(1 - \frac{\rho m_l \Sigma_{\mathcal{X}^2} - (\rho\mathcal{X}_l + m_l q)\Sigma_{m\mathcal{X}} + q\mathcal{X}_l \Sigma_{m^2}}{\Sigma_{\mathcal{X}^2}\Sigma_{m^2} - \Sigma_{m\mathcal{X}}^2} \right) \boldsymbol{\xi}, & 3 \leq l \leq n^s.\end{aligned}$$

Les matrices $\bar{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in \mathcal{C}$, ont la structure $\bar{\mathbf{B}}_{ij} = \delta_{ij}\bar{\mathbf{B}}^D + \bar{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa + \bar{\mathbf{B}}_{ij}^\eta$. De plus, si on note $\boldsymbol{\xi} = (\xi_i)_{i \in \mathcal{C}}^\top$ et $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_i)_{i \in \mathcal{C}}^\top$ deux vecteurs quelconques de $\mathbb{R}^d$, les matrices $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa$ et $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^\eta$, $i, j \in \mathcal{C}$, sont données par

$$\sum_{i,j \in \mathcal{C}} \xi_i \zeta_j (\bar{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa + \bar{\mathbf{B}}_{ij}^\eta) = \frac{1}{RT} \begin{bmatrix} 0_{n^s, n^s} & 0_{n^s, d} & 0_{n^s, 1} \\ 0_{d, n^s} & \eta \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\zeta} \mathbb{I}_{d,d} + \eta \boldsymbol{\zeta} \otimes \boldsymbol{\xi} + (\kappa - \frac{2}{3}\eta) \boldsymbol{\xi} \otimes \boldsymbol{\zeta} & 0_{d, 1} \\ 0_{1, n^s} & 0_{1, d} & 0_{1, 1} \end{bmatrix},$$

et la matrice $\bar{\mathbf{B}}^D$ est donnée par

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{B}}^D &= \frac{1}{pT} \begin{bmatrix} 0_{2,2} & & & \text{Sym} \\ 0_{n^s, 2} & \left[RT^2 \hat{D}_{kl} \gamma_k \gamma_l \right]_{3 \leq k, l \leq n^s} & & \\ 0_{d, 2} & 0_{d, n^s-2} & 0_{d, d} & \\ 0_{1, 2} & \left[\sum_{k \in \mathcal{S}} \hat{D}_{kl} \gamma_l (\gamma_k RT + \chi_k p) \right]_{3 \leq l \leq n^s} & 0_{1, d} & \Upsilon_D \end{bmatrix}, \\ \Upsilon_D &= \frac{1}{RT^2} \left(\lambda p T + \sum_{k, l \in \mathcal{S}} \hat{D}_{kl} (\gamma_k RT + \chi_k p) (\gamma_l RT + \chi_l p) \right),\end{aligned}$$

et finalement

$$\bar{\boldsymbol{\Omega}} = \left(0, 0, \omega_3, \dots, \omega_{n^s}, 0_{1, d}, -\frac{1}{RT^2} \sum_{k \in \mathcal{S}} E_k \omega_k \right)^\top.$$

Preuve - III.19 -

C'est une conséquence du théorème III.9 que l'on établit par de longs calculs. $\blacksquare$

III.7 Existence globale et stabilité asymptotique pour les plasmas ambipolaires

On étudie à présent la stabilité asymptotique des états d'équilibre du système sous forme normale (III.77) modélisant les plasmas ambipolaires ainsi que la limite lorsque la masse de l'électron tend vers zéro.

III.7.1 Résultats principaux

On considère le système (III.77) écrit en la variable normale $W = (W_I^T, W_{II}^T)^T$, avec le vecteur des variables hyperboliques

$$W_I = (\rho, q)^T, \quad (\text{III.78})$$

et celui des variables paraboliques

$$W_{II} = \left(\log(\gamma_3/\gamma_1^{\alpha_3}\gamma_2^{\beta_3}), \dots, \log(\gamma_{n^s}/\gamma_1^{\alpha_{n^s}}\gamma_2^{\beta_{n^s}}), \mathbf{v}^T, T \right)^T. \quad (\text{III.79})$$

Le résultat suivant est une conséquence directe de la structure axiomatique de la thermochimie [Gio99, GM98].

Proposition III.20

Soient une température $T^e > 0$, une vitesse $\mathbf{v}^e \in \mathbb{R}^d$, un vecteur de densité molaire $\gamma^f > 0$. On suppose que les propriétés (Th₁-Th₅) sont satisfaites. Il existe alors un unique état d'équilibre constant tel que

$$\Omega(U^e) = 0, \quad (\text{III.80})$$

de la forme $U^e = (\gamma_1^e, \dots, \gamma_{n^s}^e, \rho^e \mathbf{v}^{eT}, \rho^e e(T^e) + \frac{1}{2} \rho^e \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{v}^e)^T$ et tel que $\gamma^e \in (\gamma^f + \mathcal{R}) \cap (0, \infty)^{n^s}$.

On note que cet état d'équilibre ne dépend pas de la masse réduite de l'électron ϵ . De plus, lorsque γ^f est tel que $q^f = \langle \gamma^f, \mathbf{x} \rangle = 0$, on obtient $q^e = \langle \gamma^e, \mathbf{x} \rangle = 0$ car $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^\perp$ et $\gamma^e \in (\gamma^f + \mathcal{R})$. L'état d'équilibre correspondant aux différentes variables est alors noté à l'aide de l'exposant e . Par exemple, les états d'équilibre en les variables V et W seront respectivement notés V^e et W^e .

Preuve - III.20 -

Le terme source Ω s'écrit $\Omega = (\omega_1, \dots, \omega_{n^s}, 0_{1,d}, 0)^T$. Pour démontrer la proposition,

on caractérise le point d'équilibre comme l'unique minimum de la fonction de Helmholtz réduite

$$\mathcal{F}(T, \gamma) = \frac{1}{RT} \sum_{k \in S} \gamma_k (G_k - RT).$$

A température T^e fixée, la fonction $\mathcal{F}(T^e, \gamma)$ est une fonction de classe $\mathcal{C}^\infty$ strictement convexe pour $\gamma \in (0, \infty)^{n^s}$ car on peut écrire

$$\mathcal{F}(T^e, \gamma) = \sum_{k \in S} \gamma_k \left(\log \gamma_k - 1 + \frac{G_k^u(T^e)}{RT^e} \right).$$

De plus, un calcul direct permet de montrer que $\partial_{\gamma_k} \mathcal{F}(T^e, \gamma) = \mu_k(\gamma_k, T^e)$. En prolongeant la fonction $\mathcal{F}$ par continuité à la fermeture de $(\gamma^f + \mathcal{R}) \cap (0, \infty)^{n^s}$, on en déduit que la fonction $\mathcal{F}(T^e, \cdot)$ admet un unique minimum sur cet ensemble convexe fermé non vide. De plus ce minimum est atteint à l'intérieur de cet ensemble, en un point que l'on note $\gamma^e \in (\gamma^f + \mathcal{R}) \cap (0, \infty)^{n^s}$. On en déduit que le vecteur $\mu(\gamma^e, T^e) \in \mathcal{R}^\perp$. D'après les expressions (III.8) et (III.7) des productions chimiques ω_k , $k \in S$, et des taux d'avancement des réactions τ_r , $r \in \mathfrak{R}$, on obtient classiquement que le terme source $\Omega(U) = 0$ si, et seulement si, le vecteur $\mu(\gamma, T) \in \mathcal{R}^\perp$, ce qui termine la preuve. ■

Théorème III.21

Soient $d \geq 1$ et $l \geq [d/2] + 2$ des entiers. On considère le système (III.77) sous forme normale. Il existe alors $b > 0$ suffisamment petit tel que si W^0 satisfait $\|W^0 - W^e\|_l < b$, il existe une unique solution globale W pour tout $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$ au problème de Cauchy

$$\bar{A}_0 \partial_t W + \sum_{i \in C} \bar{A}_i \partial_i W = \sum_{i, j \in C} \partial_i (\bar{B}_{ij} \partial_j W) + \bar{T} + \bar{\Omega},$$

avec la condition initiale

$$W(0, \mathbf{x}) = W^0(\mathbf{x}),$$

telle que

$$\begin{aligned} W_I - W_I^e &\in \mathcal{C}^0([0, \infty), W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \infty), W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \\ W_{II} - W_{II}^e &\in \mathcal{C}^0([0, \infty), W_2^l(\mathbb{R}^d)) \cap \mathcal{C}^1([0, \infty), W_2^{l-2}(\mathbb{R}^d)), \\ \partial_{\mathbf{x}} W_I &\in L^2((0, \infty), W_2^{l-1}(\mathbb{R}^d)), \quad \partial_{\mathbf{x}} W_{II} \in L^2((0, \infty), W_2^l(\mathbb{R}^d)). \end{aligned}$$

De plus, W satisfait les estimations

$$\begin{aligned} \|W(t) - W^e\|_l^2 + \int_0^t (\|\partial_x \rho(\tau)\|_{l-1}^2 + \|\partial_x q(\tau)\|_{l-1}^2 + \|\partial_x v(\tau)\|_l^2 + \|\partial_x T(\tau)\|_l^2) d\tau \\ + \sum_{3 \leq k \leq n^s} \int_0^t \|\partial_x \log(\gamma_k / \gamma_1^{\alpha_k} \gamma_2^{\beta_k})(\tau)\|_l^2 d\tau \leq C \|W^0 - W^e\|_l^2, \end{aligned}$$

uniformément en ϵ , où C est une constante strictement positive, et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |W(t, x) - W^e(x)| = 0,$$

uniformément en ϵ . Finalement, si on explicite la dépendance en le paramètre ϵ en notant $W(t, x, \epsilon)$ la solution obtenue pour $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$, on a pour tout $\alpha \in [0, \bar{\epsilon}]$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \alpha} \sup_{t \geq 0} \|W(t, \cdot, \epsilon) - W(t, \cdot, \alpha)\|_{\mathcal{C}^{l-[d/2]-2}} = 0.$$

Les solutions physiques pertinentes correspondent aux conditions initiales telles que la charge initiale $q^0 = 0$ et aux états d'équilibre tels que la charge à l'équilibre $q^e = 0$, car dans cette situation, on retrouve facilement que la charge est constamment nulle $q(t, x) = 0$ pour tout $t \geq 0$ et pour tout $x \in \mathbb{R}^d$.

Théorème III.22

Soient $d \geq 2$ et $l \geq [d/2] + 3$ des entiers et W^0 une condition initiale telle que

$$W^0 - W^e \in W_2^l(\mathbb{R}^d) \cap L^p(\mathbb{R}^d),$$

avec $p \in [1, 2)$. Alors, si les normes $\|W^0 - W^e\|_l$ et $\|W^0 - W^e\|_{L^p}$ sont assez petites, l'unique solution globale du problème de Cauchy satisfait l'estimation de décroissance

$$\|W(t) - W^e\|_{l-2} \leq C(1+t)^{-\gamma} (\|W^0 - W^e\|_{l-2} + \|W^0 - W^e\|_{L^p}), \quad 0 \leq t,$$

uniformément en $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$, où C est une constante strictement positive et $\gamma = d(1/2p - 1/4)$. Finalement, pour tout $\alpha \in [0, \bar{\epsilon}]$, on a

$$\lim_{\epsilon \rightarrow \alpha} \sup_{t \geq 0} \|W(t, \cdot, \epsilon) - W(t, \cdot, \alpha)\|_{l-1} = 0.$$

III.7.2 Preuve

Le système d'équations aux dérivées partielles modélisant les plasmas ambipolaires a été écrit sous une forme normale au théorème III.19. Les coefficients apparaissant dans ce système sont des fonctions $\mathcal{C}^\infty$ de la variable normale $W \in \mathcal{O}_W$ et du paramètre $\epsilon \in [0, \bar{\epsilon}]$. De plus, les états d'équilibre ne dépendent pas du paramètre ϵ . Par conséquent, il est suffisant d'établir que les propriétés (Dis₁-Dis₄) sont satisfaites pour démontrer les théorèmes III.21 et III.22.

Le système linéarisé autour d'un état d'équilibre constant W^e s'écrit

$$\bar{A}_0(W^e, \epsilon) \partial_t w + \sum_{i \in C} \bar{A}_i(W^e, \epsilon) \partial_i w = \sum_{i, j \in C} \bar{B}_{ij}(W^e, \epsilon) \partial_i \partial_j w - \bar{L}(W^e, \epsilon) w,$$

où $\bar{L} = -\partial_W \bar{\Omega}$ et $w = W - W^e$. La propriété (Dis₁) est une conséquence directe de l'expression suivante de $\bar{L}(W^e, \epsilon)$ en un point d'équilibre

$$\bar{L}(W^e, \epsilon) = \sum_{r \in \mathfrak{R}} \hat{\mathcal{K}}_r \bar{\nu}_r \otimes \bar{\nu}_r, \quad (\text{III.81})$$

où

$$\bar{\nu}_r = \left(0, 0, \nu_{3r}, \dots, \nu_{r^s r}, 0, 0, 0, -\sum_{k \in S} \nu_{kr} E_k / RT^2 \right)^T$$

et

$$\hat{\mathcal{K}}_r = \frac{1}{R} \mathcal{K}_r^f(T^e) \prod_{k \in S} (\gamma_k^e)^{\nu_{kr}^f} = \frac{1}{R} \mathcal{K}_r^b(T^e) \prod_{k \in S} (\gamma_k^e)^{\nu_{kr}^b},$$

expression obtenue directement de celle de $\bar{\Omega}$ ou à partir de celle de $\tilde{L}(W^e)$ donnée par Giovangigli et Massot [Gio99, GM98]. Les propriétés (Dis₃) et (Dis₄) sont également établies par Giovangigli et Massot [Gio99, GM98]. Afin d'examiner si la propriété (Dis₂) est satisfaite, le moyen le plus pratique et le plus élégant est d'utiliser la propriété (Spe₃) du théorème III.11.

Proposition III.23

Pour tout état d'équilibre W^e , on a

$$N(\bar{B}(W^e, \xi, \epsilon)) = \mathbb{R}e^1 \oplus \mathbb{R}e^2 \subset N(\bar{L}(W^e, \epsilon)),$$

et si le point d'équilibre W^e est tel que $q^e = 0$, il existe des couples (Ψ, ζ) où Ψ est un vecteur non nul de $\mathbb{R}e^1 \oplus \mathbb{R}e^2$ et ζ un réel tels que $\zeta \bar{A}_0(W^e, \epsilon) \Psi + \bar{A}(W^e, \xi, \epsilon) \Psi = 0$.

Preuve - III.23 -

On utilise l'expression des matrices de diffusion $\bar{B}_{ij}$ donnée au théorème III.19. On considère un vecteur de $\mathbf{X}$ de $\mathbb{R}^{n^s+d+1}$ écrit sous la forme $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^T, \mathbf{x}^T, x)^T$, où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n^s}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ et $x \in \mathbb{R}$, et on obtient la relation

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} \langle \bar{B}(\mathbf{W}^e; \boldsymbol{\xi}, \epsilon) \mathbf{X}, \mathbf{X} \rangle &= \eta \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} + (\kappa + \frac{1}{3}\eta)(\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{x})^2 + \frac{\lambda}{T} x^2 \\ &+ \frac{1}{p} \sum_{k,l \in S} \hat{D}_{kl} [\gamma_k R T \tilde{\mathbf{x}}_k + (\gamma_k R T + p \chi_k) \frac{x}{T}] [\gamma_l R T \tilde{\mathbf{x}}_l + (\gamma_l R T + p \chi_l) \frac{x}{T}], \end{aligned}$$

où $\tilde{\mathbf{x}}_1 = \tilde{\mathbf{x}}_2 = 0$ et $\tilde{\mathbf{x}}_k = \mathbf{x}_k$ pour $k \geq 3$. On déduit de cette expression et de l'hypothèse (Tr_3) que le noyau de la matrice $\bar{B}(\mathbf{W}^e; \boldsymbol{\xi}, \epsilon)$ est indépendant de $\boldsymbol{\xi}$ dans la sphère unité de $\mathbb{R}^d$ et du paramètre ϵ et qu'il est engendré par les deux premiers vecteurs de la base canonique de $\mathbb{R}^{n^s+d+1}$ e^1 et e^2 . En utilisant l'expression (III.81) de $\bar{L}(\mathbf{W}^e; \epsilon)$, on obtient immédiatement que $\mathbb{R}e^1 \oplus \mathbb{R}e^2 \subset N(\bar{L}(\mathbf{W}^e; \epsilon))$. Un calcul direct donne alors

$$\begin{aligned} (\zeta \bar{A}_0 + \bar{A}_i(\boldsymbol{\xi}))(\alpha_1 e^1 + \alpha_2 e^2) &= \left((\zeta + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}) \frac{\alpha_1 \Sigma_{\mathbf{x}^2} - \alpha_2 \Sigma_{m\mathbf{x}}}{\Sigma_{\mathbf{x}^2} \Sigma_{m^2} - \Sigma_{m\mathbf{x}}^2}, (\zeta + \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}) \frac{\alpha_2 \Sigma_{m^2} - \alpha_1 \Sigma_{m\mathbf{x}}}{\Sigma_{\mathbf{x}^2} \Sigma_{m^2} - \Sigma_{m\mathbf{x}}^2}, \right. \\ &\quad \left. 0, \dots, 0, \frac{\rho(\alpha_1 \Sigma_{\mathbf{x}^2} - \alpha_2 \Sigma_{m\mathbf{x}}) - q(\alpha_2 \Sigma_{m^2} - \alpha_1 \Sigma_{m\mathbf{x}})}{\Sigma_{\mathbf{x}^2} \Sigma_{m^2} - \Sigma_{m\mathbf{x}}^2} \boldsymbol{\xi}^T, 0 \right)^T. \end{aligned}$$

En choisissant $\zeta = -\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\xi}$, $\alpha_1 = \Sigma_{m\mathbf{x}}$, $\alpha_2 = \Sigma_{\mathbf{x}^2}$ et $\Psi = \alpha_1 e^1 + \alpha_2 e^2$, on obtient que $\zeta \bar{A}_0 \Psi + \bar{A}_i(\boldsymbol{\xi}) \Psi = 0$ lorsque la charge totale q est nulle. ■

Cependant, ce problème est artificiel et dû à l'absence de dissipativité dans l'équation de la charge électrique, qui devrait garantir que la charge reste nulle. Il est possible d'introduire deux formes équivalentes au système gouvernant les plasmas ambipolaires dont les solutions régulières coïncident et qui garantissent la stricte dissipativité.

La première solution consiste à modifier le terme de production chimique $\bar{\Omega}$ en définissant

$$\bar{\Omega} = \bar{\Omega}^{(1)} + \bar{\Omega}^{(2)},$$

où $\bar{\Omega}^{(1)}$ est le terme source précédent dont l'expression est donnée au théorème III.19 et $\bar{\Omega}^{(2)}$ est défini par $\bar{\Omega}^{(2)} = \bar{L}^{(2)} \mathbf{W}$ avec

$$\bar{L}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0_{1,n^s+d-1} \\ 0 & \alpha & 0_{1,n^s+d-1} \\ 0_{n^s+d-1,1} & 0_{n^s+d-1,1} & 0_{n^s+d-1,n^s+d-1} \end{bmatrix},$$

où $\alpha > 0$ est un paramètre strictement positif. Dans ce cas, le noyau de la matrice $\bar{\mathbf{B}}(\mathbf{W}^e, \boldsymbol{\xi}, \epsilon)$ est inchangé mais le vecteur e^2 n'est plus dans celui de la matrice $\bar{\mathbf{L}}(\mathbf{W}^e, \epsilon)$. On a donc

$$N(\bar{\mathbf{B}}(\mathbf{W}^e, \boldsymbol{\xi}, \epsilon)) \cap N(\bar{\mathbf{L}}(\mathbf{W}^e, \epsilon)) = \mathbb{R}e^1,$$

et la stricte dissipativité est alors facilement établie. De plus, l'équation de la charge correspondante s'écrit

$$\partial_t q + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (q \mathbf{v}) = -\alpha q,$$

et contient un terme de consommation $-\alpha q$. Cette équation garantit bien sûr que la charge reste nulle si $q^0 = q^e = 0$, les solutions physiques du système modifié coïncidant ainsi avec les solutions physiques du système originel.

La seconde modification, dont les conséquences pour la stabilité numérique sont intéressantes, consiste à changer les coefficients de diffusion. L'équation de la charge qui en résulte contient alors un terme de diffusion et il ne reste qu'une seule composante hyperbolique. Plus précisément, on modifie les matrices $\bar{\mathbf{B}}_{ij}$, $i, j \in C$, sous la forme

$$\bar{\mathbf{B}}_{ij} = \bar{\mathbf{B}}_{ij}^{(1)} + \delta_{ij} \bar{\mathbf{B}}^{(2)}, \quad i, j \in C,$$

où $\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{(1)}$ désigne la matrice de diffusion précédente dont l'expression est donnée au théorème III.19 et où $\bar{\mathbf{B}}^{(2)}$ est défini par

$$\bar{\mathbf{B}}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0_{1, n^s+d-1} \\ 0 & \alpha & 0_{1, n^s+d-1} \\ 0_{n^s+d-1, 1} & 0_{n^s+d-1, 1} & 0_{n^s+d-1, n^s+d-1} \end{bmatrix},$$

où $\alpha > 0$ est un paramètre strictement positif. Dans ce cas, le noyau de la matrice $\bar{\mathbf{B}}(\mathbf{W}^e, \boldsymbol{\xi}, \epsilon)$ ne contient pas le vecteur e^2 et celui de la matrice $\bar{\mathbf{L}}(\mathbf{W}^e, \epsilon)$ reste inchangé. On a donc

$$N(\bar{\mathbf{B}}(\mathbf{W}^e, \boldsymbol{\xi}, \epsilon)) \cap N(\bar{\mathbf{L}}(\mathbf{W}^e, \epsilon)) = \mathbb{R}e^1,$$

et la stricte dissipativité est alors facilement établie. L'équation de la charge correspondante s'écrit à présent

$$\partial_t q + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (q \mathbf{v}) = \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha \partial_{\mathbf{x}} q),$$

et le terme de diffusion $\partial_{\mathbf{x}} \cdot (\alpha \partial_{\mathbf{x}} q)$ a un effet stabilisant [Gio99]. Cette équation garantit à nouveau que la charge reste nulle si $q^0 = q^e = 0$, les solutions physiques du système modifié coïncidant ainsi avec les solutions physiques du système originel. Bien entendu, ces deux modifications peuvent être combinées.

Références bibliographiques

Chapitre III

- [Bra65] S.I. Braginskii, “Transport Processes in a Plasma”, M.A. Leontovich, editor, Review of plasma physics **1** (1965), pp. 205–311.
- [DBD97] C. Desmeuse, G. Buffa and B. Dubroca, “Different levels of modeling for diffusion phenomena in neutral and ionized mixtures”, J. Therm. Heat Trans. **11** (1997), pp. 36–44.
- [EG94] A. Ern and V. Giovangigli, *Multicomponent transport Algorithms*, Lectures Notes in Physics, Series monographs, m24, Springer, Berlin, 1994.
- [FK72] J. H. Ferziger and H. G. Kaper, *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [GG03] V. Giovangigli and B. Graille, “Kinetic theory of partially ionized reactive gas mixtures”, Physica A **327** (2003), pp. 313–348.
- [GG04] ———, “Asymptotic Stability of Equilibrium States for Ambipolar Plasmas”, Math. Mod. Meth. Appl. Sci. **14** (2004), no. 9, pp. 1361–1399.
- [Gio91] V. Giovangigli, “Convergent Iterative Methods for Multicomponent Diffusion”, Impact Comput. Sci. Eng. **3** (1991), pp. 244–276.
- [Gio99] ———, *Multicomponent Flow Modeling*, Birkhäuser, 1999.
- [GM98] V. Giovangigli and M. Massot, “Asymptotic Stability of Equilibrium States for Multicomponent Reactive Flows”, Math. Mod. Meth. Appl. Sci. **8** (1998), pp. 251–297.
- [Kaw84] S. Kawashima, *Systems of a Hyperbolic-Parabolic Composite Type, with Applications to the equations of Magnetohydrodynamics*, Doctoral thesis, Kyoto University, 1984.
- [KS88] S. Kawashima and Y. Shizuta, “On the normal form of the symmetric hyperbolic-parabolic systems associated with the conservation laws”, Tôhoku Math. J. **40** (1988), pp. 449–464.

- [RC93] J.D. Ramshaw and C.H. Chang, “Ambipolar diffusion in two-temperature multicomponent plasmas”, *Plasma chem. plasma Process.* **13** (1993), pp. 489–498.
- [SK85] Y. Shizuta and S. Kawashima, “Systems of equations of hyperbolic-parabolic type with applications to the discrete boltzmann equation”, *Hokkaido Math. J.* **14** (1985), pp. 249–275.

Simulations numériques de flammes laminaires ionisées

Résumé

On effectue des simulations numériques de flammes planes laminaires et de flammes laminaires étirées pour un mélange ionisé hydrogène-air. Pour ces configurations géométriques, les équations considérées ne font apparaître qu'une seule variable d'espace. On utilise une méthode de Newton modifiée pour résoudre les équations discrétisées par différences finies sur une grille adaptative. Pour évaluer les propriétés thermochimiques et les propriétés de transport, on a recours à des bibliothèques externes **CHEMKIN II** et **EGLIB**. Une difficulté importante est la recherche de données thermochimiques concernant les molécules ionisées. On obtient des structures de flammes planes typiques d'un mélange hydrogène-air et l'on observe que l'impact de l'ionisation est faible. On obtient aussi des structures de flammes étirées pour un étirement fort et pour un étirement faible, l'ionisation de la flamme modifiant également peu ces structures.

IV.1 Introduction

Dans ce chapitre, on s'intéresse à la simulation numérique de deux types de flammes laminaires. Les flammes planes laminaires prémélangées adiabatiques ionisées dont la vitesse de flamme est une caractéristique essentielle du mélange réactif et les flammes laminaires étirées ionisées dont l'étirement imposé par l'écoulement est un aspect fondamental.

Les équations des flammes laminaires ionisées non magnétisées peuvent être obtenues dans la limite des faibles nombres de Mach à partir des équations générales des mélanges gazeux réactifs ionisés décrites au chapitre I. Ces équations se décomposent en équations de conservation, relations thermochimiques, expressions des flux de transport et équation de Poisson. Comme le champ magnétique est négligé dans ce modèle, il n'y aura pas d'anisotropie dans les flux de diffusion de masse, dans le flux de chaleur ni dans le tenseur de viscosité. Pour les deux types de flammes, les équations considérées ne font apparaître qu'une seule variable d'espace. On s'intéressera aux solutions stationnaires de ces équations pour lesquelles il est important de choisir les conditions aux limites correctes pour obtenir des solutions physiques.

Pour résoudre numériquement les équations des flammes planes ionisées et des flammes étirées ionisées, on les discrétise par différences finies et on utilise une méthode de Newton modifiée, dont les matrices jacobiennes sont également évaluées par différences finies. La présence de forts gradients, en particulier dans les fronts de flamme rend nécessaire l'utilisation de grilles adaptatives. Pour évaluer les propriétés thermodynamiques, les taux de production chimique et les propriétés de transport, on utilise des bibliothèques indépendantes du noyau numérique du code. On utilise notamment une version restructurée et vectorisée de la bibliothèque `CHEMKIN II` pour la thermochimie [KMJ80, GD88, KRM89] et la bibliothèque `EGLIB` pour le transport [EG94, EG95, EG96, EG97]. Pour faire varier l'étirement des flammes laminaires étirées considérées, on privilégie une méthode de continuation à un calcul direct beaucoup plus difficile [GS89].

On considère pour les simulations numériques des flammes d'un mélange hydrogène-air. Dans de telles flammes, le nombre d'espèces chimiques est assez réduit ; on considère en particulier un mécanisme réactionnel à 11 espèces comprenant 2 espèces ionisées. Le modèle et le logiciel utilisés permettent d'étudier des mécanismes beaucoup plus complexes, mais il est difficile en pratique d'obtenir les données thermochimiques des espèces ionisées, en particulier pour les espèces carbonées. On obtient des structures de flammes planes typiques d'un mélange hydrogène-air et l'on observe que l'impact de l'ionisation est faible. On obtient aussi des structures de

flammes étirées pour un étirement fort et pour un étirement faible, l'ionisation de la flamme modifiant également peu ces structures.

On présente dans la deuxième section les équations des flammes isobares ionisées. La troisième section est consacrée aux équations des flammes planes et la quatrième aux équations des flammes étirées. La cinquième section est consacrée à l'explicitation de la méthode numérique utilisée pour ces deux modèles. Enfin, dans la sixième section, on détaille les résultats numériques pour une flamme plane d'hydrogène stœchiométrique et pour deux flammes étirées d'hydrogène stœchiométrique avec des étirements de $2000s^{-1}$ et de $400s^{-1}$.

IV.2 Equations des flammes isobares ionisées

Les équations gouvernant les flammes isobares ionisées sont obtenues en faisant tendre le nombre de Mach vers zéro dans les équations générales des mélanges gazeux réactifs ionisés, obtenues elles à partir de la théorie cinétique des gaz ionisés. Elles peuvent se décomposer en équations de conservation, flux de transport, relations thermochimiques et équation de Poisson.

IV.2.1 Equations de conservation

On considère un mélange gazeux réactif et ionisé et on note S l'ensemble des indices des espèces $S = \{1, \dots, n^s\}$, n^s le nombre d'espèces dans le mélange, ρ la masse totale par unité de volume, Y_k , $k \in S$, la fraction massique de la k^e espèce, q_k , $k \in S$, la charge par unité de volume de la k^e espèce, m_k , $k \in S$, la masse molaire de la k^e espèce.

Dans la limite des faibles nombres de Mach, l'équation de conservation de la masse totale dans le mélange peut s'écrire

$$\partial_t \rho + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (\text{IV.1a})$$

où $\mathbf{v}$ est la vitesse macroscopique du mélange. En utilisant les fractions massiques des espèces Y_k , $k \in S$, les équations de conservation de la masse de chaque espèce se mettent sous la forme

$$\partial_t (\rho Y_k) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho Y_k \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho Y_k \mathbf{V}_k) = m_k \omega_k, \quad k \in S, \quad (\text{IV.1b})$$

où $\mathbf{V}_k$, $k \in S$, est la vitesse de diffusion de la k^e espèce et ω_k , $k \in S$, le taux molaire de production de la k^e espèce par unité de volume. L'équation suivante exprime la conservation de la quantité de mouvement

$$\partial_t(\rho \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{\Pi} + \partial_{\mathbf{x}} \tilde{p} = \rho \mathbf{g} + q \mathbf{E}, \quad (\text{IV.1c})$$

où $\mathbf{\Pi}$ est le tenseur de viscosité, $\mathbf{g}$ la gravité, $\tilde{p}$ la perturbation aérodynamique de la pression, q la charge totale par unité de volume et $\mathbf{E}$ le champ électrique. Enfin, l'équation de conservation de l'énergie écrite pour l'enthalpie devient

$$\partial_t(\rho h) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot (\rho h \mathbf{v}) + \partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{Q} = \partial_t p_u,$$

où h est l'enthalpie interne totale par unité de masse, $\mathbf{Q}$ le flux de chaleur et p_u la composante uniforme de la pression. La pression p a classiquement été décomposée sous la forme

$$p = p_u + \tilde{p},$$

où p_u est une pression spatialement uniforme et $\tilde{p}$ une perturbation aérodynamique de p_u telle que le rapport $\tilde{p}/p_u$ soit de l'ordre du carré du nombre de Mach. L'équation de conservation de l'énergie s'écrit également en fonction de la température absolue T sous la forme

$$\begin{aligned} \rho c_p \partial_t T + \rho c_p \mathbf{v} \cdot \partial_{\mathbf{x}} T = & -\partial_{\mathbf{x}} \cdot \left(\mathbf{Q} - \sum_{k \in S} \rho Y_k h_k \mathbf{V}_k \right) - \sum_{k \in S} c_{p,k} \rho Y_k \mathbf{V}_k \cdot \partial_{\mathbf{x}} T \\ & - \sum_{k \in S} h_k m_k \omega_k + \partial_t p_u, \quad (\text{IV.1d}) \end{aligned}$$

où $c_{p,k}$, $k \in S$, est la chaleur spécifique à pression constante de la k^e espèce et $-\sum_{k \in S} h_k m_k \omega_k$ représente le taux de dégagement de chaleur.

Dans les équations de conservation (IV.1), les inconnues traditionnelles, qui sont la masse totale ρ , la vitesse $\mathbf{v}$, la pression p , la température T et les fractions massiques des espèces $Y_1, \dots, Y_{n^s}$, sont remplacées par la vitesse $\mathbf{v}$, la perturbation de la pression $\tilde{p}$, la température T et les fractions massiques des espèces $Y_1, \dots, Y_{n^s}$ puisque la pression se décompose en $p = p_u + \tilde{p}$ et que la masse volumique ρ est donnée par la loi d'état précisée dans la section IV.2.2. Enfin, il est généralement plus précis et plus élégant de faire jouer des rôles symétriques à toutes les espèces chimiques et de considérer toutes les fractions massiques comme des inconnues, la relation $\sum_{k \in S} Y_k = 1$ étant alors un résultat des calculs.

IV.2.2 Relations thermodynamiques

Dans l'approximation des faibles nombres de Mach, la masse volumique ρ est donnée par la loi d'état simplifiée

$$\rho = \frac{p_u \bar{m}}{RT}, \quad (\text{IV.2})$$

où R est la constante des gaz parfaits et $\bar{m}$ la masse molaire du mélange dont l'expression est

$$\frac{1}{\bar{m}} = \sum_{k \in S} \frac{Y_k}{m_k}.$$

La masse totale par unité de volume ρ et la charge totale par unité de volume q peuvent s'écrire sous la forme

$$\rho = \sum_{k \in S} \rho_k, \quad q = \sum_{k \in S} q_k,$$

et les fractions massiques des espèces Y_k , $k \in S$, sont données par

$$Y_k = \rho_k / \rho.$$

L'enthalpie interne totale par unité de masse h peut se décomposer en

$$h = \sum_{k \in S} Y_k h_k,$$

où h_k , $k \in S$, est l'enthalpie interne par unité de masse de la k^e espèce. L'enthalpie interne ne dépend que de la température et son expression est la suivante

$$h_k(T) = h_k^{\text{st}} + \int_{T^{\text{st}}}^T c_{p,k}(\tau) d\tau,$$

où $h_k^{\text{st}} = h_k(T^{\text{st}})$, $k \in S$, est l'enthalpie de formation de la k^e espèce à la température strictement positive standard T^{st} et $c_{p,k}$, $k \in S$, est la chaleur spécifique à pression constante de la k^e espèce. Les chaleurs spécifiques à pression constante vérifient les relations

$$c_p = \sum_{k \in S} Y_k c_{p,k}.$$

L'entropie par unité de masse standard à la pression atmosphérique s^{atm} s'exprime également comme une somme des entropies par unité de masse standard des espèces s_k^{atm} , $k \in S$, plus précisément, on a

$$s^{\text{atm}} = \sum_{k \in S} Y_k s_k^{\text{atm}},$$

où l'entropie standard à la pression atmosphérique par unité de masse de la k^e espèce s_k^{atm} , $k \in S$, est donnée par

$$s_k^{\text{atm}} = s_k^{00} + \int_{T^0}^T \frac{c_{p,k}(\tau)}{\tau} d\tau,$$

où s_k^{00} , $k \in S$, est l'entropie de formation standard de la k^e espèce à la température standard T^0 et à la pression atmosphérique standard p^{atm} .

Les chaleurs spécifiques molaires à pression constante $C_{p,k}$, $k \in S$, les entropies molaires H_k , $k \in S$, et les entropies standard à la pression atmosphérique S_k^{atm} , $k \in S$, vérifient les relations

$$C_{p,k}(T) = m_k c_{p,k}(T), \quad H_k(T) = m_k h_k(T), \quad S_k^{\text{atm}}(T) = m_k s_k^{\text{atm}}(T).$$

Les propriétés thermodynamiques molaires $C_{p,k}$, H_k et S_k^{atm} sont en général évaluées par des polynômes d'approximation des données JANAF [CDD⁺85, KRM87, SP71]. Ces tables JANAF sont une excellente source de données thermodynamiques. Les chaleurs massiques, les enthalpies et les entropies de nombreux gaz y sont tabulées pour des températures comprises entre 298K et 5000/6000K et échelonnées de 100K en 100K, ce qui suffit pour la plupart des problèmes de flammes non ionisées. En ce qui concerne les chaleurs massiques, des polynômes couramment utilisés sont les polynômes d'approximation de la NASA et des laboratoires SANDIA. Ce sont des polynômes du quatrième degré sur différents intervalles de température

$$\frac{C_{p,k}}{R} = \begin{cases} a_{1k} + a_{2k}T + a_{3k}T^2 + a_{4k}T^3 + a_{5k}T^4, & \text{si } T_{\text{inf}} \leq T \leq T_{\text{mil}}, \\ a'_{1k} + a'_{2k}T + a'_{3k}T^2 + a'_{4k}T^3 + a'_{5k}T^4, & \text{si } T_{\text{mil}} \leq T \leq T_{\text{sup}}. \end{cases} \quad (\text{IV.3a})$$

On a des expressions similaires pour les enthalpies molaires H_k , $k \in S$,

$$\frac{H_k}{RT} = \begin{cases} a_{1k} + \frac{1}{2}a_{2k}T + \frac{1}{3}a_{3k}T^2 + \frac{1}{4}a_{4k}T^3 + \frac{1}{5}a_{5k}T^4 + a_{6k}/T, & \text{si } T_{\text{inf}} \leq T \leq T_{\text{mil}}, \\ a'_{1k} + \frac{1}{2}a'_{2k}T + \frac{1}{3}a'_{3k}T^2 + \frac{1}{4}a'_{4k}T^3 + \frac{1}{5}a'_{5k}T^4 + a'_{6k}/T, & \text{si } T_{\text{mil}} \leq T \leq T_{\text{sup}}, \end{cases} \quad (\text{IV.3b})$$

et les entropies molaires à la pression atmosphérique S_k^{atm} , $k \in S$,

$$\frac{S_k^{\text{atm}}}{R} = \begin{cases} a_{1k} \ln T + a_{2k}T + \frac{1}{2}a_{3k}T^2 + \frac{1}{3}a_{4k}T^3 + \frac{1}{4}a_{5k}T^4 + a_{7k}, & \text{si } T_{\text{inf}} \leq T \leq T_{\text{mil}}, \\ a'_{1k} \ln T + a'_{2k}T + \frac{1}{2}a'_{3k}T^2 + \frac{1}{3}a'_{4k}T^3 + \frac{1}{4}a'_{5k}T^4 + a'_{7k}, & \text{si } T_{\text{mil}} \leq T \leq T_{\text{sup}}, \end{cases} \quad (\text{IV.3c})$$

la température intermédiaire pouvant parfois dépendre des espèces chimiques $T_{\text{mil}} = T_{\text{milk}}$.

IV.2.3 Expression du terme source chimique

On considère n^r réactions chimiques entre les n^s espèces, ce qui peut s'écrire formellement sous la forme



où $\mathfrak{M}_k$ est le symbole chimique de la k^e espèce, ν_{kr}^f et ν_{kr}^b les coefficients stœchiométriques direct et inverse de la k^e espèce dans la r^e réaction et $\mathfrak{R} = \{1, \dots, n^r\}$ est l'ensemble des indices des réactions. Les taux moléculaires de production sont donnés par la théorie cinétique à la section I.6.5.5. On obtient donc

$$\omega_k = \sum_{r \in \mathfrak{R}} \nu_{kr} \tau_r, \quad k \in S, \quad (\text{IV.4})$$

où $\nu_{kr} = \nu_{kr}^b - \nu_{kr}^f$, $k \in S$, est le coefficient stœchiométriques total de la k^e espèce dans la r^e réaction et τ_r est le taux d'avancement de la r^e réaction donné en (I.25)

$$\tau_r = \mathcal{K}_r^f \prod_{k \in S} \gamma_k^{\nu_{kr}^f} - \mathcal{K}_r^b \prod_{k \in S} \gamma_k^{\nu_{kr}^b}, \quad r \in \mathfrak{R}, \quad (\text{IV.5})$$

où γ_k , $k \in S$, est le nombre de mole par unité de volume de la k^e espèce et $\mathcal{K}_r^f$ et $\mathcal{K}_r^b$, $r \in \mathfrak{R}$, sont les constantes de réaction directe et inverse de la r^e réaction. Si l'on note X_k , $k \in S$, la fraction molaire de la k^e espèce et Y_k , $k \in S$, la fraction massique de la k^e espèce, on a les relations

$$X_k = Y_k \frac{\bar{m}}{m_k}, \quad \gamma_k = X_k \frac{p}{RT}.$$

La constante de réaction directe de la k^e espèce $\mathcal{K}_r^f$, $r \in \mathfrak{R}$, est donnée par la loi d'Arrhénius généralisée

$$\mathcal{K}_r^f = \mathcal{K}_r^f(T) = A_r T^{\mathbf{b}_r} \exp(-E_r/RT), \quad (\text{IV.6})$$

où A_r , $r \in \mathfrak{R}$, est le facteur pré-exponentiel, $\mathbf{b}_r$, $r \in \mathfrak{R}$, l'exposant pré-exponentiel et E_r , $r \in \mathfrak{R}$, l'énergie d'activation de la r^e réaction. La constante de réaction inverse de la r^e réaction $\mathcal{K}_r^b$, $r \in \mathfrak{R}$, est reliée à la constante de réaction directe $\mathcal{K}_r^f$, $r \in \mathfrak{R}$, et à la constante d'équilibre $\mathcal{K}_r^{\text{eq}}$, $r \in \mathfrak{R}$, par la relation

$$\mathcal{K}_r^b = \frac{\mathcal{K}_r^f}{\mathcal{K}_r^{\text{eq}}}, \quad r \in \mathfrak{R}. \quad (\text{IV.7})$$

On récrit l'expression (I.26) de la constante d'équilibre en utilisant les quantités molaires et on obtient

$$\mathcal{K}_r^{\text{eq}} = \left(\frac{p^{\text{atm}}}{RT} \right)^{\sum_{k \in S} \nu_{kr}} \exp \left[\sum_{k \in S} \nu_{kr} \left(\frac{S_k^{\text{atm}}}{R} - \frac{H_k}{RT} \right) \right]. \quad (\text{IV.8})$$

Il n'est pas souhaitable de spécifier également la constante de réaction inverse $\mathcal{K}_r^{\text{b}}$, $r \in \mathfrak{R}$, par une loi d'Arrhénus généralisée

$$\mathcal{K}_r^{\text{b}} = \mathcal{K}_r^{\text{b}}(T) = \mathbf{A}'_r T^{\text{b}'_r} \exp(-\mathbf{E}'_r/RT),$$

car cela introduit une incohérence avec la loi fondamentale $\mathcal{K}_r^{\text{f}} = \mathcal{K}_r^{\text{b}} \mathcal{K}_r^{\text{eq}}$, $r \in \mathfrak{R}$. Or cette loi est une conséquence directe de la théorie cinétique des gaz et le second principe de la thermodynamique n'est assuré que lorsqu'elle est satisfaite pour toutes les réactions. Il est donc préférable de calculer la constante directe par la loi d'Arrhénus et d'utiliser la relation fondamentale pour l'évaluation de la constante inverse.

Certaines réactions nécessitent l'intervention d'un troisième corps arbitraire, qui peut être n'importe quelle espèce du mélange. Ce troisième corps apparaît alors à la fois comme produit et réactif de la réaction chimique. Dans cette situation, il est fréquent que les constantes de réaction associées à tous les troisièmes corps possibles aient toutes une même dépendance en la température. C'est-à-dire que seules les constantes pré-exponentielles diffèrent pour ces réactions. Il faut noter par ailleurs que les constantes d'équilibres de toutes ces réactions sont identiques car les contributions des troisièmes corps s'éliminent dans l'expression (IV.8). On peut par conséquent sommer les contributions de ces diverses réactions et considérer qu'elles sont le résultat d'une réaction fictive globale équivalente où l'on a remplacé tous les troisièmes corps par le symbole $\mathbf{M}$. Dans cette situation, le taux d'avancement de la réaction symbolique—qui correspond donc à la somme des réactions élémentaires obtenues lorsque $\mathbf{M}$ décrit l'ensemble des espèces—devient

$$\tau_r = \gamma_{\mathbf{M}r} \left(\mathcal{K}_r^{\text{f}} \prod_{k \in S} \gamma_k^{\nu_{kr}^{\text{f}}} - \mathcal{K}_r^{\text{b}} \prod_{k \in S} \gamma_k^{\nu_{kr}^{\text{b}}} \right), \quad r \in \mathfrak{R}, \quad (\text{IV.9})$$

où le troisième corps n'est pas pris en compte dans les coefficients stœchiométriques. La concentration $\gamma_{\mathbf{M}r}$, $r \in \mathfrak{R}$, du troisième corps équivalent $\mathbf{M}$ est alors donnée par

$$\gamma_{\mathbf{M}r} = \sum_{k \in S} \mathbf{g}_{kr} \gamma_k, \quad r \in \mathfrak{R}, \quad (\text{IV.10})$$

où les coefficients g_{kr} , $k \in S$, $r \in \mathfrak{R}$, sont égaux à un si toutes les espèces contribuent aussi efficacement comme troisième corps mais peuvent différer de un si des espèces contribuent plus efficacement que d'autres. Dans la situation où toutes les espèces contribuent de la même manière, le facteur supplémentaire pour le taux d'avancement τ_r , $r \in \mathfrak{R}$, est alors la concentration totale du mélange $\gamma_{\text{Mr}} = \sum_{k \in S} \gamma_k = p/(RT)$.

IV.2.4 Flux de transport

En utilisant les expressions des flux de transport données dans le chapitre I en (I.138), (I.140) et (I.141) dans le cas d'un champ magnétique faible, on obtient les expressions de ces flux en l'absence de champ magnétique. La vitesse de diffusion de la k^e espèce s'écrit

$$\mathbf{V}_k = - \sum_{l \in S} D_{kl} (\mathbf{d}_l + \chi_l \partial_{\mathbf{x}} \log T), \quad k \in S, \quad (\text{IV.11})$$

où $\mathbf{d}_k$, $k \in S$, est la force de diffusion de la k^e espèce donnée par

$$\mathbf{d}_k = \frac{1}{p} (\partial_{\mathbf{x}} p_k - q_k \mathbf{E}).$$

Dans ces relations, D_{kl} , $k, l \in S$, sont les coefficients de diffusion multiespèces et χ_k , $k \in S$, les taux de diffusion thermique. Le premier terme dans cette expression des vitesses de diffusion $\mathbf{V}_k$, $k \in S$, induit une diffusion due aux gradients de fractions molaires ou massiques et une baro-diffusion. Le second terme représente une diffusion des espèces due aux gradients de température que l'on appelle effet Soret.

L'expression du flux de chaleur est

$$\mathcal{Q} = -\lambda \partial_{\mathbf{x}} T + \sum_{k \in S} (p \chi_k + \rho_k h_k) \mathbf{V}_k, \quad (\text{IV.12})$$

où λ est la conductivité thermique. Le premier terme correspond à la loi de conduction de Fourier, le second terme, connu sous le nom d'effet Dufour, est un terme de couplage entre les flux massiques des espèces et le flux de chaleur et le dernier terme représente l'apport d'énergie des molécules par diffusion.

Finalement, le tenseur de viscosité est donné par

$$\mathbf{\Pi} = -\kappa (\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}) \mathbb{I} - \eta \mathbf{S}, \quad (\text{IV.13})$$

où $\mathbf{S}$ est le tenseur des taux de déformation, symétrique et à trace nulle,

$$\mathbf{S} = \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v} + \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{v}^T - \frac{2}{3}(\partial_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v})\mathbb{I},$$

κ est la viscosité volumique et η la viscosité de cisaillement.

La théorie cinétique ne fournit pas explicitement les coefficients de transport. L'évaluation de ces coefficients nécessite au préalable la résolution de systèmes linéaires de transport. La structure mathématique et les propriétés de ces systèmes ont été étudiées dans [Gio91] pour les coefficients de diffusion et dans [EG94] pour tous les autres coefficients de transport. Des algorithmes utilisant des méthodes itératives ont alors été développés [EG94]. La convergence de ces méthodes a été déduite des propriétés des équations de Boltzmann et des propriétés des matrices symétriques semi-définies positives qui apparaissent dans les systèmes linéaires de transport [EG94, EG95]. On a pu ainsi écrire sous forme de série convergente tous les coefficients de transport des mélanges gazeux réactifs. Les propriétés importantes des coefficients de transport, i.e., symétrie, conservation de la masse et production positive d'entropie sont bien vérifiées par les approximations. Cette théorie algorithmique du transport a fourni par troncature des coefficients de précision arbitraire et eu de nombreuses extensions [Gio99, EG94, EG95, EG96, EG97].

IV.2.5 Equation de Poisson

On considère que l'on n'impose pas de champ électrique extérieur et que le champ électrique interne $\mathbf{E}$ créé par la répartition des charges dérive du potentiel électrique Φ selon la relation

$$\mathbf{E} = -\partial_{\mathbf{x}} \Phi. \quad (\text{IV.14})$$

De plus, ce potentiel électrique Φ vérifie l'équation de Poisson

$$\partial_{\mathbf{x}} \cdot (\partial_{\mathbf{x}} \Phi) = -q/\varepsilon_0. \quad (\text{IV.15})$$

Il est donc possible de choisir entre les deux inconnues $\mathbf{E}$ et Φ selon le problème considéré. Le potentiel électrique Φ se prête bien à des problèmes aux limites où l'on impose un potentiel à l'aide de deux électrodes tandis que le champ électrique $\mathbf{E}$ est à privilégier lorsque l'on cherche des solutions de type onde où l'on impose aux gradients de tendre vers zéro en l'infini.

IV.3 Les équations des flammes planes

Dans cette section, on s'intéresse aux flammes planes laminaires prémélangées adiabatiques. Une flamme plane prémélangée est une onde de déflagration se propageant à vitesse uniforme dans un mélange combustible-oxydant. Une telle flamme est dite plane lorsque sa structure ne dépend que d'une seule variable d'espace. La vitesse de flamme—c'est-à-dire la vitesse de propagation—et la structure de l'onde de déflagration sont des caractéristiques fondamentales du mélange combustible-oxydant considéré.

De telles flammes planes peuvent être obtenues en injectant par exemple un mélange réactif combustible-oxydant dans un tube, à la vitesse de l'onde de déflagration, de sorte que la flamme est stationnaire dans le repère du laboratoire [Wil85, Cla85, QSB84], on a représenté un tel dispositif à la figure FIG. IV.1. On suppose qu'il n'y a pas de perte de chaleur sur les parois du tube, la flamme est donc adiabatique. Ces flammes se prêtent particulièrement bien à l'étude des cinétiques chimiques complexes de combustion et permettent de définir les limites d'inflamabilité [Wil85].

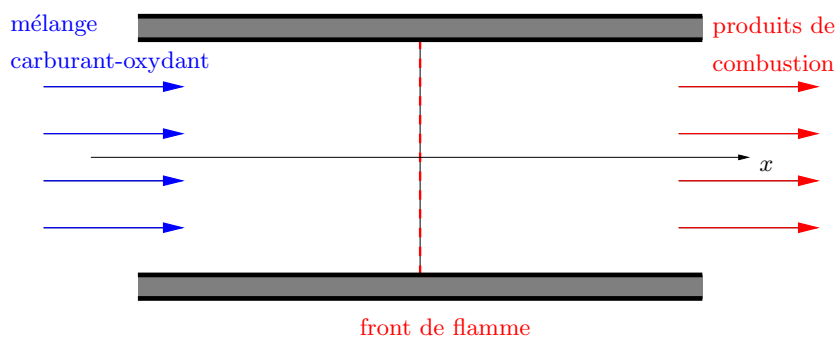


FIG. IV.1 – Configuration pour les flammes laminaires planes

IV.3.1 Les équations de conservation instationnaires

On écrit à présent les équations des flammes planes ionisées en particulierisant au cas mono-dimensionnel les équations des flammes isobares ionisées. On note (x, y, z) un système de coordonnées tel que x est la coordonnée normale à la flamme. On note $\mathbf{v} = (u, 0, 0)^T$ les coordonnées correspondantes de la vitesse du mélange. On suppose de plus que la gravité est soit négligeable soit dirigée dans la direction normale. En ce qui concerne le champ électrique, on suppose que l'on n'impose pas de champ

électrique extérieur et que le champ électrique interne créé par la répartition des charges est également porté par la direction normale, ce qui s'écrit $\mathbf{E} = (E, 0, 0)^T$.

On cherche alors une solution des équations de conservation (IV.1) sous la forme

$$\rho = \rho(t, x), \quad (\text{IV.16a})$$

$$u = u(t, x), \quad (\text{IV.16b})$$

$$\tilde{p} = \tilde{p}(t, x), \quad (\text{IV.16c})$$

$$T = T(t, x), \quad (\text{IV.16d})$$

$$Y_k = Y_k(t, x), \quad k \in S, \quad (\text{IV.16e})$$

$$E = E(t, x), \quad (\text{IV.16f})$$

c'est à dire que les variables ne dépendent toutes que de la variable d'espace dans la direction normale à la flamme.

L'expression (IV.11) donnant les vitesses de diffusion et l'hypothèse (Tr_1) sur les coefficients de transport montrent alors que la vitesse de diffusion de la k^e espèce $\mathbf{V}_k$, $k \in S$, est de la forme

$$\mathbf{V}_k = (U_k(t, x), 0, 0)^T, \quad k \in S. \quad (\text{IV.17a})$$

En reportant cette dernière équation dans l'expression du flux de chaleur (IV.12), on obtient immédiatement que le flux de chaleur est également mono-dimensionnel

$$\mathbf{Q} = (Q(t, x), 0, 0)^T. \quad (\text{IV.17b})$$

Puis, en utilisant l'expression (IV.13) du tenseur de viscosité et la forme mono-dimensionnelle de la vitesse $\mathbf{v}$, on obtient l'expression suivante pour le tenseur de viscosité

$$\mathbf{\Pi} = - \begin{pmatrix} (\kappa + \frac{4}{3}\eta)\partial_x u & 0 & 0 \\ 0 & (\kappa - \frac{2}{3}\eta)\partial_x u & 0 \\ 0 & 0 & (\kappa - \frac{2}{3}\eta)\partial_x u \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.17c})$$

On peut alors écrire les équations des flammes isobares adiabatiques ionisées mono-dimensionnelles. L'équation de conservation de la masse totale s'écrit

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0. \quad (\text{IV.18a})$$

En utilisant l'équation de conservation de la masse totale et les équations de conservation (IV.1), on obtient les équations de conservation de la masse de chaque espèce

et celle de la quantité de mouvement dans la direction normale

$$\rho \partial_t Y_k + \rho u \partial_x Y_k = m_k \omega_k - \partial_x (\rho Y_k U_k), \quad k \in S, \quad (\text{IV.18b})$$

$$\rho \partial_t u + \rho u \partial_x u = -\partial_x \tilde{p} + \rho g + qE + \partial_x \left((\kappa + \frac{4}{3}) \partial_x u \right). \quad (\text{IV.18c})$$

On écrit ensuite l'équation de conservation de la température sous la forme

$$\begin{aligned} \rho c_p \partial_t T + \rho u c_p \partial_x T = \partial_x \left[\lambda \partial_x T - p \sum_{k \in S} \chi_k U_k \right] - \sum_{k \in S} \rho Y_k U_k c_{p,k} \partial_x T \\ - \sum_{k \in S} m_k h_k \omega_k + \partial_t p_u, \end{aligned} \quad (\text{IV.18d})$$

et on termine par l'équation permettant de déterminer le champ électrique

$$\partial_x E = q/\varepsilon_0. \quad (\text{IV.18e})$$

L'équation de la quantité de mouvement dans la direction normale (IV.18c) se découple donc des autres équations. En pratique, on élimine cette équation qui ne sert éventuellement qu'à déterminer la correction $\tilde{p}$ de la pression.

IV.3.2 Les équations de conservation stationnaires

Dans le cas des régimes stationnaires, l'équation (IV.18a) devient

$$d_x c = 0, \quad (\text{IV.19a})$$

où $c = \rho u$ est le débit massique par unité de surface qui est donc constant à travers la flamme. Les équations de conservation de la masse des espèces (IV.18b) et de la température (IV.18d) deviennent

$$c d_x Y_k = m_k \omega_k - d_x (\rho Y_k U_k), \quad k \in S, \quad (\text{IV.19b})$$

$$c c_p d_x T = d_x \left(\lambda d_x T - p \sum_{k \in S} \chi_k U_k \right) - \left(\sum_{k \in S} \rho Y_k U_k c_{p,k} \right) d_x T - \sum_{k \in S} m_k h_k \omega_k. \quad (\text{IV.19c})$$

Enfin, l'équation permettant de déterminer le champ électrique est la suivante

$$d_x E = q/\varepsilon_0. \quad (\text{IV.19d})$$

On choisit donc de considérer la variable du champ électrique et non pas le potentiel électrique. Certains auteurs choisissent d'utiliser l'équation de Poisson permettant

de déterminer le potentiel électrique dans la flamme ionisée [PB93], le potentiel électrique Φ étant relié au champ électrique par la relation $E = -d_x \Phi$ pour les flammes planes. Ce choix conduit à imposer des conditions de type Dirichlet homogènes ou non pour le potentiel électrique, ce qui numériquement semble empêcher l'existence de solution onde. En effet, les simulations montrent que le champ électrique n'est pas nul à l'infini, ce qui implique un potentiel électrique infini à l'infini.

IV.3.3 Les conditions aux limites pour les flammes stationnaires

On considère une onde sur un domaine infini et on impose des conditions en $x = -\infty$ et en $x = +\infty$. En $x = -\infty$, c'est-à-dire où le mélange carburant-oxydant est injecté, on impose la température des gaz frais, les fractions massiques des gaz frais et le champ électrique

$$T(-\infty) = T^{\text{brl}}, \quad (\text{IV.20a})$$

$$Y_k(-\infty) = Y_k^{\text{brl}}, \quad k \in S, \quad (\text{IV.20b})$$

$$E(-\infty) = E^{\text{brl}}, \quad (\text{IV.20c})$$

les exposant “brl” désignant les conditions aux limites en $-\infty$ par analogie avec le modèle des brûleurs poreux.

Un des problèmes classiques soulevé par ces conditions aux limites est le problème de la frontière froide. En effet, les limites en $x = \pm\infty$ de $(T, Y_1, \dots, Y_{n^s})$ ne peuvent être que des points critiques du système et donc des points d'équilibre thermochimique. Mais seuls les gaz brûlés correspondent à un tel équilibre, l'origine du problème étant qu'à la température ambiante T^{brl} le mélange combustible-oxydant réagit toujours chimiquement, bien que très faiblement. Mais les temps caractéristiques d'évolution chimique des mélanges gazeux usuels à la température ambiante sont toujours très longs. Ainsi, ce problème n'est que théorique et n'engendre pas de difficultés numériques. Une solution à ce problème de la frontière froide consiste à introduire une température d'allumage T_i telle que pour les températures T inférieures à T_i les termes de production chimique soient nuls.

On peut alors utiliser cette température d'ignition T_i pour reformuler les conditions aux limites en $-\infty$. On choisit en effet une abscisse $\underline{x}$ telle que

$$T(\underline{x}) = T_i$$

et $T(x) \leq T_i$ pour $x \leq \underline{x}$. En intégrant alors les équations sur l'intervalle $(-\infty, \underline{x})$ on trouve après quelques manipulations algébriques les conditions aux limites suivantes

$$\rho(x)Y_k(x)U_k(x) + cY_k(x) = cY_k^{\text{brl}}, \quad k \in S, \quad x \leq \underline{x}, \quad (\text{IV.21a})$$

$$ch(x) + \mathcal{Q}(x) = ch^{\text{brl}}, \quad x \leq \underline{x}. \quad (\text{IV.21b})$$

Les conditions (IV.21a) traduisent la conservation du flux total de la k^e espèce dans le demi-espace $x \leq \underline{x}$ et la condition (IV.21b) la conservation du flux total d'énergie. En combinant ces deux conditions, il est possible de remplacer la condition (IV.21b) par la condition

$$-\lambda(x) d_x T(x) + p \sum_{k \in S} \chi_k(x) U_k(x) + c \sum_{k \in S} Y_k^{\text{brl}} (h_k(x) - h_k^{\text{brl}}) = 0, \quad x \leq \underline{x}. \quad (\text{IV.21c})$$

Dans les gaz brûlés, la solution doit converger vers un état d'équilibre thermochimique en $x = +\infty$ et on a donc

$$T(+\infty) = T^{\text{eq}}, \quad (\text{IV.22a})$$

$$Y_k(+\infty) = Y_k^{\text{eq}}, \quad k \in S. \quad (\text{IV.22b})$$

L'enthalpie, la pression et les concentrations atomiques de cet état d'équilibre sont celles des gaz frais. On peut facilement caractériser cet état $(T^{\text{eq}}, \mathbf{Y}^{\text{eq}})$ comme un maximum de l'entropie $s(h^{\text{brl}}, p^{\text{brl}}, \mathbf{Y})$ sur le simplexe de conservation des atomes $\mathbf{Y}^{\text{brl}} + \mathbf{M}\mathcal{R}$ où $\mathbf{M}\mathcal{R}$ est l'espace vectoriel engendré par les vecteurs stœchiométriques massiques associés aux réactions chimiques $(m_1 \nu_{1r}, \dots, m_{n^s} \nu_{n^s r})^T$, $r \in \mathfrak{R}$. On peut évaluer un tel état par de nombreux logiciels du domaine public. Toutefois, afin de supprimer le calcul préalable de l'état d'équilibre, on impose plus simplement que les conditions aux limites dans les gaz brûlés en $x = +\infty$ sont

$$d_x T(+\infty) = 0, \quad (\text{IV.23a})$$

$$d_x Y_k(+\infty) = 0, \quad k \in S, \quad (\text{IV.23b})$$

le calcul de l'état d'équilibre est alors asymptotique.

Enfin, on utilise une condition interne sur la température en imposant la température en un point interne. C'est-à-dire que l'on choisit une abscisse x_f , telle que $\underline{x} < x_f$ et une température T_f et que l'on impose

$$T(x_f) = T_f. \quad (\text{IV.24})$$

Ce choix revient à choisir une origine pour ce problème qui est invariant par translation. En pratique, on prend $T_f > T_i$ de telle sorte que le front de flamme se trouve autour de l'abscisse x_f . Cette dernière condition permet de stabiliser la flamme. On

Eq. pour	abscisse $\underline{x}$	abscisse x_f	abscisse $+\infty$
T	$\mathcal{Q} = c(h^{\text{brl}} - h)$	(IV.19c)	$d_x T = 0$
Y_k	$\rho Y_k U_k = c(Y_k^{\text{brl}} - Y_k)$	(IV.19b)	$d_x Y_k = 0$
c	(IV.19a)	$T = T_f$	(IV.19a)
E	$E = E^{\text{brl}}$	(IV.19d)	(IV.19d)

TAB. IV.1 – Implémentation des équations pour les flammes planes

considère donc deux conditions aux limites et une condition interne pour la température T , ce qui permet de déterminer le débit massique c comme une valeur propre [Gio99]. D'un point de vue numérique, on rajoute l'équation $d_x c = 0$ pour maintenir la structure bloc-tridiagonale du jacobien.

Le tableau TAB. IV.1 récapitule les conditions aux limites et les équations qui seront implémentées dans le logiciel de résolution pour les différentes inconnues aux points $\underline{x}$, x_f et $+\infty$. On remarque qu'il semble plus intéressant d'un point de vue numérique d'inverser les équations pour la température T et pour le débit massique par unité de surface c au point d'abscisse x_f .

IV.4 Les équations des flammes étirées

Dans cette section, on s'intéresse aux flammes laminaires étirées ionisées dans un écoulement à un point d'arrêt. On peut obtenir de telles flammes en dirigeant un jet de mélange combustible-oxydant contre une paroi, contre un jet identique ou contre un jet de produits de combustion. On obtient ainsi une ou deux flammes plates selon les différentes géométries considérées. On a représenté ces trois dispositifs aux figures FIG. IV.2, FIG. IV.3 et FIG. IV.4.

Un aspect fondamental de ces flammes est l'étirement imposé par l'écoulement. En effet, de nombreux modèles de combustion turbulente décrivent les zones de réaction comme des collections de flammelettes laminaires convectées et étirées par la turbulence. Or les écoulements à point d'arrêt constituent une configuration simple et naturelle pour l'étude des effets d'étirement. Les flammes plongées dans de tels écoulements présentent donc un intérêt considérable [DCM85, DCGS88, GS87, GS89, LLW83, LW82, LW83, LW84].

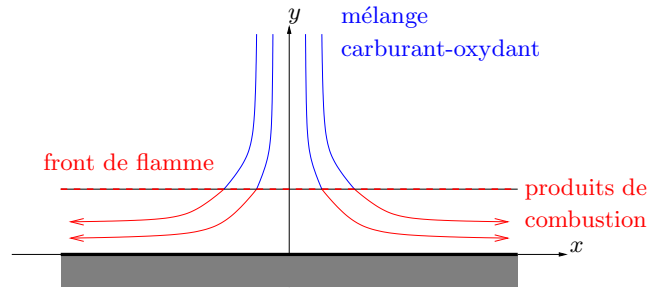


FIG. IV.2 – Configuration pour les flammes laminares étirées

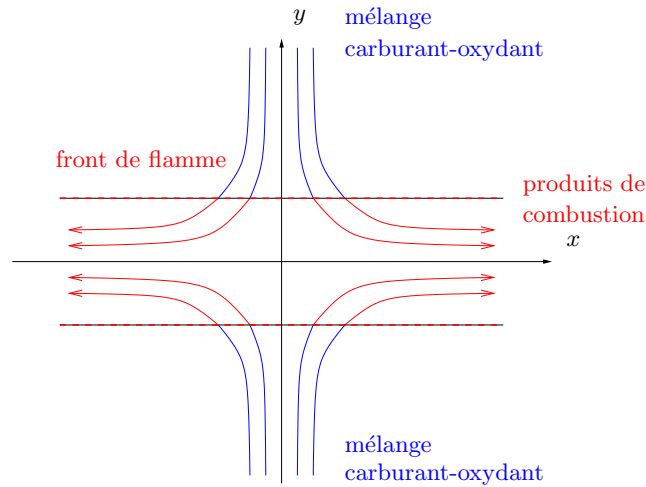


FIG. IV.3 – Configuration pour les flammes laminares étirées

IV.4.1 Les équations de conservation instationnaires

On considère une flamme prémélangée étirée dans un écoulement à point d'arrêt. Pour obtenir les équations qui régissent une telle flamme, il est habituel d'utiliser les équations simplifiées des couches limites réactives. Mais pour les géométries qui nous intéressent, c'est-à-dire celles des flammes plates, il est aussi possible d'obtenir ces équations à partir de celles qui régissent les flammes isobares en recherchant a priori des solutions similaires. Les solutions ainsi obtenues sont donc des solutions exactes des équations des flammes isobares et non pas seulement des équations des couches limites réactives. C'est cette seconde méthode que l'on utilise ici.

On note (x, y, z) un système de coordonnées tel que y est la coordonnée normale à la flamme et Oxz est le plan d'arrêt. On note $\mathbf{v} = (u, v, 0)^T$ et $\mathbf{V}_k = (U_k, V_k, 0)^T$, $k \in S$, les coordonnées correspondantes de la vitesse du mélange et des vitesses de diffusion

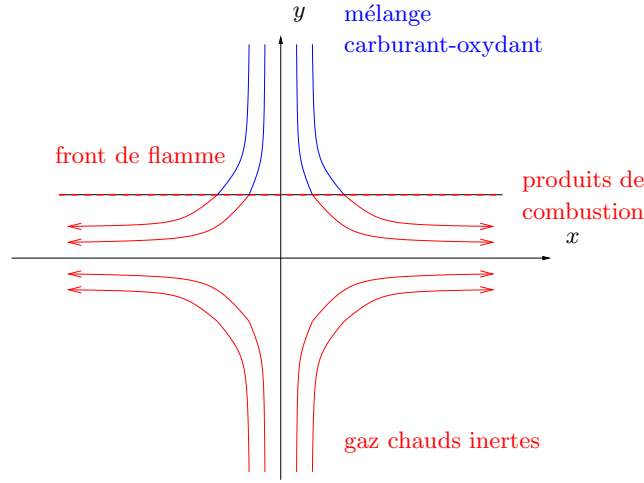


FIG. IV.4 – Configuration pour les flammes laminaires étirées

des espèces. On suppose de plus que la gravité est soit négligeable soit dirigée dans la direction normale. En ce qui concerne le champ électrique, on suppose que l'on n'impose pas de champ électrique extérieur.

On cherche alors une solution similaire des équations de conservation (IV.1) sous la forme

$$\rho = \rho(t, y), \quad (\text{IV.25a})$$

$$u = x \hat{u}(t, y), \quad (\text{IV.25b})$$

$$v = v(t, y), \quad (\text{IV.25c})$$

$$\tilde{p} = J(t)x^2/2 + \hat{p}(t, y), \quad (\text{IV.25d})$$

$$T = T(t, y), \quad (\text{IV.25e})$$

$$Y_k = Y_k(t, y), \quad k \in S, \quad (\text{IV.25f})$$

où $\hat{u}$ représente le gradient dans la direction tangentielle de la vitesse tangentielle, J la courbure tangentielle de la pression et $\hat{p}$ la variation normale de la pression. Les symétries du problème permettent alors de déduire que le champ électrique s'écrit $\mathbf{E} = (0, E, 0)^T$ avec

$$E = E(t, y). \quad (\text{IV.25g})$$

L'expression (IV.11) donnant les vitesses de diffusion et l'hypothèse (Tr_1) sur les coefficients de transport montrent alors que la vitesse de diffusion de la k^{e} espèce

V_k , $k \in S$, est de la forme

$$V_k = (0, V_k(t, y), 0)^T, \quad k \in S. \quad (\text{IV.26a})$$

En reportant cette dernière équation dans l'expression du flux de chaleur (IV.12), on obtient immédiatement que le flux de chaleur est également mono-dimensionnel

$$\mathcal{Q} = (0, \mathcal{Q}(t, y), 0)^T. \quad (\text{IV.26b})$$

Puis, en utilisant l'expression (IV.13) du tenseur de viscosité et la forme de la vitesse v , on obtient l'expression suivante pour le tenseur de viscosité

$$\Pi = - \begin{pmatrix} (\kappa + \frac{4}{3}\eta)\widehat{u} + (\kappa - \frac{2}{3}\eta)\partial_y v & \eta x \partial_y \widehat{u} & 0 \\ \eta x \partial_y \widehat{u} & (\kappa - \frac{2}{3}\eta)\widehat{u} + (\kappa + \frac{4}{3}\eta)\partial_y v & 0 \\ 0 & 0 & (\kappa - \frac{2}{3}\eta)(\widehat{u} + \partial_y v) \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.26c})$$

En reportant ces expressions dans les équations des flammes isobares, on obtient les équations des flammes laminaires étirées ionisées. L'équation de conservation de la masse totale s'écrit

$$\partial_t \rho + \rho \widehat{u} + \partial_y(\rho v) = 0. \quad (\text{IV.27a})$$

En utilisant l'équation de conservation de la masse totale, on obtient les équations de conservation de la masse de chaque espèce et celle de la quantité de mouvement dans les deux directions

$$\rho \partial_t Y_k + \rho v \partial_y Y_k + \partial_y(\rho Y_k V_k) = m_k \omega_k, \quad k \in S, \quad (\text{IV.27b})$$

$$\rho \partial_t \widehat{u} + \rho \widehat{u}^2 + \rho v \partial_y \widehat{u} = J + \partial_y(\eta \partial_y \widehat{u}), \quad (\text{IV.27c})$$

$$\rho \partial_t v + \rho v \partial_y v = -\partial_y \widehat{p} + \eta \partial_y \widehat{u} + \partial_y \left[(\kappa - \frac{2}{3}\eta)\widehat{u} + (\kappa + \frac{4}{3}\eta)\partial_y v \right] + \rho g + qE. \quad (\text{IV.27d})$$

On écrit ensuite l'équation de conservation de la température sous la forme

$$\rho c_p \partial_t T + \rho c_p v \partial_y T = \partial_y \left[\lambda \partial_y T - p \sum_{k \in S} \chi_k V_k \right] - \sum_{k \in S} c_{p,k} \rho Y_k V_k \partial_y T - \sum_{k \in S} h_k m_k \omega_k + \partial_t p_u, \quad (\text{IV.27e})$$

et on termine par l'équation de Poisson permettant de déterminer le champ électrique

$$E = -\partial_y \Phi, \quad \partial_y^2 \Phi = -q/\varepsilon_0. \quad (\text{IV.27f})$$

On choisit pour ce type de flamme d'utiliser le potentiel électrique car il est naturel d'imposer un potentiel nul à l'infini. En effet, cela correspond à avoir un potentiel

nul aux brûleurs situés à l'infini. L'équation de conservation de la quantité de mouvement normale (IV.27d) se découple donc des autres équations. En pratique, on élimine cette équation qui ne sert éventuellement qu'à déterminer la correction $\hat{p}$ de la pression.

Pour une géométrie axisymétrique, les équations des flammes sont légèrement modifiées. En faisant jouer à y le rôle de la coordonnée normale et à x celui du rayon polaire, il suffit de multiplier par un facteur 2 le terme $\rho\hat{u}$ de l'équation (IV.27a). On peut donc introduire un facteur géométrique $\mathbf{s}$ défini par

$$\mathbf{s} = \begin{cases} 0, & \text{pour une géométrie plane,} \\ 1, & \text{pour une géométrie axisymétrique,} \end{cases}$$

et finalement résoudre les équations

$$\partial_t \rho + (1 + \mathbf{s})\rho\hat{u} + \partial_y(\rho v) = 0, \quad (\text{IV.28a})$$

$$\rho \partial_t Y_k + \rho v \partial_y Y_k + \partial_y(\rho Y_k V_k) = m_k \omega_k, \quad k \in \mathbf{S}, \quad (\text{IV.28b})$$

$$\rho \partial_t \hat{u} + \rho \hat{u}^2 + \rho v \partial_y \hat{u} = J + \partial_y(\eta \partial_y \hat{u}), \quad (\text{IV.28c})$$

$$\rho c_p \partial_t T + \rho c_p v \partial_y T = \partial_y \left[\lambda \partial_y T - p \sum_{k \in \mathbf{S}} \chi_k V_k \right] - \sum_{k \in \mathbf{S}} c_{p,k} \rho Y_k V_k \partial_y T - \sum_{k \in \mathbf{S}} h_k m_k \omega_k + \partial_t p_u, \quad (\text{IV.28d})$$

$$\partial_y^2 \Phi = -q/\varepsilon_0. \quad (\text{IV.28e})$$

L'équation de l'impulsion normale est également modifiée mais elle se découple toujours du système précédent.

IV.4.2 Les conditions aux limites

Par analogie avec les couches limites aérodynamiques, on appelle “extérieur” le mélange en $+\infty$ et par analogie avec les brûleurs classiques de Tsuji, on appelle “brûleur” le mélange en $-\infty$ bien qu'il n'y ait aucun brûleur modélisé. On impose deux types de conditions aux limites, des conditions en $y = \pm\infty$ correspondant à l'injection de mélanges gazeux et en $y = 0$ correspondant au plan d'arrêt.

Les conditions aux limites dans le mélange “extérieur” en $y = +\infty$ sont

$$T(t, +\infty) = T^{\text{ext}}, \quad (\text{IV.29a})$$

$$Y_k(t, +\infty) = Y_k^{\text{ext}}, \quad k \in \mathbf{S}, \quad (\text{IV.29b})$$

$$\hat{u}(t, +\infty) = \hat{u}^{\text{ext}}, \quad (\text{IV.29c})$$

$$\Phi(t, +\infty) = \Phi^{\text{exr}}. \quad (\text{IV.29d})$$

On impose le même genre de conditions aux limites dans le mélange “brûleur” en $y = -\infty$.

$$T(t, -\infty) = T^{\text{brl}}, \quad (\text{IV.30a})$$

$$Y_k(t, -\infty) = Y_k^{\text{brl}}, \quad k \in \text{S}, \quad (\text{IV.30b})$$

$$\hat{u}(t, -\infty) = \hat{u}^{\text{brl}}, \quad (\text{IV.30c})$$

$$\Phi(t, -\infty) = \Phi^{\text{brl}}. \quad (\text{IV.30d})$$

L’origine du repère étant choisie dans le plan d’arrêt, on a aussi

$$v(t, 0) = 0. \quad (\text{IV.31})$$

Le tableau TAB. IV.2 récapitule les conditions aux limites et les équations qui seront implémentées dans le logiciel de résolution pour les différentes inconnues aux points $-\infty$, 0 et $+\infty$.

Eq. pour	abscisse $-\infty$	abscisse 0	abscisse $+\infty$
T	$T = T^{\text{brl}}$	(IV.28d)	$T = T^{\text{exr}}$
Y_k	$Y_k = Y_k^{\text{brl}}$	(IV.28b)	$Y_k = Y_k^{\text{exr}}$
$\hat{u}$	$\hat{u} = \hat{u}^{\text{brl}}$	(IV.28c)	$\hat{u} = \hat{u}^{\text{exr}}$
v	(IV.28a)	$v = 0$	(IV.28a)
Φ	$\Phi = \Phi^{\text{brl}}$	(IV.28e)	$\Phi = \Phi^{\text{exr}}$

TAB. IV.2 – Implémentation des équations pour les flammes étirées instationnaires

Enfin, il est usuel d’introduire le taux d’étirement $\mathbf{a}(t) = \hat{u}^{\text{exr}}(t)$ qui caractérise un gradient de vitesse tangentielle imposé par les conditions aux limites. En faisant tendre $y \rightarrow +\infty$ dans l’équation de la quantité de mouvement (IV.27c), on obtient la relation fondamentale de compatibilité entre la courbure tangentielle de la pression J et le taux d’étirement $\mathbf{a}$

$$\partial_t \mathbf{a}(t) + \mathbf{a}^2(t) = J(t)/\rho^{\text{exr}}. \quad (\text{IV.32})$$

Il existe également une relation de compatibilité similaire dans le mélange “brûleur”

$$\partial_t \hat{u}^{\text{brl}}(t) + (\hat{u}^{\text{brl}})^2(t) = J(t)/\rho^{\text{brl}}. \quad (\text{IV.33})$$

IV.4.3 Les variables traditionnelles

Il est traditionnel d'introduire les variables auxiliaires suivantes pour le calcul des flammes étirées

$$\tilde{u} = \frac{\hat{u}}{\mathbf{a}} = \frac{u}{\mathbf{a}x}, \quad \tilde{v} = \rho v. \quad (\text{IV.34})$$

Avec ces variables auxiliaires et en utilisant la relation (IV.32) de compatibilité entre J et $\mathbf{a}$, on peut récrire les équations des flammes étirées sous la forme

$$\partial_t \rho + (1+\mathbf{s})\rho \mathbf{a} \tilde{u} + \partial_y \tilde{v} = 0, \quad (\text{IV.35a})$$

$$\rho \partial_t Y_k + \tilde{v} \partial_y Y_k + \partial_y (\rho Y_k V_k) = m_k \omega_k, \quad k \in \mathbf{S}, \quad (\text{IV.35b})$$

$$\rho \partial_t \tilde{u} + \tilde{v} \partial_y \tilde{u} = \partial_y (\eta \partial_y \tilde{u}) + \mathbf{a}(\rho^{\text{exr}} - \rho \tilde{u}^2) + (\partial_t \mathbf{a}/\mathbf{a})(\rho^{\text{exr}} - \rho \tilde{u}), \quad (\text{IV.35c})$$

$$\rho c_p \partial_t T + c_p \tilde{v} \partial_y T = \partial_y \left[\lambda \partial_y T - p \sum_{k \in \mathbf{S}} \chi_k V_k \right] - \sum_{k \in \mathbf{S}} c_{p,k} \rho Y_k V_k \partial_y T - \sum_{k \in \mathbf{S}} h_k m_k \omega_k + \partial_t p_u, \quad (\text{IV.35d})$$

$$\partial_y^2 \Phi = -q/\varepsilon_0. \quad (\text{IV.35e})$$

Les conditions aux limites pour la température, les fractions massiques des espèces et pour le potentiel électrique sont inchangées et celles concernant les nouvelles variables s'écrivent

$$\tilde{v}(t, 0) = 0, \quad (\text{IV.36a})$$

$$\tilde{u}(t, +\infty) = 1, \quad (\text{IV.36b})$$

$$\partial_t \tilde{u}(t, -\infty) = \mathbf{a} \left(\frac{\rho^{\text{exr}}}{\rho^{\text{bri}}} - \tilde{u}^2(t, -\infty) \right) + \frac{\partial_t \mathbf{a}}{\mathbf{a}} \left(\frac{\rho^{\text{exr}}}{\rho^{\text{bri}}} - \tilde{u}(t, -\infty) \right). \quad (\text{IV.36c})$$

IV.4.4 Les équations des flammes étirées stationnaires

On considère à présent le cas des régimes stationnaires. L'équation de conservation de la masse totale (IV.35a) devient

$$(1+\mathbf{s})\rho \mathbf{a} \tilde{u} + \mathbf{d}_y \tilde{v} = 0, \quad (\text{IV.37a})$$

les équations de conservation des fractions massiques des espèces (IV.35b) se récrivent sous la forme

$$\tilde{v} \mathbf{d}_y Y_k + \mathbf{d}_y (\rho Y_k V_k) = m_k \omega_k, \quad k \in \mathbf{S}, \quad (\text{IV.37b})$$

l'équation de conservation de la quantité de mouvement (IV.35c) se simplifie en

$$\tilde{v} d_y \tilde{u} = d_y (\eta d_y \tilde{u}) + a(\rho^{\text{exr}} - \rho \tilde{u}^2), \quad (\text{IV.37c})$$

l'équation de la conservation de la température (IV.35d)

$$c_p \tilde{v} d_y T = d_y \left[\lambda d_y T - p \sum_{k \in S} \chi_k V_k \right] - \sum_{k \in S} c_{p,k} \rho Y_k V_k d_y T - \sum_{k \in S} h_k m_k \omega_k, \quad (\text{IV.37d})$$

et enfin, les équations (IV.35e) permettant de déterminer le champ électrique et le potentiel électrique sont inchangées

$$E = -d_y \Phi, \quad d_y^2 \Phi = -q/\varepsilon_0. \quad (\text{IV.37e})$$

Eq. pour	abscisse $-\infty$	abscisse 0	abscisse $+\infty$
T	$T = T^{\text{brl}}$	(IV.37d)	$T = T^{\text{exr}}$
Y_k	$Y_k = Y_k^{\text{brl}}$	(IV.37b)	$Y_k = Y_k^{\text{exr}}$
$\tilde{u}$	$\tilde{u} = 1$	(IV.37c)	$\tilde{u} = \sqrt{\rho^{\text{exr}}/\rho^{\text{brl}}}$
$\tilde{v}$	(IV.37a)	$\tilde{v} = 0$	(IV.37a)
Φ	$\Phi = \Phi^{\text{brl}}$	(IV.37e)	$\Phi = \Phi^{\text{exr}}$

TAB. IV.3 – Implémentation des équations pour les flammes étirées stationnaires

Les conditions aux limites sont analogues à celles des régimes instationnaires et sont obtenues en supprimant la dépendance par rapport au temps. Dans le mélange “extérieur” en $y = +\infty$, on a

$$T(+\infty) = T^{\text{exr}}, \quad (\text{IV.38a})$$

$$Y_k(+\infty) = Y_k^{\text{exr}}, \quad k \in S, \quad (\text{IV.38b})$$

$$\tilde{u}(+\infty) = 1, \quad (\text{IV.38c})$$

$$\Phi(+\infty) = \Phi^{\text{exr}}. \quad (\text{IV.38d})$$

Et dans le mélange “brûleur” en $y = -\infty$, on a

$$T(-\infty) = T^{\text{brl}}, \quad (\text{IV.38e})$$

$$Y_k(-\infty) = Y_k^{\text{brl}}, \quad k \in S, \quad (\text{IV.38f})$$

$$\tilde{u}(-\infty) = \sqrt{\rho^{\text{exr}}/\rho^{\text{brl}}}, \quad (\text{IV.38g})$$

$$\Phi(-\infty) = \Phi^{\text{brl}}. \quad (\text{IV.38h})$$

L'origine du repère étant choisie dans le plan d'arrêt, on a aussi

$$\tilde{v}(0) = 0. \quad (\text{IV.38i})$$

Dans cette situation, on a également la relation de compatibilité liant la courbure tangentielle de la pression J et le taux d'étirement $\rho^{\text{exr}} \mathbf{a}^2 = J$. On récapitule toutes ces conditions aux limites ainsi que les équations qui seront implémentées dans le logiciel de résolution dans le tableau TAB. IV.3.

IV.5 Méthode numérique

Dans cette section, on décrit les algorithmes utilisés pour le calcul des flammes laminaires ionisées stationnaires planes et étirées. On s'intéresse notamment à la discrétisation des équations par différences finies, à la résolution des équations discrètes par une méthode de Newton et au calcul des matrices jacobienues. On utilise un logiciel de calculs de flammes 1D que l'on a modifié pour qu'il tienne compte de l'ionisation dans la flamme.

IV.5.1 Equations discrétisées

On a vu dans les deux sections précédentes que les équations des flammes laminaires planes ionisées se réduisent à un problème aux limites posé sur la demi-droite $[\underline{x}, +\infty)$ et que les équations des flammes laminaires étirées ionisées se réduisent à un problème aux limites posé sur la droite $(-\infty, +\infty)$. On tronque tout d'abord le domaine en $[\underline{x}, \bar{x}]$ et on doit alors résoudre un problème aux limites sur $[\underline{x}, \bar{x}]$. Comme les deux problèmes sont mono-dimensionnels, on note également x la variable d'espace pour le problème des flammes étirées stationnaires alors que la variable utilisée dans la mise en équation était y . On peut écrire les deux systèmes symboliquement sous la forme

$$F(X) = 0,$$

où $X : [\underline{x}, \bar{x}] \rightarrow \mathbb{R}^{n^c}$ est la fonction inconnue, $[\underline{x}, \bar{x}]$ le domaine d'étude et n^c le nombre de composantes de la fonction inconnue X . Dans le cas des flammes planes, $n^c = n^s + 3$ avec $X = (c, T, Y_1, \dots, Y_{n^s}, E)$ et dans celui des flammes étirées, $n^c = n^s + 4$ avec $X = (\tilde{u}, \tilde{v}, T, Y_1, \dots, Y_{n^s}, \Phi)$. Pour les flammes planes, on considère que le débit c

est une fonction de x afin de garder une structure bloc-tridiagonale pour la matrice jacobienne.

On discrétise ensuite ce problème. On fixe une grille Ξ définie par

$$\Xi = \{\underline{x} = \xi_1 < \xi_2 < \dots < \xi_M = \overline{x}\},$$

où M désigne le nombre de points de la grille. La discrétisation des équations de conservation est faite à l'aide de différences finies. Après avoir remplacé les opérateurs de dérivation par des opérateurs de différences finies, on doit résoudre un système algébrique d'équations non-linéaires du type

$$\mathbf{F}_\Xi(\mathbf{X}_\Xi) = 0, \quad (\text{IV.39})$$

où $\mathbf{X}_\Xi$ désigne la solution discrétisée sur la grille Ξ et $\mathbf{F}_\Xi$ le système des équations discrétisées.

Pour une solution initiale $\mathbf{X}^0$ qui est suffisamment proche de la solution $\mathbf{X}_\Xi$, le système d'équations discrétisées peut être résolu par la méthode de Newton. On définit une suite $\mathbf{X}^k$, pour $k \in \mathbb{N}$, où $\mathbb{N}$ désigne l'ensemble des entiers naturels, par

$$\mathbf{J}(\mathbf{X}^k)(\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k) = -\mathbf{L}_k \mathbf{F}_\Xi(\mathbf{X}^k), \quad k \in \mathbb{N}, \quad (\text{IV.40})$$

où $\mathbf{J}(\mathbf{X}^k)$ est la matrice Jacobienne de la fonction $\mathbf{F}_\Xi$ au point $\mathbf{X}^k$,

$$\mathbf{J}(\mathbf{X}^k) = \frac{\partial \mathbf{F}_\Xi}{\partial \mathbf{X}}(\mathbf{X}^k),$$

et $\mathbf{L}_k$ désigne le paramètre d'amortissement de la méthode de Newton. Il vérifie $0 < \mathbf{L}_k \leq 1$ et il est calculé selon la méthode de Deuffhard [Deu74]. L'évaluation des matrices Jacobiennes étant coûteuse en temps de calcul, on emploie généralement une méthode de Newton modifiée dont il faut contrôler la vitesse de convergence. Les matrices Jacobiennes sont évaluées par différences finies

$$\mathbf{J}(\mathbf{X})\mathbf{Z} = \frac{\mathbf{F}_\Xi(\mathbf{X} + \delta\mathbf{Z}) - \mathbf{F}_\Xi(\mathbf{X})}{\delta}, \quad (\text{IV.41})$$

en utilisant des vecteurs $\mathbf{Z}$ bien choisis. En effet, il semble que l'on ait besoin de Mn^c vecteurs $\mathbf{Z}$ différents pour obtenir l'intégralité de la matrice Jacobienne. Mais en utilisant sa structure bloc-tridiagonale, on observe que les composantes correspondant à des points de discrétisation i, j tels que $|i - j| > 2$ sont indépendantes. Il est alors possible d'utiliser des vecteurs $\mathbf{Z} = \mathbf{Z}(l_0, n_0)$, indicés par $l_0 \in \{1, \dots, n^c\}$ et $n_0 \in \{1, 2, 3\}$, et dont les seules composantes non nulles $\mathbf{Z}(l_0, n_0)_{(l,n)}$ sont telles que $l = l_0$ et $n \equiv n_0$

mod 3. La matrice Jacobienne est donc obtenue après $3n^c + 1$ évaluations de F_{Ξ} . La fonction F_{Ξ} est d'autre part évaluée en utilisant des bibliothèques de sous-programmes hautement vectorisés pour le calcul des termes de production chimique, des propriétés de transport et des grandeurs thermodynamiques [GD88, EG95, EG96]. Il est plus intéressant d'utiliser des différences finies car de nombreux produits multiples apparaissent dans les termes sources chimiques et les coefficients de transport. On remarque également que lors de l'évaluation des matrices Jacobiennes, il est seulement nécessaire d'évaluer les propriétés aéro-thermochimiques aux points où l'on a perturbé les variables d'état, c'est-à-dire tous les trois points et non pas tous les points de la grille.

La présence de forts gradients, en particulier dans les fronts de flamme rend nécessaire l'utilisation de grilles adaptatives. Pour obtenir des grilles adaptées à la solution, on utilise un algorithme de raffinements successifs [Smo82]. En fin de calcul, la grille Ξ est telle que pour toute composante $l = 1, \dots, n^c$ et pour tout intervalle du type $[\xi_m, \xi_{m+1}]$ pour $m = 1, \dots, M-1$, les inégalités suivantes sont vérifiées

$$\int_{\xi_m}^{\xi_{m+1}} |\partial_x X_l| dx \leq \beta \left(\sup_{\underline{x} \leq x \leq \bar{x}} X_l - \inf_{\underline{x} \leq x \leq \bar{x}} X_l \right), \quad (\text{IV.42})$$

$$\int_{\xi_m}^{\xi_{m+1}} |\partial_x^2 X_l| dx \leq \gamma \left(\sup_{\underline{x} \leq x \leq \bar{x}} \partial_x X_l - \inf_{\underline{x} \leq x \leq \bar{x}} \partial_x X_l \right), \quad (\text{IV.43})$$

où les constantes β et γ sont des nombres plus petits que un.

Un des avantages de la méthode de Newton est sa convergence rapide. Un inconvénient potentiel est que, pour chaque grille considérée, la solution initiale correspondante doit être dans le domaine de convergence de la méthode. Pour diminuer cette sensibilité à la solution initiale, on peut ramener cette dernière dans le domaine de convergence de la méthode par des itérations instationnaires. Une telle méthode s'écrit

$$D \partial_t X + F(X) = 0, \quad (\text{IV.44})$$

où D est une matrice diagonale par blocs, avec des conditions initiales appropriées. Les équations instationnaires utilisées peuvent être les équations exactes présentées dans les sections précédentes ou bien résulter de diverses simplifications des termes instationnaires. Ces équations instationnaires sont alors résolues de façon totalement implicite à cause de la raideur due à la chimie. Le prédicteur est obtenu avec un schéma d'Euler explicite et l'étape de correction correspond à un schéma d'Euler implicite. Le pas de temps est estimé en contrôlant l'estimation d'erreur associé au prédicteur. Plus précisément, on impose que

$$\|X(t) - X(t_i) - (t - t_i) \partial_t X(t_i)\| \simeq \|\frac{1}{2}(t - t_i)^2 \partial_t^2 X(t_i)\| \leq \epsilon, \quad (\text{IV.45})$$

où ϵ est un nombre inférieur à un.

IV.5.2 Bibliothèques de thermochimie et de transport

On a vu que la résolution des équations discrètes non linéaires est effectuée par une méthode de Newton et les matrices Jacobiennes sont évaluées par différences finies.

On doit donc évaluer un grand nombre de fois la fonction F_{Ξ} et donc un grand nombre de fois les propriétés thermochimiques. Par conséquent, il est nécessaire d'évaluer un grand nombre de fois les propriétés thermodynamiques c_p et h_k , $k \in S$, les taux de production chimique ω_k , $k \in S$, et les propriétés de transport λ , D , χ et η en fonction des variables d'état T , p et Y_k , $k \in S$. Il est intéressant de remarquer que cette évaluation des diverses quantités thermochimiques peut être réalisée dans des bibliothèques indépendantes du noyau numérique du code. Les bibliothèques **CHEMKIN I** puis **CHEMKIN II** ont été réalisées à cet effet aux laboratoires SANDIA de Livermore (USA), pour des ordinateurs scalaires [KMJ80, GD88, KRM89]. Les logiciels de calcul de flamme étirée et de flamme plane utilisent une version restructurée et vectorisée de la bibliothèque **CHEMKIN II** pour le calcul de toutes les grandeurs thermochimiques.

En ce qui concerne les propriétés de transport, on utilise la bibliothèque **EGLIB** [EG97] qui est une bibliothèque optimisée et très complète pour l'évaluation des coefficients de transport. Cette bibliothèque fournit diverses approximations pour tous les coefficients de transport [EG94, EG95, EG96, EG97].

IV.5.3 Méthode de continuation

Un paramètre fondamental des flammes laminaires étirées est l'étirement. Or il est plus facile de simuler des flammes étirées dont l'étirement est élevé que celle dont l'étirement est faible. Pour obtenir des flammes avec un faible étirement, on préconise l'utilisation d'une méthode de continuation [GS89].

La solution $\mathbf{X}_{\Xi}$ des équations des flammes étirées (IV.37) et (IV.38) dépend de façon régulière de l'étirement a considéré comme un paramètre. On considère alors l'arc de courbe constitué des solutions $(\mathbf{X}_{\Xi}(a), a)$ en fonction du paramètre a . La méthode de continuation consiste à suivre la courbe solution en utilisant une méthode d'Euler comme prédicteur et une méthode de Newton modifiée comme correcteur [Cha84], avec une reparamétrisation appropriée de la solution [GS89]. Cette reparamétrisation est effectuée à l'aide d'un nouveau paramètre indépendant qui approxime localement

l'arc de courbe de la solution dans l'espace des phases, tandis que le paramètre original devient une valeur propre. La reparamétrisation est introduite sous la forme d'une équation scalaire supplémentaire. Plus spécifiquement, si on considère un système de la forme $F_{\Xi}(X_{\Xi}, \lambda) = 0$, l'arc de solutions $(X_{\Xi}(\lambda), \lambda)$ est reparamétrisé sous la forme $(X_{\Xi}(s), \lambda(s))$, où s est une approximation de l'arc de courbe. Par ailleurs, l'algorithme utilisé est un algorithme de continuation adaptatif, c'est-à-dire qu'il combine un algorithme de continuation et une adaptation de la grille en équidistribuant une fonction poids positive [GS89].

IV.6 Calcul de flammes laminaires d'hydrogène

Dans cette section, on présente les résultats obtenus pour le calcul d'une flamme plane laminaire ionisée d'un mélange air-hydrogène et d'une flamme laminaire étirée d'un mélange air-hydrogène, après avoir donné les différentes données concernant la thermochimie et le transport de telles flammes.

IV.6.1 Données thermochimiques

La recherche de données thermodynamiques est un problème pratique compliqué. En effet, la plupart des données thermodynamiques des ions et notamment des ions carbonnés n'a pas été évaluée expérimentalement et manque dans les bases de données, ce qui nous a empêché de calculer une flamme de méthane. En particulier, les données des ions CH_3^+ , $C_3H_3^+$ et $C_2H_3O^+$ font défaut.

On considère donc une flamme ionisée prémélangée d'hydrogène-air. Les espèces chimiques présentes dans ce mélange sont le diazote N_2 , le dihydrogène H_2 , le dioxygène O_2 , l'hydrogène H , l'oxygène O , l'eau H_2O , l'hydroxyle OH , l'hydroperoxyde HO_2 , le peroxyde d'hydrogène H_2O_2 , l'ion hydronium H_3O^+ et l'électron E . On ne considère donc qu'un seul ion positif dans le mélange. Les données thermodynamiques de ces espèces sont fournies dans le tableau TAB. IV.4 pour des températures $T_{\text{inf}} = 300K$, $T_{\text{mil}} = 1000K$ et $T_{\text{sup}} = 5000K$. Elles permettent de calculer les chaleurs spécifiques molaires à pression constante $C_{p,k}$, $k \in S$, les entropies molaires H_k , $k \in S$, et les entropies standard à la pression atmosphérique S_k^{atm} , $k \in S$, en utilisant les expressions (IV.3).

	N_2	H_2	O_2	H	O	H_2O
a_{1k}	0.02926640E+02	0.02991423E+02	0.03697578E+02	0.02500000E+02	0.02542059E+02	0.02672145E+02
a_{2k}	0.14879768E-02	0.07000644E-02	0.06135197E-02	0.00000000E+00	-0.02755061E-03	0.03056293E-01
a_{3k}	-0.05684760E-05	-0.05633828E-06	-0.12588420E-06	0.00000000E+00	-0.03102803E-07	-0.08730260E-05
a_{4k}	0.10097038E-09	-0.09231578E-10	0.01775281E-09	0.00000000E+00	0.04551067E-10	0.12009964E-09
a_{5k}	-0.06753351E-13	0.15827519E-14	-0.11364354E-14	0.00000000E+00	-0.04368051E-14	-0.06391618E-13
a_{6k}	-0.09227977E+04	-0.08350340E+04	-0.12339301E+04	0.02547162E+06	0.02923080E+06	-0.02989921E+06
a_{7k}	0.05980528E+02	-0.13551101E+01	0.03189165E+02	-0.04601176E+01	0.04920308E+02	0.06862817E+02
a'_{1k}	0.03298677E+02	0.03298124E+02	0.03212936E+02	0.02500000E+02	0.02946428E+02	0.03386842E+02
a'_{2k}	0.14082404E-02	0.08249441E-02	0.11274864E-02	0.00000000E+00	-0.16381665E-02	0.03474982E-01
a'_{3k}	-0.03963222E-04	-0.08143015E-05	-0.05756150E-05	0.00000000E+00	0.02421031E-04	-0.06354696E-04
a'_{4k}	0.05641515E-07	-0.09475434E-09	0.13138773E-08	0.00000000E+00	-0.16028431E-08	0.06968581E-07
a'_{5k}	-0.02444854E-10	0.04134872E-11	-0.08768554E-11	0.00000000E+00	0.03890696E-11	-0.02506588E-10
a'_{6k}	-0.10208999E+04	-0.10125209E+04	-0.10052490E+04	0.02547162E+06	0.02914764E+06	-0.03020811E+06
a'_{7k}	0.03950372E+02	-0.03294094E+02	0.06034737E+02	-0.04601176E+01	0.02963995E+02	0.02590232E+02
	OH	HO_2	H_2O_2	H_3O^+	E	
a_{1k}	0.02882730E+02	0.04072191E+02	0.04573167E+02	0.24964777E+01	0.02500000E+02	
a_{2k}	0.10139743E-02	0.02131296E-01	0.04336136E-01	0.57284481E-02	0.00000000E+00	
a_{3k}	-0.02276877E-05	-0.05308145E-05	-0.14746888E-05	-0.18395322E-05	0.00000000E+00	
a_{4k}	0.02174683E-09	0.06112269E-09	0.02348903E-08	0.27357729E-09	0.00000000E+00	
a_{5k}	-0.05126305E-14	-0.02841164E-13	-0.14316536E-13	-0.15409386E-13	0.00000000E+00	
a_{6k}	0.03886888E+05	-0.15797270E+03	-0.01800696E+06	0.70972911E+05	-0.07453749E+04	
a_{7k}	0.05595712E+02	0.03476029E+02	0.05011369E+01	0.74585048E+01	-0.11734026E+02	
a'_{1k}	0.03637266E+02	0.02979963E+02	0.03388753E+02	0.37929561E+01	0.02500000E+02	
a'_{2k}	0.01850910E-02	0.04996697E-01	0.06569226E-01	-0.91087830E-03	0.00000000E+00	
a'_{3k}	-0.16761646E-05	-0.03790997E-04	-0.14850125E-06	0.11636414E-04	0.00000000E+00	
a'_{4k}	0.02387202E-07	0.02354192E-07	-0.04625805E-07	-0.12136548E-07	0.00000000E+00	
a'_{5k}	-0.08431442E-11	-0.08089024E-11	0.02471514E-10	0.42616180E-11	0.00000000E+00	
a'_{6k}	0.03606781E+05	0.01762273E+04	-0.01766314E+06	0.70751240E+05	-0.07453750E+04	
a'_{7k}	0.13588605E+01	0.09222724E+02	0.06785363E+02	0.14715543E+01	-0.11734026E+02	

TAB. IV.4 – Données thermodynamiques. Les unités utilisées sont la mole, le Kelvin et la calorie par mole.

On considère 20 réactions chimiques entre ces espèces, ces réactions étant listées dans le tableau TAB. IV.5. On a également indiqué dans ce tableau les constantes permettant de calculer les taux de réactions chimiques des différentes réactions selon la loi d'Arrhénius généralisée (IV.6). On remarque que les 19 premières réactions sont les réactions chimiques usuelles ayant lieu dans une flamme d'hydrogène non ionisée et ne mettent pas en jeu l'ion hydronium H_3O^+ et l'électron E . L'ionisation de la flamme se fait au travers de la dernière réaction entre l'eau H_2O et l'hydrogène H pour produire l'ion hydronium H_3O^+ et l'électron E .

Réactions	A_r	b_r	E_r
1. $H_2 + O_2 \rightleftharpoons 2OH$	$1.70E+13$	0.000	47780.0
2. $H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	$1.17E+09$	1.300	3626.0
3. $H + O_2 \rightleftharpoons OH + O$	$2.00E+14$	0.000	16800.0
4. $O + H_2 \rightleftharpoons OH + H$	$1.80E+10$	1.000	8826.0
5. $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M^a$	$2.10E+18$	-1.000	0.0
6. $H + O_2 + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + O_2$	$6.70E+19$	-1.420	0.0
7. $H + O_2 + N_2 \rightleftharpoons HO_2 + N_2$	$6.70E+19$	-1.420	0.0
8. $OH + HO_2 \rightleftharpoons H_2O + O_2$	$5.00E+13$	0.000	1000.0
9. $H + HO_2 \rightleftharpoons 2OH$	$2.50E+14$	0.000	1900.0
10. $O + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + OH$	$4.80E+13$	0.000	1000.0
11. $2OH \rightleftharpoons O + H_2O$	$6.00E+08$	1.300	0.0
12. $H_2 + M \rightleftharpoons H + H + M^b$	$2.23E+12$	0.500	92600.0
13. $O_2 + M \rightleftharpoons 2O + M$	$1.85E+11$	0.500	95560.0
14. $H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M^c$	$7.50E+23$	-2.600	0.0
15. $H + HO_2 \rightleftharpoons H_2 + O_2$	$2.50E+13$	0.000	700.0
16. $HO_2 + HO_2 \rightleftharpoons H_2O_2 + O_2$	$2.00E+12$	0.000	0.0
17. $H_2O_2 + M \rightleftharpoons OH + OH + M$	$1.30E+17$	0.000	45500.0
18. $H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	$1.60E+12$	0.000	3800.0
19. $H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	$1.00E+13$	0.000	1800.0
20. $H_3O^+ + E \rightleftharpoons H_2O + H$	$2.29E+19$	-0.500	0.0

^a $g_5(H_2O) = 21$, $g_5(H_2) = 3.3$, $g_5(O_2) = g_5(N_2) = 0.0$.

^b $g_{12}(H_2O) = 6$, $g_{12}(H_2) = 3$, $g_{12}(H) = 2$.

^c $g_{12}(H_2O) = 20$.

TAB. IV.5 – Taux de production chimique d'une flamme hydrogène-air. Les unités utilisées sont la mole, le centimètre-cube, la seconde, le Kelvin et la calorie par mole.

Il est également difficile d'obtenir les cinétiques des réactions d'ionisation. En effet, les données sont rares et parfois peu précises car les expériences permettant de les évaluer n'ont pas été faites un grand nombre de fois. En particulier, la cinétique de la réaction 20, utilisée dans de nombreux calculs de flamme [PB93, EB88], semble

erronée car la constante de réaction obtenue est beaucoup trop faible. La réaction d'ionisation est alors très lente et en pratique les ions n'apparaissent que très loin du front de flamme. On a donc multipliée par 10 le facteur A_r pour que la réaction soit plus rapide.

IV.6.2 Données de transport

On présente dans le tableau TAB. IV.6 les paramètres moléculaires utilisés dans le logiciel de résolution pour évaluer numériquement les coefficients de transport. Ces paramètres sont ϵ_k la profondeur du potentiel de Lennard-Jones, σ_k le diamètre de collision, μ_k le moment dipolaire des molécules polarisées, α_k la polarisabilité des molécules non polarisées et $\xi_k^{\text{int}}(298K)$ le nombre de collisions associées à la relaxation de l'énergie interne.

Espèces	$\epsilon_k/k_B[K]$	$\sigma_k[nm]$	$\mu_k[Debye]$	$10^{24}\alpha_k[cm^3]$	$\xi_k^{\text{int}}(298K)$
N_2	97.530	3.621	0.000	1.760	4.000
H_2	38.000	2.920	0.000	0.790	280.000
O_2	107.400	3.458	0.000	1.600	3.800
H	145.000	2.050	0.000	0.000	0.000
O	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000
H_2O	572.400	2.605	1.844	0.000	4.000
OH	80.000	2.750	0.000	0.000	0.000
HO_2	107.400	3.458	0.000	0.000	1.000
H_2O_2	107.400	3.458	0.000	0.000	3.800
H_3O^+	572.400	2.605	1.844	0.000	4.000
E	850.	1.00	0.000	0.000	1.000

TAB. IV.6 – Paramètres moléculaires des espèces

La section de collision de l'électron n'est pas strictement correcte au sens où l'on a pris volontairement une section faible pour accélérer la diffusion de l'électron. Sa valeur peut être calculée [PB93] mais cette approximation n'a pas d'influence étant donnée l'imprécision des données thermochimiques pour les espèces ionisées.

IV.6.3 Calcul d'une flamme plane laminaire

On présente dans cette section les résultats numériques du calcul d'une flamme plane laminaire ionisée d'un mélange hydrogène-air à pression atmosphérique $p_u = 1atm$.

On a effectué le calcul sur un domaine $[\underline{x}, \bar{x}] = [-10, 140]$ exprimé en centimètres et on a choisi $x_f = 0$ pour fixer le front de la flamme autour de l'origine. Les solutions présentées sont convergées au sens où elles vérifient les équations différentielles à la précision souhaitée et la grille est adaptée à la solution. Les pics ou les ruptures de pentes ne sont dus qu'à l'échelle des graphiques et un zoom permettrait de voir des courbes régulières.

En ce qui concerne les conditions aux limites, on a fixé la température interne du mélange à l'origine $T(x_f) = T_f = 400K$, la température au brûleur $T(\underline{x}) = T^{\text{brl}} = 300K$, le champ électrique au brûleur $E(\underline{x}) = E^{\text{brl}} = 0 \text{ g.cm.s}^{-2}.C^{-1}$ et la fraction molaire de chaque espèce au brûleur $X_k(\underline{x}) = X_k^{\text{brl}}$, $k \in S$, avec

$$\begin{aligned} X_{N_2}^{\text{brl}} &= 0.5564, & X_{O_2}^{\text{brl}} &= 0.1479, & X_{H_2}^{\text{brl}} &= 0.2957, \\ X_{H_2O}^{\text{brl}} &= X_H^{\text{brl}} = X_{OH}^{\text{brl}} = X_O^{\text{brl}} = X_{H_2O_2}^{\text{brl}} = X_{HO_2}^{\text{brl}} = X_{H_3O^+}^{\text{brl}} = X_E^{\text{brl}} &= 0.0000. \end{aligned}$$

En définissant la richesse du mélange ϕ par

$$\phi = \frac{X_{H_2}/X_{O_2}}{X_{H_2}^{\text{sto}}/X_{O_2}^{\text{sto}}},$$

où $X_{H_2}^{\text{sto}}$ et $X_{O_2}^{\text{sto}}$ désigne les fractions molaires stœchiométriques, on obtient donc une richesse $\phi = 1$, ce qui correspond à un mélange stœchiométrique.

On a tracé la température T en fonction de l'abscisse x à la figure FIG. IV.5. On

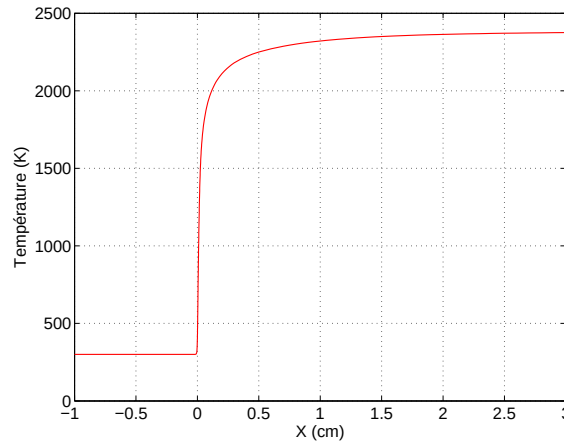


FIG. IV.5 – Température dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimée en Kelvin.

observe que le front de flamme se situe bien autour de l'origine sur une distance de

l'ordre du millimètre. La température maximale obtenue dans les gaz brûlés est de 2381 K .

On a ensuite tracé à la figure FIG. IV.6 la vitesse normale du mélange gazeux u et à la figure FIG. IV.7 la masse volumique ρ . Ces deux quantités sont reliées par la

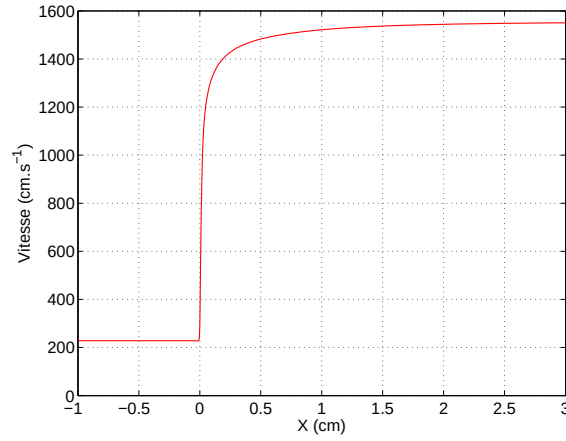


FIG. IV.6 – Vitesse normale dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimée en cm.s^{-1} .

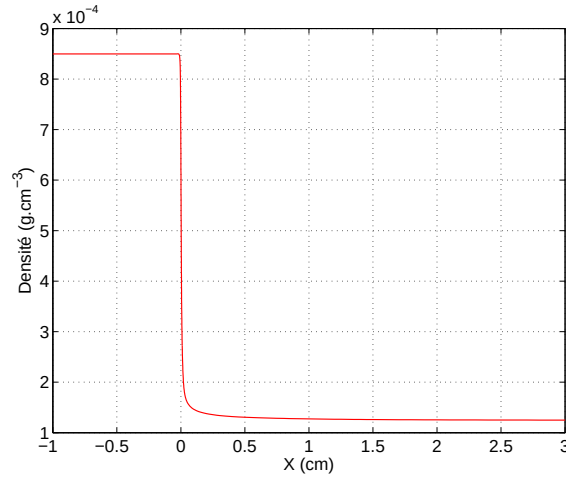


FIG. IV.7 – Masse volumique dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimée en g.cm^{-3} .

relation $\rho u = c$, où c est le débit massique par unité de surface, constant dans le mélange. On obtient numériquement un débit massique $c = 0.193688\text{ g.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ et

une vitesse d'admission $u_{\text{ad}} = 227.956 \text{ cm.s}^{-1}$, cette valeur assez faible étant due à l'effet Soret [EG96, EG99].

Aux figures FIG. IV.8 et FIG. IV.9, on a illustré les profils des espèces majoritaires et des radicaux en fonction de l'abscisse. On a tracé les profils sur un domaine étendu

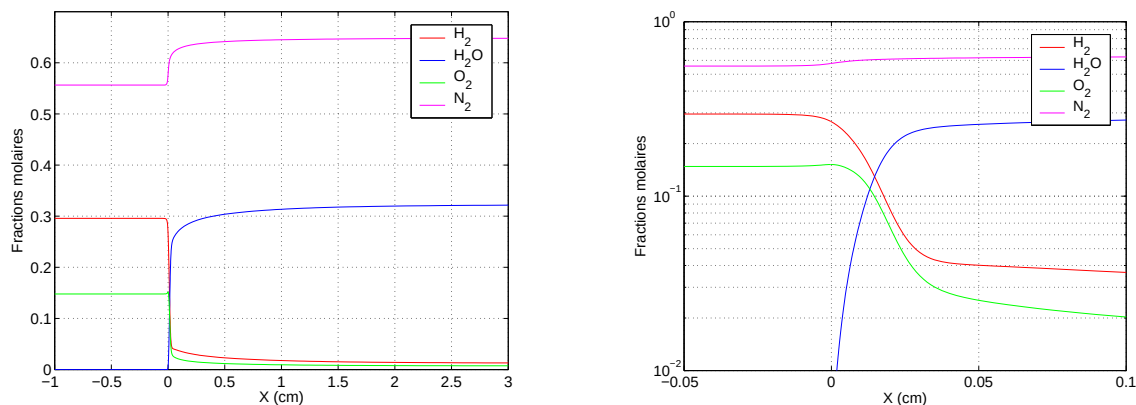


FIG. IV.8 – Fractions molaires des espèces majoritaires dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air.

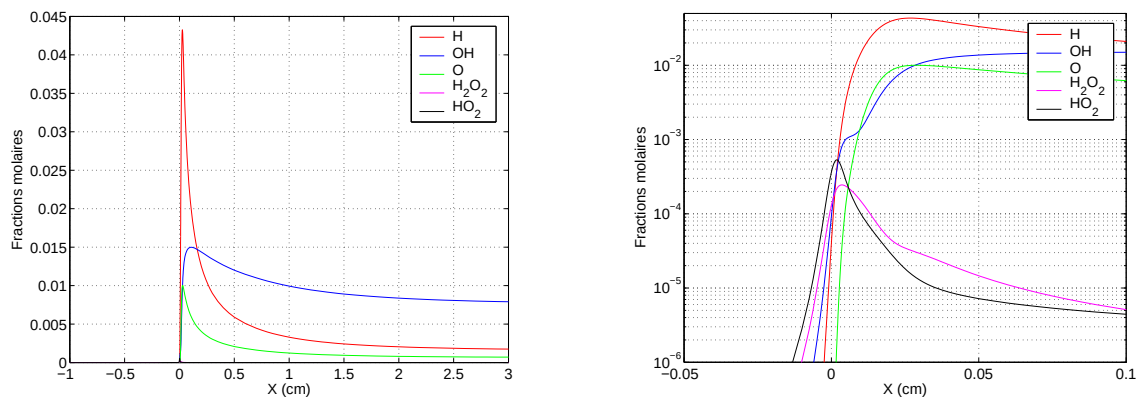


FIG. IV.9 – Fractions molaires des radicaux dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air.

$[-1, 3]$ pour donner l'allure générale et sur un domaine plus restreint $[-0.05, 0.1]$ en échelle logarithmique pour détailler le front de flamme. On observe que le maximum des profils des radicaux H_2O_2 et HO_2 se situent juste avant le front de flamme, comme dans le cas des flammes planes d'hydrogène non ionisées. D'un point de vue

plus général, l'ionisation ne change pas l'allure des profils des espèces majoritaires ni de ceux des radicaux.

A la figure FIG. IV.10, on a représenté les fractions molaires des électrons E et des ions hydronium H_3O^+ . Aux figures FIG. IV.10(a) et FIG. IV.10(b), on a tracé l'allure

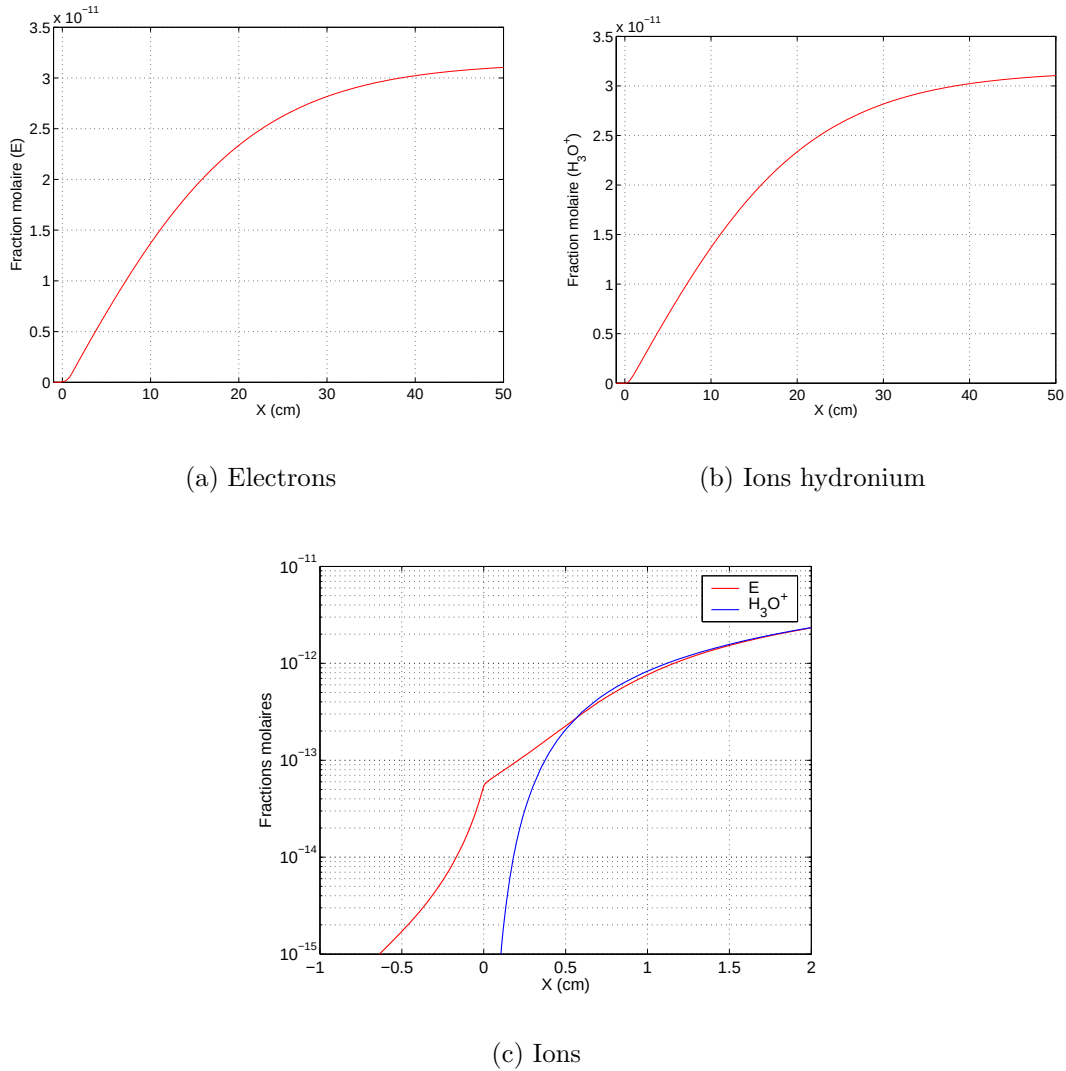


FIG. IV.10 – Fractions molaires des électrons et des ions hydronium dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air.

générale des profils des électrons et des ions hydronium sur le domaine $[-1, 50]$. Comme la réaction 20 du tableau TAB. IV.5 est la seule réaction du mécanisme

réactionnel considéré qui produit des ions et des électrons et qu'elle les produit dans le même rapport stœchiométrique, on observe que les deux courbes correspondant à la fraction molaire des électrons et celle des ions hydronium sont pratiquement identiques à cette échelle. On remarque ensuite que cette réaction est beaucoup plus lente que les autres réactions chimiques entre les espèces neutres. En effet, la réaction ne débute que dans la partie chaude du mélange, après le front de flamme, et il faut une certaine distance pour qu'elle se stabilise. C'est pour cette raison que l'on a dû effectuer les calculs sur un domaine aussi vaste $[-10, 140]$, alors que le domaine $[-1, 3]$ est amplement suffisant pour calculer une flamme d'hydrogène non ionisée. Ainsi, cette réaction reste lente même après avoir multiplié par un facteur 10 la constante de la réaction d'ionisation, ce qui nous incite à mettre en doute la seule mesure expérimentale de la littérature. A la figure FIG. IV.10(c), on a tracé sur un même graphique les profils des électrons et des ions hydronium sur le domaine $[-1, 2]$ en échelle logarithmique. Les courbes ne sont plus superposables à cette échelle et on observe que les électrons diffusent davantage que les ions, ce qui se traduit par une densité plus importante des électrons en avant du front de flamme.

On a ensuite tracé à la figure FIG. IV.11 la charge volumique q exprimé en $C.cm^{-3}$ et à la figure FIG. IV.12 le champ électrique E exprimé en $g.cm.s^{-2}C^{-1} = 10^{-7}V.cm^{-1}$, en fonction de l'abscisse. Ces deux quantités sont reliées par l'équation de Poisson

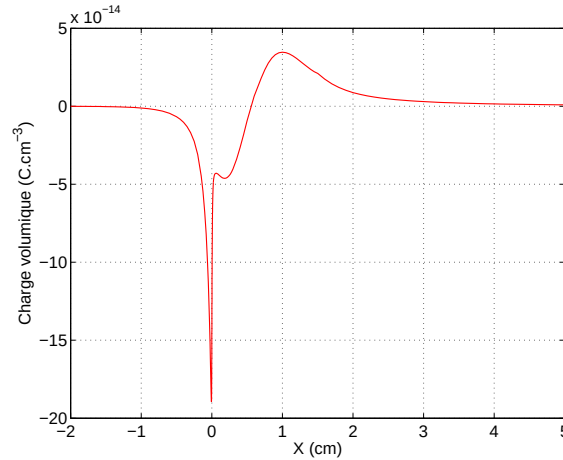


FIG. IV.11 – Charge volumique dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimé en $C.cm^{-3}$.

$d_x E = q/\epsilon_0$. On observe que la charge q est nulle en $+\infty$. Cela traduit thermodynamiquement l'équilibre de la production de charge par la seule réaction d'ionisation du mélange, et de plus, la nullité de la densité de courant de conduction à l'infini

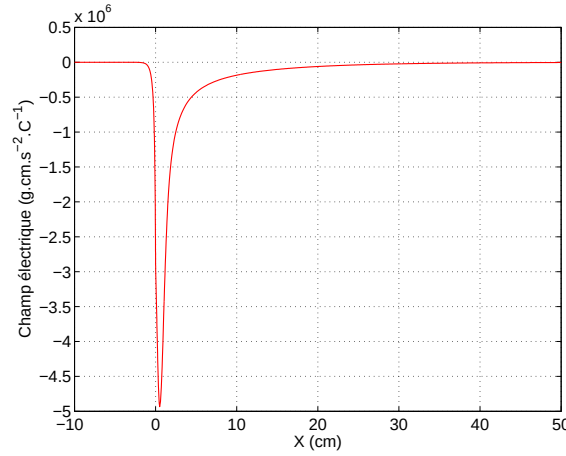


FIG. IV.12 – Champ électrique dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimé en $g.cm.s^{-2}.C^{-1} = 10^{-7}V.cm^{-1}$

en intégrant l'équation de la charge. En ce qui concerne le champ électrique $\mathbf{E}$ à l'infini, il converge vers une constante non nulle $-307 g.cm.s^{-2}.C^{-1}$. Cela implique que le potentiel électrique vaut $-\infty$ à l'infini, ce qui impose d'utiliser le champ électrique plutôt que le potentiel électrique. Il apparaît également qu'il y a une légère séparation de charges autour du front de flamme. En avant du front, la charge volumique est négative, ce qui est dû à un excès d'électrons et en arrière du front, elle est positive. On observe donc un champ électrique localisé autour du front de flamme engendré par cette délocalisation des électrons. Or ce champ électrique a une influence sur les espèces chargées, cette influence se manifestant dans les forces de diffusion des espèces. L'effet global de la force électrique est de freiner la diffusion des électrons et de les ramener dans le front de flamme. La figure FIG. IV.13 représente les fractions molaires des espèces chargées lorsque l'on tient compte ou non de la force électrique dans les forces de diffusion. On observe effectivement que lorsque l'on néglige la force électrique, les électrons diffusent davantage et la séparation des charges est beaucoup plus importante. Il y a également un effet sur le profil des ions hydronium, bien qu'ils soient plus lourds que les électrons. Sur les graphiques présentés, on voit que les profils des électrons et des ions sont confondus lorsque l'on tient compte de la force électrique tandis qu'ils sont nettement disjoints lorsque l'on n'en tient pas compte.

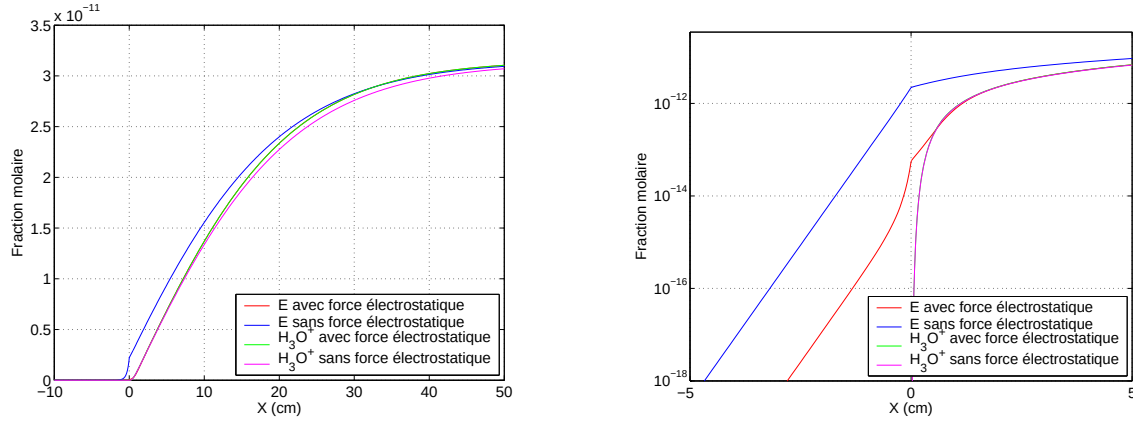


FIG. IV.13 – Effet du champ électrique sur les fractions molaires des ions et des ions hydronium dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air.

IV.6.4 Calcul d'une flamme laminaire étirée ($a = 2000s^{-1}$)

On présente dans cette section les résultats numériques du calcul d'une flamme laminaire étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air à pression atmosphérique $p_u = 1atm$ avec un étirement $a = 2000s^{-1}$. On a effectué le calcul sur un domaine $[\underline{x}, \bar{x}] = [-3, 3]$ exprimé en centimètres.

En ce qui concerne les conditions aux limites, on a fixé la température interne du mélange au brûleur $T(\underline{x}) = T^{brl} = 300K$, la température à l'extérieur $T(\bar{x}) = T^{exr} = 300K$, le potentiel électrique au brûleur $\Phi(\underline{x}) = \Phi^{brl} = 0g.cm^2.s^{-2}.C^{-1}$, le potentiel électrique à l'extérieur $\Phi(\bar{x}) = \Phi^{exr} = 0g.cm^2.s^{-2}.C^{-1}$, la fraction molaire de chaque espèce au brûleur $X_k(\underline{x}) = X_k^{brl}$, $k \in S$, et la fraction molaire de chaque espèce à l'extérieur $X_k(\bar{x}) = X_k^{exr}$, $k \in S$, avec

$$\begin{aligned} X_{N_2}^{brl} &= 0.560, & X_{O_2}^{brl} &= 0.140, & X_{H_2}^{brl} &= 0.300, \\ X_{H_2O}^{brl} &= X_H^{brl} = X_{OH}^{brl} = X_O^{brl} = X_{H_2O_2}^{brl} = X_{HO_2}^{brl} = X_{H_3O+}^{brl} = X_E^{brl} &= 0.0000, \\ X_{N_2}^{exr} &= 0.560, & X_{O_2}^{exr} &= 0.140, & X_{H_2}^{exr} &= 0.300, \\ X_{H_2O}^{exr} &= X_H^{exr} = X_{OH}^{exr} = X_O^{exr} = X_{H_2O_2}^{exr} = X_{HO_2}^{exr} = X_{H_3O+}^{exr} = X_E^{exr} &= 0.0000. \end{aligned}$$

On a pris des conditions symétriques de façon à simuler une flamme correspondant au dispositif de la figure FIG. IV.3.

On a tracé la température T en fonction de l'abscisse x à la figure FIG. IV.14. On observe que le front de flamme se situe à une abscisse de $3,5mm$ sur une distance

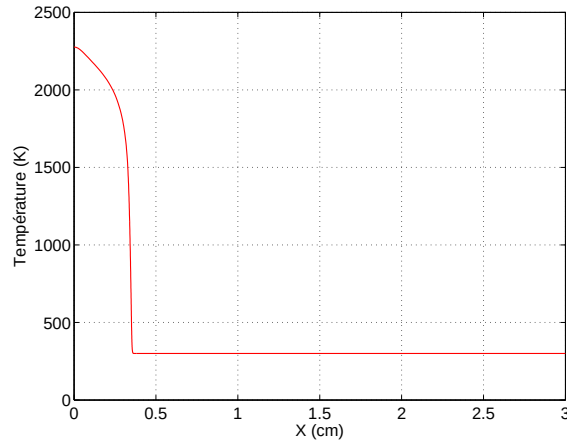
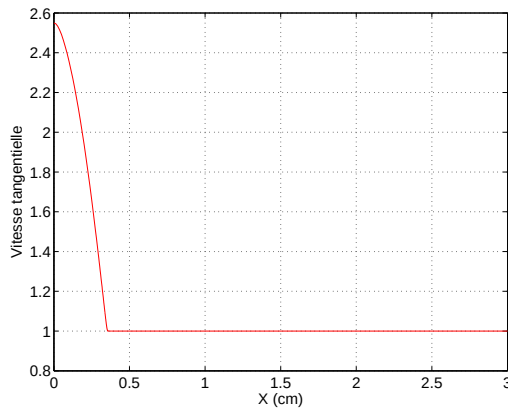


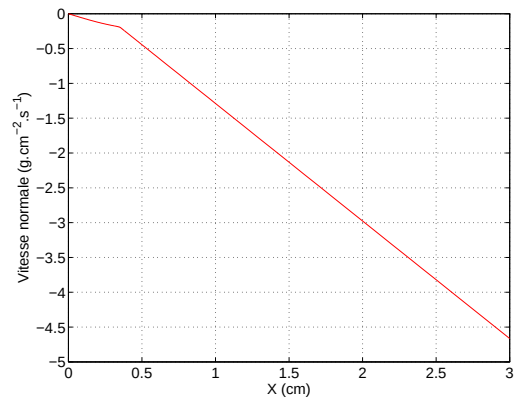
FIG. IV.14 – Température dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimée en Kelvin.

de l'ordre du millimètre. La température maximale obtenue dans les gaz brûlés est de 2276 K .

On a ensuite tracé à la figure FIG. IV.15 la vitesse tangentielle réduite du mélange gazeux $\tilde{u}$ et la vitesse normale réduite $\tilde{v}$. La vitesse tangentielle réduite $\tilde{u}$ est



(a) Vitesse tangentielle



(b) Vitesse normale

FIG. IV.15 – Vitesses réduites tangentielles et normales dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

constante égale à 1 à l'extérieur de la flamme et elle augmente dans la flamme pour

atteindre 2.55 à l'origine. En ce qui concerne la vitesse normale réduite $\tilde{v}$, elle est nulle à l'origine comme l'impose les conditions aux limites et son gradient est plus élevé en valeur absolue à l'extérieur de la flamme qu'à l'intérieur.

Aux figures FIG. IV.16 et FIG. IV.17, on a illustré les profils des espèces majoritaires et des radicaux en fonction de l'abscisse. On a tracé les profils sur le domaine

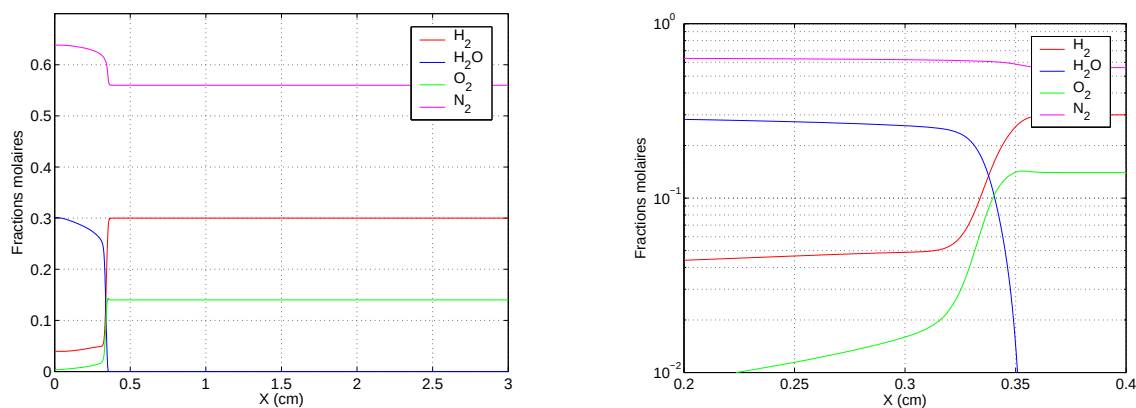


FIG. IV.16 – Fractions molaires des espèces majoritaires dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

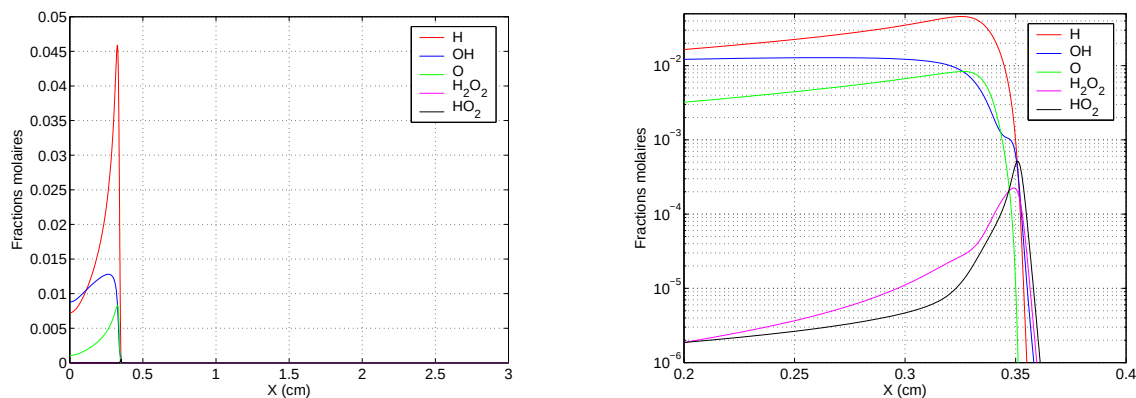


FIG. IV.17 – Fractions molaires des radicaux dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

complet de calcul $[0, 3]$ pour donner l'allure générale et sur un domaine plus restreint $[0.2, 0.4]$ en échelle logarithmique pour détailler le front de flamme. On observe que le maximum des profils des radicaux H_2O_2 et HO_2 se situent juste avant le front de flamme, comme dans le cas des flammes étirées d'hydrogène non ionisées. D'un

point de vue plus général, l'ionisation ne change pas l'allure des profils des espèces majoritaires ni de ceux des radicaux.

A la figure FIG. IV.18, on a représenté les fractions molaires des électrons E et des ions hydronium H_3O^+ . Sur le premier graphique, on a tracé l'allure générale des

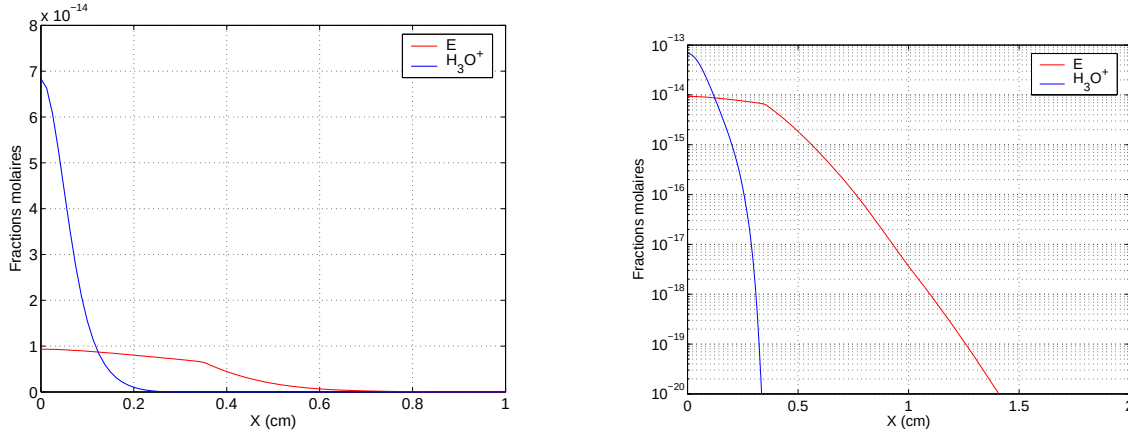


FIG. IV.18 – Fractions molaires des électrons et des ions hydronium dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

profils des électrons et des ions hydronium sur le domaine $[0, 3]$, et sur le second graphique, on a utilisé une échelle logarithmique. La seule réaction qui crée des ions hydronium et des électrons est la réaction 20 du mécanisme réactionnel considéré TAB. IV.5. Cette réaction est lente par rapport aux autres réactions et la largeur de la flamme que l'on obtient n'est pas suffisante pour que la réaction soit stabilisée, on observe en effet un pic des ions H_3O^+ . Si la réaction était stabilisée, on observerait un profil plus plat dans la flamme. On remarque également que les électrons diffusent largement dans toute la flamme, c'est à dire entre les abscisses 0 mm et $3,5\text{ mm}$, ainsi qu'en dehors de la flamme, pour des abscisses supérieures à $3,5\text{ mm}$.

On a ensuite tracé à la figure FIG. IV.19 la charge volumique q exprimé en $C.cm^{-3}$ et à la figure FIG. IV.20 le potentiel électrique Φ exprimé en $g.cm^2.s^{-2}C^{-1} = 10^{-7}V$, en fonction de l'abscisse. Ces deux quantités sont reliées par l'équation de Poisson $d_x^2\Phi = -q/\epsilon_0$. On observe à nouveau une délocalisation de la charge dans la flamme, les électrons ayant davantage diffusé que les ions, la charge est négative en dehors de la flamme et positive à l'intérieur.

On remarque pour conclure que la flamme d'hydrogène ionisée avec un étirement $a = 2000s^{-1}$ ne permet pas à la réaction d'ionisation d'atteindre l'équilibre partiel, les espèces ne restant pas assez de temps dans la partie chaude.

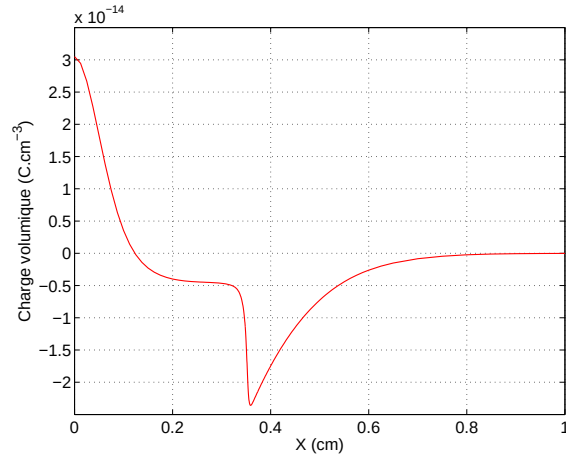


FIG. IV.19 – Charge volumique dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimé en $C.cm^{-3}$.

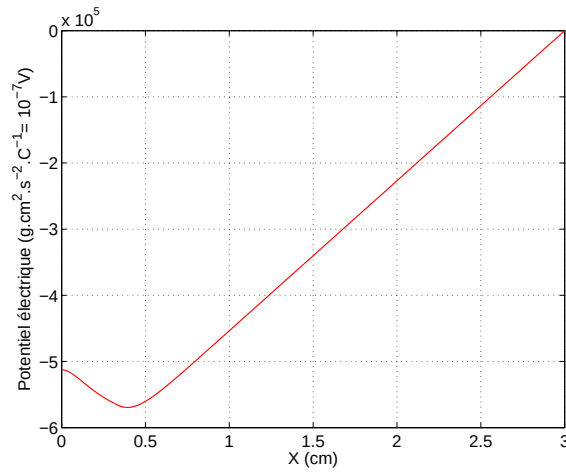


FIG. IV.20 – Potentiel électrique dans une flamme plane ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimé en $g.cm^2.s^{-2}.C^{-1} = 10^{-7}V$

IV.6.5 Calcul d'une flamme laminaire étirée ($a = 400s^{-1}$)

On présente dans cette section les résultats numériques du calcul d'une flamme laminaire étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air à pression atmosphérique $p_u = 1atm$ avec un étirement $a = 400s^{-1}$. On a effectué le calcul sur un domaine $[\underline{x}, \bar{x}] = [-3, 3]$ exprimé en centimètres.

En ce qui concerne les conditions aux limites, on a fixé la température interne du mélange au brûleur $T(\underline{x}) = T^{\text{brl}} = 300K$, la température à l'extérieur $T(\overline{x}) = T^{\text{exr}} = 300K$, le potentiel électrique au brûleur $\Phi(\underline{x}) = \Phi^{\text{brl}} = 0 \text{ g.cm}^2.\text{s}^{-2}.\text{C}^{-1}$, le potentiel électrique à l'extérieur $\Phi(\overline{x}) = \Phi^{\text{exr}} = 0 \text{ g.cm}^2.\text{s}^{-2}.\text{C}^{-1}$, la fraction molaire de chaque espèce au brûleur $X_k(\underline{x}) = X_k^{\text{brl}}$, $k \in \text{S}$, et la fraction molaire de chaque espèce à l'extérieur $X_k(\overline{x}) = X_k^{\text{exr}}$, $k \in \text{S}$, avec

$$\begin{aligned} X_{N_2}^{\text{brl}} &= 0.560, & X_{O_2}^{\text{brl}} &= 0.140, & X_{H_2}^{\text{brl}} &= 0.300, \\ X_{H_2O}^{\text{brl}} &= X_H^{\text{brl}} = X_{OH}^{\text{brl}} = X_O^{\text{brl}} = X_{H_2O_2}^{\text{brl}} = X_{HO_2}^{\text{brl}} = X_{H_3O+}^{\text{brl}} = X_E^{\text{brl}} &= 0.0000, \\ X_{N_2}^{\text{exr}} &= 0.560, & X_{O_2}^{\text{exr}} &= 0.140, & X_{H_2}^{\text{exr}} &= 0.300, \\ X_{H_2O}^{\text{exr}} &= X_H^{\text{exr}} = X_{OH}^{\text{exr}} = X_O^{\text{exr}} = X_{H_2O_2}^{\text{exr}} = X_{HO_2}^{\text{exr}} = X_{H_3O+}^{\text{exr}} = X_E^{\text{exr}} &= 0.0000. \end{aligned}$$

On a pris des conditions symétriques de façon à simuler une flamme correspondant au dispositif de la figure FIG. IV.3.

On a tracé la température T en fonction de l'abscisse x à la figure FIG. IV.21. On

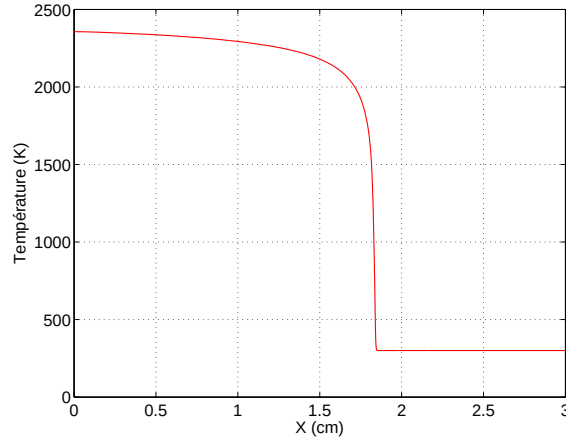


FIG. IV.21 – Température dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimée en Kelvin.

observe que le front de flamme se situe à une abscisse de 1.84 cm sur une distance de l'ordre du millimètre. La température maximale obtenue dans les gaz brûlés est de 2356 K .

On a ensuite tracé à la figure FIG. IV.22 la vitesse tangentielle réduite du mélange gazeux $\tilde{u}$ et la vitesse normale réduite $\tilde{v}$. La vitesse tangentielle réduite $\tilde{u}$ est constante égale à 1 à l'extérieur de la flamme et elle augmente dans la flamme pour atteindre 2.60 à l'origine. En ce qui concerne la vitesse normale réduite $\tilde{v}$, elle est

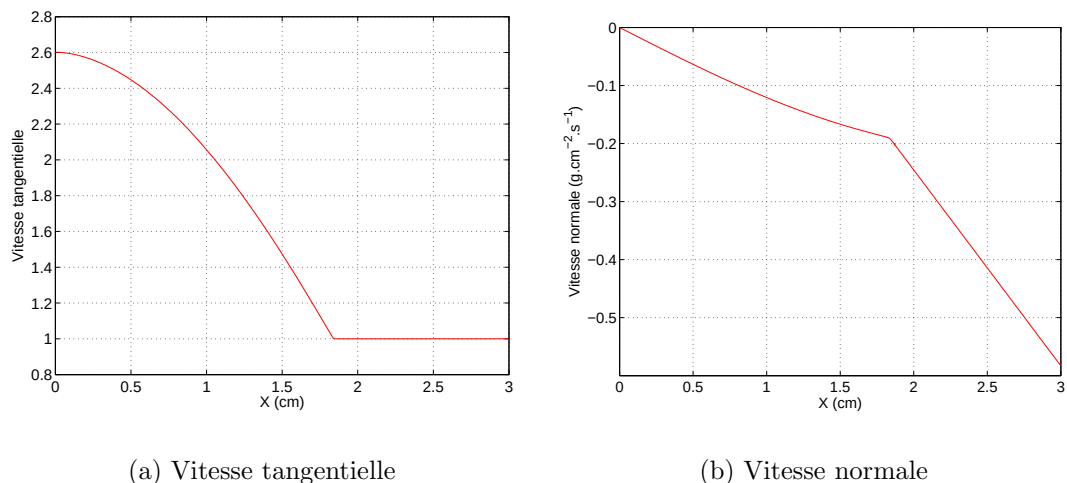


FIG. IV.22 – Vitesses réduites tangentielle et normale dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

nulle à l'origine comme l'impose les conditions aux limites et son gradient est plus élevé en valeur absolue à l'extérieur de la flamme qu'à l'intérieur.

Aux figures FIG. IV.23 et FIG. IV.24, on a illustré les profils des espèces majoritaires et des radicaux en fonction de l'abscisse. On a tracé les profils sur le domaine

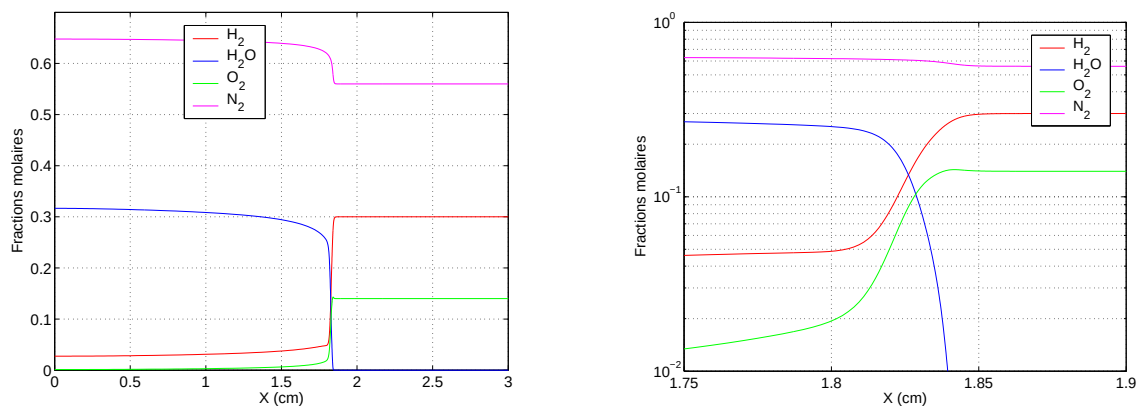


FIG. IV.23 – Fractions molaires des espèces majoritaires dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

complet de calcul $[0, 3]$ pour donner l'allure générale et sur un domaine plus restreint $[1.75, 1.9]$ en échelle logarithmique pour détailler le front de flamme. On observe que

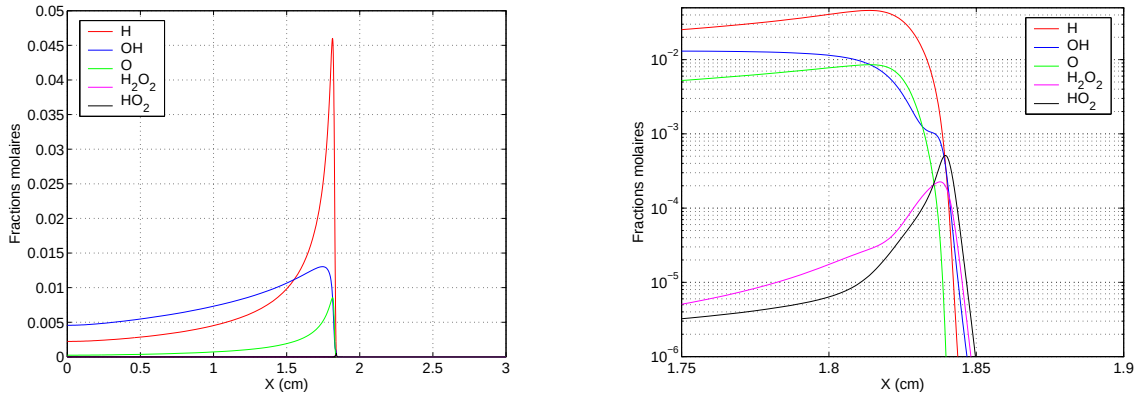


FIG. IV.24 – Fractions molaires des radicaux dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

le maximum des profils des radicaux H_2O_2 et HO_2 se situent juste avant le front de flamme, comme dans le cas des flammes étirées d'hydrogène non ionisées. D'un point de vue plus général, l'ionisation ne change pas l'allure des profils des espèces majoritaires ni de ceux des radicaux.

A la figure FIG. IV.25, on a représenté les fractions molaires des électrons E et des ions hydronium H_3O^+ . Sur le premier graphique, on a tracé l'allure générale des

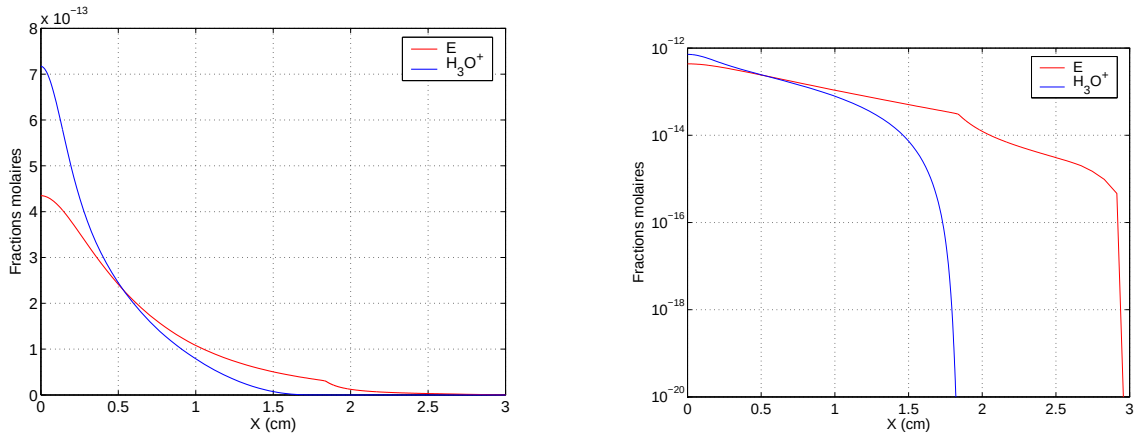


FIG. IV.25 – Fractions molaires des électrons et des ions hydronium dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air.

profils des électrons et des ions hydronium sur le domaine $[0, 3]$, et sur le second graphique, on a utilisé une échelle logarithmique. La seule réaction qui crée des ions hydronium et des électrons est la réaction 20 du mécanisme réactionnel considéré

TAB. IV.5. Cette réaction est lente par rapport aux autres réactions et la largeur de la flamme que l'on obtient n'est pas suffisante pour que la réaction soit à l'équilibre thermodynamique, on observe en effet un pic des ions H_3O^+ . Si la réaction était à l'équilibre, on observerait un profil plus plat dans la flamme. On remarque également que les électrons diffusent largement dans toute la flamme, c'est à dire entre les abscisses 0 mm et $1,84\text{ cm}$, ainsi qu'en dehors de la flamme, pour des abscisses supérieures à $1,84\text{ cm}$. Malgré tout, la largeur de la flamme étant nettement plus grande que dans le cas où l'étirement vaut $a = 2000\text{ s}^{-1}$, l'ionisation est plus importante.

On a ensuite tracé à la figure FIG. IV.26 la charge volumique q exprimé en $C.cm^{-3}$ et à la figure FIG. IV.27 le potentiel électrique Φ exprimé en $g.cm^2.s^{-2}C^{-1} = 10^{-7}V$, en fonction de l'abscisse. Ces deux quantités sont reliées par l'équation de Poisson

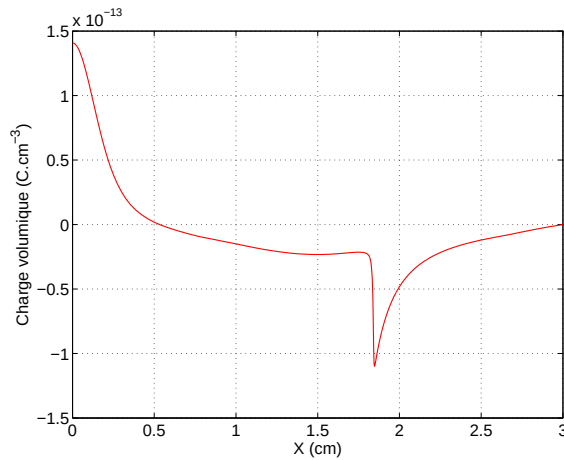


FIG. IV.26 – Charge volumique dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimé en $C.cm^{-3}$.

$d_x^2\Phi = -q/\epsilon_0$. On observe à nouveau une délocalisation de la charge dans la flamme, les électrons ayant davantage diffusé que les ions, la charge est négative en dehors de la flamme et positive à l'intérieur.

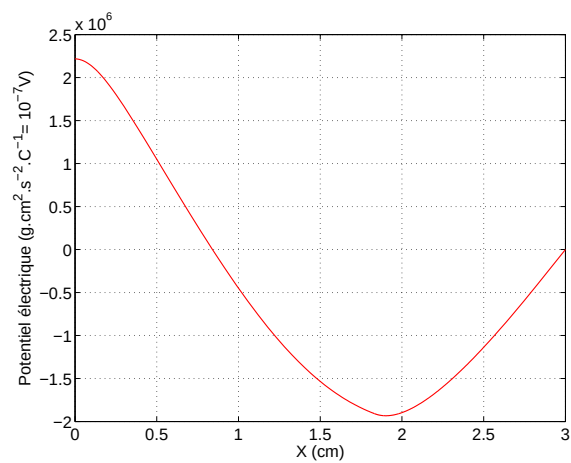


FIG. IV.27 – Potentiel électrique dans une flamme étirée ionisée d'un mélange hydrogène-air exprimé en $g.cm^2.s^{-2}.C^{-1} = 10^{-7}V$

Table des figures

Chapitre IV

IV.1	Configuration pour les flammes laminaires planes	245
IV.2	Configuration pour les flammes laminaires étirées	251
IV.3	Configuration pour les flammes laminaires étirées	251
IV.4	Configuration pour les flammes laminaires étirées	252
IV.5	Température dans une flamme plane ionisée	266
IV.6	Vitesse normale dans une flamme plane ionisée	267
IV.7	Masse volumique dans une flamme plane ionisée	267
IV.8	Fractions molaires des espèces majoritaires	268
IV.9	Fractions molaires des radicaux	268
IV.10	Fractions molaires des électrons et des ions hydronium	269
IV.11	Charge volumique dans une flamme plane ionisée	270
IV.12	Champ électrique dans une flamme plane ionisée	271
IV.13	Effet du champ électrique sur les fractions molaires	272
IV.14	Température dans une flamme étirée ionisée	273
IV.15	Vitesses réduites dans une flamme étirée ionisée	273
IV.16	Fractions molaires des espèces majoritaires	274
IV.17	Fractions molaires des radicaux	274
IV.18	Fractions molaires des électrons et des ions hydronium	275
IV.19	Charge volumique dans une flamme étirée ionisée	276
IV.20	Potentiel électrique dans une flamme plane ionisée	276
IV.21	Température dans une flamme étirée ionisée	277
IV.22	Vitesses réduites dans une flamme étirée ionisée	278
IV.23	Fractions molaires des espèces majoritaires	278
IV.24	Fractions molaires des radicaux	279
IV.25	Fractions molaires des électrons et des ions hydronium	279
IV.26	Charge volumique dans une flamme étirée ionisée	280
IV.27	Potentiel électrique dans une flamme étirée ionisée	281

Références bibliographiques

Chapitre IV

- [CDD⁺85] M.W. Jr. Chase, C.A. Davies, J.R. Jr. Downey, D.J. Frurip, R.A. McDonald and A.N. Syverud, “JANAF Thermochemical Tables, Third Edition”, J. Phys. Chem. Ref. Data **14** (1985), no. Suppl. 1, pp. 1–1856.
- [Cha84] T. Chan, “Newton like pseudo arclength methods for computing simple turning points”, SIAM J. Sci. Statist. Comput. **5** (1984), p. 135.
- [Cla85] P. Clavin, “Dynamic Behavior of Premixed Flame Fronts in Laminar and Turbulent Flows”, Prog. Enr. Comb. Sci. **11** (1985), pp. 1–59.
- [DCGS88] N. Darabiha, S. Candel, V. Giovangigli and M.D. Smooke, “Extinction of Strained Premixed Propane-Air Flames with Complex Chemistry”, Com. Sci. and Tech. **60** (1988), pp. 267–284.
- [DCM85] N. Darabiha, S. Candel and F.E. Marble, “Numerical Calculations of Strained Premixed Laminar Flames”, Comb. and Flame **64** (1985), pp. 203–217.
- [Deu74] P. Deuffhard, “A Modified Newton Method for the Solution of Ill-Conditioned Systems of Nonlinear Equations with Application to Multiple Shooting”, Numer. Math. **22** (1974), pp. 289–315.
- [EB88] A.N. Eraslan and R.C. Brown, “Chemiiionization and Ion-Molecule Reactions in Fuel-Rich Acetylene Flames”, Combustion and Flame **74** (1988), pp. 19–37.
- [EG94] A. Ern and V. Giovangigli, *Multicomponent transport Algorithms*, Lectures Notes in Physics, Series monographs, m24, Springer, Berlin, 1994.
- [EG95] ———, “Fast and Accurate Multicomponent Property Evaluations”, J. Comp. Physics **120** (1995), pp. 105–116.
- [EG96] ———, “Optimised Transport Algorithms for Flame Codes”, Comb. Sci. Tech. **118** (1996), pp. 387–395.

- [EG97] ———, “EGLIB : A General Purpose Fortran Library for Multicomponent Transport Property Evaluation”, Internal Reports, CERMICS 96-51 **250** (1997), pp. 289–315.
- [EG99] ———, “Impact of Detailed Multicomponent Transport on Planar and Counterflow Hydrogen/Air and Methane/Air Flames”, Comb. Sci. Tech. **149** (1999), pp. 157–181.
- [GD88] V. Giovangigli and N. Darabiha, “Vector Computers and Complex Chemistry Combustion” in *Mathematical Modeling in Combustion and Related Topics*, edited by C. Brauner and C. Schmidt-Laine, NATO ASI Series, vol. 40, pp. 491–503, M. Nijhoff, 1988.
- [Gio91] V. Giovangigli, “Convergent Iterative Methods for Multicomponent Diffusion”, IMPACT Comput. Sci. Eng. **3** (1991), pp. 244–276.
- [Gio99] ———, *Multicomponent Flow Modeling*, Birkhäuser, 1999.
- [GS87] V. Giovangigli and M.D. Smooke, “Extinction Limits of Strained Premixed Laminar Flames with Complex Chemistry”, Comb. Science and Tech. **53** (1987), pp. 23–49.
- [GS89] ———, “Adaptative Continuation Algorithms with Application to Combustion Problems”, Appl. Numer. Math. **5** (1989), pp. 305–331.
- [KMJ80] R.J. Kee, J.A. Miller and T.H. Jeffersen, *CHEMKIN : A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package*, SAND80-8003, SANDIA National Laboratories Report, 1980.
- [KRM87] R.J. Kee, F.M. Rupley and J.A. Miller, *The Chemkin Thermodynamic Data Base*, SAND87-8215, SANDIA National Laboratories Report, 1987.
- [KRM89] ———, *CHEMKIN II : A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics*, SAND89-8009B, SANDIA National Laboratories Report, 1989.
- [LLW83] P.A. Libby, A. Liñan and F.A. Williams, “Strained Premixed Laminar Flames with Nonunity Lewis Numbers”, Comb. Sci. and Tech. **34** (1983), pp. 257–293.
- [LW82] P.A. Libby and F.A. Williams, “Structure of Laminar Flamelets in Premixed Turbulent Flames”, Comb. and Flame **44** (1982), pp. 287–303.
- [LW83] ———, “Strained Premixed Laminar Flames under Nonadiabatic Conditions”, Comb. Sci. and Tech. **31** (1983), pp. 1–42.
- [LW84] ———, “Strained Premixed Laminar Flames with Two Reaction Zones”, Comb. Sci. and Tech. **37** (1984), pp. 221–252.

- [PB93] T. Pedersen and R.C. Brown, “Simulation of Electric Field Effects in Premixed Methane Flames”, *Combustion and flame* **94** (1993), pp. 433–448.
- [QSB84] J. Quinard, G. Searby and L. Boyer, “Cellular Structures on Premixed Flames in a Uniform Laminar Flow”, *Lect. Notes in Phys.* **210** (1984), pp. 331–341.
- [Smo82] M.D. Smooke, “Solution of Burner-Stabilized Premixed Laminar Flames by Boundary Value Methods”, *J. Comp. Phys.* **48** (1982), pp. 72–105.
- [SP71] D.R. Stull and H. Prophet, *JANAF Thermochemical Tables, Second ed.*, NBS NSRDS-NBS37, Washington, 1971.
- [Wil85] F.A. Williams, *Combustion Theory*, The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., Menlo Park, second ed., 1985.

Index des symboles

a paramètre	31	$D_{ij}^{\odot}$	65, 114
$A^{\parallel}$	71	$\mathbf{d}_k^0$	176
$A^{\perp}$	71	$\mathbf{d}^0$	176
$A^{\odot}$	71	$D^{\parallel}$	66, 116
$\mathbf{B}$ champ magnétique	25, 113, 120	$D^{\perp}$	66, 116
b paramètre	31	$D_{\varrho}^{\parallel}$	133
B norme de $\mathbf{B}$	25, 114	$D_{\varrho}^{\perp}$	133
$\mathbf{b}_i$ force	24	$D_{\varrho}^{\odot}$	133
$\tilde{\mathbf{b}}_i$	31	$D^{\odot}$	66, 116
c débit massique	247	$\mathbf{E}$ champ électrique . 25, 113, 120, 174,	
$\mathbf{C}_i$ vitesse relative	34	238, 244	
$\mathbf{c}_i$ vitesse	23	E champ électrique	246, 252
c_p	119, 138, 185, 239	e^e énergie électromagnétique	125
$c_{p,k}$	119, 238, 239	e^f énergie massique du fluide	113
c_v	119, 184	$\mathbf{e}_i$ base de $\mathbb{R}^3$	185
$C_{v,k}$	177	e_i énergie interne massique	79, 119
$c_{v,k}$	119	e énergie interne massique	113, 119
D	176	e_i^0 énergie massique	129
$\hat{D}$	176	E_k énergie molaire	177
$\mathbf{d}_i$ force de diffusion . 43, 114, 175, 243		e_k^f énergie massique	130
$\mathbf{d}'_i$	70	E_k^0 énergie molaire	183
D_{ij}	93, 175, 243	E_k^{red}	187
$\mathbf{D}_{ij}$	66	e_k^{red}	137, 150
$\hat{D}_{kl}$	176	E_k^{tot} énergie molaire totale	184
$D_{ij}^{c\parallel}$	106	e^t énergie totale	126
$D_{ij}^{c\perp}$	106	f	24
$D_{ij}^{\parallel}$	65, 114	f_i fonction de répartition	22
$D_{ij}^{\perp}$	65, 114	f_i^0	31–34
		$\mathbf{g}$ force gravitationnelle . . . 25, 113, 238	
		g énergie libre	119
		$G^{\mathbf{B}}$	89

$\tilde{G}^B$	88	q_i charge volumique .	23, 113, 176, 237
g_i énergie libre massique	79, 119	Q_i^{int}	34
G_k énergie libre molaire	177	Q_i^{tr}	34
$G^{\mathcal{S}}$	88	$\mathbf{R}$ opérateur vectoriel	47, 104
h enthalpie massique	119, 238, 239	s entropie massique	119, 239
h_i enthalpie massique	79, 115, 239	s_i entropie massique	79, 119, 240
H_k enthalpie molaire	175, 177	S_k entropie molaire	177
h_k^f	138	$S_{a+1/2}^c$ polynômes de Sonine	87
H_k^{tot} enthalpie molaire totale	185	T température	34, 115, 175, 238
$\mathbf{J}$ densité de courant électrique ...	113	$\mathbf{T}$ tenseur des forces E.M.	125
J	252	t le temps	22
$\mathbf{j}$ densité de courant .. 35, 63, 70, 113,	115, 174	u vitesse	245, 251
K	206	$\hat{u}$	252
$\bar{m}$ masse caractéristique	189	U_k vitesse de diffusion	246, 251
m_k masse molaire	113, 174, 237	$\tilde{u}$ vitesse	256
$\bar{m}$ masse molaire du mélange	239	v vitesse	251
$\mathbf{M}^{\parallel}$	104	$\mathbf{v}$ vitesse hydrodynamique	23, 113, 174, 237
$\mathbf{M}^{\perp}$	104	$\mathbf{V}_i$ vitesse de diffusion .. 62, 64–70, 93,	114, 174–176, 238, 243
m^*	194	V_k vitesse de diffusion	251, 253
$\mathbf{M}^{\odot}$	104	$\tilde{v}$ vitesse	256
n^a nombre d’atomes	37, 121, 179	W_k^d polynôme de Wang Chang et Uh-	lenbeck
n^c nombre de composantes	258	lenbeck	87
n_k densité molaire	113	$W_2^l(\mathbb{R}^d)$	200
N_l	209	$\mathbf{x}$ l’espace	23
n^r nombre de réactions ..	117, 178, 241	X_k fraction molaire	179, 241
n^s nombre d’espèces .	22, 113, 174, 237	x, y, z coordonnées	245
n^*	139, 194	Y_k fraction massique	179, 237, 241
$\mathbf{P}$ vecteur de Poynting	125	z_i charge massique	23
p pression thermodynamique .	35, 113, 118, 174, 177, 238		
$\hat{p}$	252		
p_i pression partielle .	43, 115, 118, 175		
p^{reac} pression réactive	75		
$\tilde{p}$	238		
p_u	238		
q charge totale volumique	23, 113, 118, 174, 177, 238, 239		
Q_i	34		

$\mathcal{B}^r$ indices des espèces produits	24
$\mathcal{B}_k^r$	24
$\mathcal{C}_i$	42, 54, 87
$\mathcal{D}_{kl}^{\text{bin}}$	188
$\mathcal{E}$ énergie interne volumique totale	23, 79, 174, 177

$\mathcal{E}_{il}$ énergie interne volumique.....	23
$\overline{\mathcal{E}}_i$ énergie interne volumique moyenne 40	
$\mathcal{F}_i^d$ flux diffusif	80, 113, 114
$\mathcal{F}^r$ indices des espèces sources	24
$\mathcal{F}_i^r$	24
$\mathcal{G}$ énergie libre volumique	79, 177
$\mathcal{H}$ enthalpie volumique.....	79, 177
$\mathcal{H}^{\text{tot}}$	185
$\mathcal{J}^{\text{kin}}$ flux d'entropie cinétique.....	27
$\mathcal{L}$	147, 165
$\mathcal{O}_\epsilon$	221
$\mathcal{O}_{\epsilon^*}$	196
$\mathcal{O}_U$ ouvert	129, 183
$\mathcal{O}_{(U,\epsilon)}$ ouvert	194
$\mathcal{O}_{(U^*,\epsilon^*)}$ ouvert	194
$\mathcal{O}_{U^*}$ ouvert	139
$\mathcal{O}_V$ ouvert	150, 221
$\mathcal{O}_{(V,\epsilon)}$	221
$\mathcal{O}_{V^*}$	196
$\mathcal{O}_{(W^*,\epsilon^*)}$	141, 197
$\mathcal{O}_{W^*}$	200
$\mathcal{O}_Z$ ouvert	129, 183
$\mathcal{Q}$ flux de chaleur . 63, 70–73, 93, 113, 115, 174, 175, 238, 243	
$\mathcal{Q}$ flux de chaleur	246, 253
$\mathcal{R}$	118, 178
$\mathcal{S}$ entropie volumique	79, 177
$\mathcal{S}^{\text{kin}}$ entropie cinétique.....	26
$\mathcal{S}_i^{\text{molec}}$	79
$\overline{\mathcal{T}}$	160, 225
$\overline{\mathcal{T}}^*$	142, 198
$\mathcal{W}_{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}^{\mathcal{F}^r \mathcal{B}^r}$ probabilité de transition	25

$\mathcal{B}$ champ magnétique renormé	49, 104, 114
$\mathcal{F}$ fonction de Helmholtz	228

$\mathcal{K}_r$	36
$\mathcal{K}_r^b$	37, 241
$\mathcal{K}_r^{\text{eq}}$	37, 39, 241
$\mathcal{K}_r^f$	37, 241

$\mathfrak{A}$ ensemble des atomes...	37, 121, 179
$\overline{\mathfrak{A}} = \mathfrak{A} \cup \{0\}$	37, 121, 179
$\mathfrak{a}_{kl}$ nombre d'atomes	37, 121, 179
$\mathfrak{a}_l$	38, 121, 179
$\mathfrak{B}$ voisinage	209
$\mathfrak{c}_i^{\text{int}}$	40
$\mathfrak{c}^{\text{int}}$	40
$\mathfrak{c}_v$	40
$\mathfrak{c}_v^{\text{tr}}$	40
$\mathfrak{D}_r$	36
$\mathfrak{m}$ vecteur de masse.....	38
$\mathfrak{M}$ matrice de masse	38
$\mathfrak{m}_i$ masse moléculaire	23
$\tilde{\mathfrak{m}}_i$ masse des atomes.....	37, 121, 179
$\mathfrak{n}_i$ densité moléculaire.....	23
$\mathfrak{w}_i$ production massique	77
$\mathfrak{Q}_i$ ensemble des états quantiques ..	22
$\mathfrak{R}$ ensemble des réactions	24, 117, 178, 241
$\mathfrak{v}^{\text{kin}}$ source d'entropie cinétique	27
$\mathfrak{v}^{\mathcal{S}}$ source d'entropie cinétique	27
$\mathfrak{v}^{\mathcal{C}}$ source d'entropie cinétique	27

α_{il}	25
α	88
α_k	224
β	88
β_{il}	25
β_k	224
χ	176

χ^{cl}	106	μ	118, 178
$\chi^{c\perp}$	106	$\bar{\mu}^u$	39
χ_i	93, 175, 243	$\bar{\mu}$	39
$\chi_i^{\parallel}$	67, 114, 115	ν_{ir} coefficient stœchiométrique	24, 241
$\chi_i^{\perp}$	67, 114, 115	ν_{ir}^b coefficient stœchiométrique	24, 117, 178, 241
$\chi_i^{\odot}$	67, 114, 115	ν_{ir}^f coefficient stœchiométrique	24, 117, 178, 241
$\chi^{\parallel}$	67, 116	ν_r vecteur stœchiométrique	 38
$\chi^{\perp}$	67, 116	ν_r^b vecteur stœchiométrique	.. 37, 118, 178
$\chi^{\odot}$	67, 116	ν_r^f vecteur stœchiométrique	... 37, 118, 178
Δ inverse généralisée de D	188	Ω terme source	130, 136, 182
δ_{ki} symbole de Kronecker	29	ω	87
ϵ paramètre	31, 189	$\bar{\Omega}$	160, 225
$\bar{\epsilon}$	221	$\bar{\Omega}^*$	142, 198
ϵ_0 constante diélectrique	120	$\bar{\omega}_i^0$ terme source chimique	35, 36
η viscosité de cisaillement	94, 175, 244	$\bar{\omega}_i$	62
η_α viscosité de cisaillement	... 75, 116	Ω^j terme source	128
γ vecteur densité volumique	 181	ω_k production chimique	. 113, 174, 238
γ_k densité volumique	174, 241	Ω^*	139, 194
κ viscosité volumique	74, 94, 116, 175, 244	$\tilde{\Omega}$	151, 221
λ	93, 175, 243	$\tilde{\Omega}^*$	139, 195
$\hat{\lambda}$	71	Φ potentiel électrique	244
λ^{cl}	106	ϕ^{a0cdk} fonctions de base	87
$\lambda^{c\perp}$	106	ϕ_i	31
$\hat{\lambda}$	93	$\phi_i^{\mathcal{E}}$	46
$\hat{\lambda}^{\parallel}$	71, 116	$\phi_i^{D_j}$	46–53
$\hat{\lambda}^{\text{cl}}$	106	ϕ_i^η	46, 53–57
$\hat{\lambda}^{\perp}$	71, 116	ϕ_i^κ	46, 58–59
$\hat{\lambda}^{c\perp}$	106	$\phi_i^{\hat{\lambda}}$	46–53
$\hat{\lambda}^{\odot}$	71, 116	$\phi_i^{\hat{\lambda}(1)}$	47
$\lambda^{\parallel}$	72, 115	$\phi_i^{\hat{\lambda}(2)}$	47
$\lambda^{\perp}$	72, 115	$\phi_i^{\hat{\lambda}(3)}$	47
$\lambda^{\odot}$	72, 115	$\phi_i^{\mathcal{E}}$	59–61
$\bar{\mu}_i$ potentiel chimique	39	ϕ_i^r	46
$\bar{\mu}_i^u$ potentiel chimique unitaire	 39	$\phi_i^{\mathcal{J}}$	46
μ_k potentiel chimique réduit	. 119, 177		
μ_k^u potentiel chimique réduit unitaire	178		
μ_0 perméabilité magnétique	 120		

ϕ_{Π}	199	$\theta_i^{\perp}$	65
ϕ_I	199	$\theta_i^{\odot}$	65
$\boldsymbol{\Pi}$ tenseur visqueux.....	63, 74–76, 93, 113, 116, 174, 175, 238, 243	$\theta^{\parallel}$	67, 116
Ψ_i	43	$\theta^{\perp}$	67, 116
$\Psi_i^{\mathcal{C}}$	43	$\theta^{\odot}$	67, 116
$\Psi_i^{D_j}$	44	Υ	80
Ψ_i^{η}	44	Υ_e	153, 221
Ψ_i^{κ}	44	Υ_h	153
$\Psi_i^{\hat{\lambda}}$	44	$\varkappa$ vecteur charge molaire.....	179
Ψ_i^r	44	$\varkappa_k$ charge molaire.....	174
$\Psi_i^{\mathcal{S}}$	43	$\varkappa^{\parallel}$	133
ψ^l invariant de collision scalaire.....	29	$\varkappa^{\perp}$	133
Ψ^{μ}	86	$\varkappa^{\odot}$	133
ρ densité massique totale.....	23, 113, 118, 177, 237, 239	$\varphi^{\eta(1)}$	56
ρ_i densité massique.....	23, 113, 174	$\varphi^{\eta(2)}$	56
$\check{\rho}$	158, 161	$\varphi^{\eta(3)}$	56
ϱ vecteur de masse.....	67, 121	φ^{μ}	86
σ entropie.....	149, 220	$\varphi^{D_j(1)}$	52
Σ_1	185	$\varphi^{D_j(2)}$	52
$\bar{\sigma}^*$	209	$\varphi^{\hat{\lambda}(2)}$	50
Σ^{d-1} sphère unité.....	139, 195, 198	$\varphi^{\hat{\lambda}(1)}$	50
Σ_e	153	Ξ grille discrète.....	259
Σ_h	153	ξ vecteur unité.....	139, 195, 198
$\sigma_i^{\diamond}$ conductivités d'électro-diffusion.....	70	ξ^{rk}	86
Σ_{me}	221		
Σ_{m^2}	221	a taux d'étirement.....	255
$\sigma^{\diamond}$ conductivités électriques.....	70	$\mathbf{A}_r$	241
Σ_{ρ}	153	$\mathbf{b}_r$	241
σ^* entropie.....	140, 195	$\mathbf{E}_r$	241
$\sigma_T^{\diamond}$ conductivités électro-thermiques.....	70	$\mathbf{F}_{\Xi}$ équations discrètes.....	259
τ_r	117, 178, 241	$\mathbf{J}$ matrice jacobienne.....	259
$\bar{\tau}_r$	36, 37, 39	$\mathbf{L}_k$ paramètre d'amortissement.....	259
θ_i	93	$\mathbf{q}_i^*$	140, 195
$\boldsymbol{\theta}_i$	66	$\mathbf{s}$ facteur géométrique.....	254
$\theta_i^{c\parallel}$	106	$\mathbf{w}_{ij}^{ljl'j'}$ probabilité de transition.....	25
$\theta_i^{c\perp}$	106	$\mathbf{X}_{\Xi}$ inconnue discrète.....	259
$\theta_i^{\parallel}$	65		

$\mathcal{A}$	86
$\mathcal{B}$	86
$\mathcal{C}$ espace des contraintes	88
$\mathcal{C}_i(f)$ terme source réactif	24
$\mathcal{C}_i^r(f)$ terme source réactif	25
$\mathcal{D}_i(f_i)$ opérateur différentiel de flux	24
$\tilde{\mathcal{D}}_i(f_i)$	31
$\tilde{\mathcal{D}}_i(f_i)$	31
$\mathcal{F}^{\mathbf{B}}$	86
$\mathcal{F}^{q^2}$	56
$\mathcal{F}^{\mathcal{I}}$ opérateur linéarisé	41
$\mathcal{F}^{\mathcal{I}}$ opérateur linéarisé	86, 95
$\mathcal{F}^{q^1}$	50
$\mathcal{G}^{\nu}$	88
$\mathcal{I}$ espace des invariants de collision	89
$\mathcal{I}_i(f)$ terme source non réactif ..	24, 97
$\mathcal{T}_\nu$	88

$\mathbb{I}$ matrice identité	35, 113, 174
$\tilde{\mathbb{I}}$	162

$\bar{\mathbf{A}}_0$	160, 225
$\bar{\mathbf{A}}_0^*$	142, 198
$\tilde{\mathbf{A}}_0^*$	139, 195
$\bar{\mathbf{A}}_i$	130, 184
$\bar{\mathbf{A}}_i$	160, 225
$\bar{\mathbf{A}}_i^*$	142, 198
$\bar{\mathbf{A}}_i^e$	130
$\bar{\mathbf{A}}_i^e$	160
$\bar{\mathbf{A}}_i^{*e}$	142
$\mathbf{A}_i^{*e}$	139
$\tilde{\mathbf{A}}_i^{*e}$	139
$\mathbf{A}_i^{e,\Omega}$	131
$\mathbf{A}_i^*$	139, 194

$\tilde{\mathbf{A}}_i$	151, 221
$\tilde{\mathbf{A}}_i^e$	151
$\tilde{\mathbf{A}}_i^*$	139, 195
$\tilde{\mathbf{A}}_0$	151, 221
$\bar{\mathbf{B}}^{\eta\alpha}$	163
$\bar{\mathbf{B}}^\kappa$	163
$\bar{\mathbf{B}}^\parallel$	162
$\bar{\mathbf{B}}^\perp$	162
$\bar{\mathbf{B}}^\odot$	162
$\mathbf{B}_{ij}$	130, 184
$\bar{\mathbf{B}}_{ij}$	160, 225
$\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$	161
$\bar{\mathbf{B}}_{ij}^*$	142, 198
$\bar{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$	161
$\mathbf{B}_{ij}^*$	139, 194
$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}$	151, 221
$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$	154
$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\eta$	222
$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa$	222
$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^*$	139, 195
$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$	154
$\hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{diff}}$	132, 185
$\hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\text{visc}}$	185
$\hat{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa$	134, 186
$\hat{\mathbf{B}}_{ij}^{\eta\alpha}$	134
$\hat{\mathbf{B}}_{ij}^\eta$	186
$\tilde{\mathbf{B}}^D$	222
$\tilde{\mathbf{B}}^{\eta\alpha}$	155
$\tilde{\mathbf{B}}_{ij}^\kappa$	155
$\tilde{\mathbf{B}}^\parallel$	154
$\tilde{\mathbf{B}}^\perp$	154
$\tilde{\mathbf{B}}^\odot$	154
$\mathbf{d}^\varrho$	156
$\mathbf{d}_r^\varrho$	152
$\mathbf{d}_\varrho^r$	133, 150

$\tilde{d}_g^r$	160
e^f vecteur énergie	130
E^{red}	187
e^{red}	137, 150
E^{tot} vecteur énergie	184
F_i flux convectif	128, 182
F_i^{diff} flux diffusif	183
F_i^{diss} flux dissipatif	128, 182
F_{ij}^e	131, 132
F_i^{visc} flux visqueux	183
h	133
h^f	138
h^{tot} vecteur enthalpie	185
K_{ϵ^*}	200
$\bar{L}^*$	206
$\tilde{L}^*$	207
m vecteur masse molaire	121, 179
M matrice masse molaire	118
P	158, 224
P^*	144, 199
q vecteur de charge volumique ...	121, 176
r	133, 138
$\mathbf{S}$ taux de déformation ...	75, 116, 175, 244
$\mathbf{T}_i^{(n)}$	54
U variable conservative	128, 182
u vecteur unitaire	38, 67, 121, 179
$\tilde{u}$	158
U'	158, 224
$U^{*'}$	144, 199
U^* variable conservative	139, 194
V variable entropique	150, 220
V'	158, 224
$V^{*'}$	144, 199
v_r^g	152
$\tilde{v}_r^g$	160
V^* variable entropique	139, 195
W variable normale	224

W_{II} variable parabolique	160, 227
W^* variable normale	141, 197
w^*	206
W_{I} variable hyperbolique	160, 227
Y vecteur fraction massique	179
X vecteur fraction molaire	179
Z variable naturelle	128, 182
z vecteur de charge	38, 121, 133

B^r indices des états quantiques	24
B_K^r	24
C	84, 117, 128, 182
C^*	139, 194
D	260
e électrons	190
F	258
F^r indices des états quantiques	24
F_I^r	24
h espèces lourdes	190
h_P constante de Planck	25
I indice quantique	23
I	142, 160, 198
Π	142, 160, 198
k_B constante de Boltzmann	26
R constante des gaz parfaits	118, 177, 239
S ensemble des espèces ..	22, 113, 174, 237
X	258

$\llbracket ., . \rrbracket$ opérateur intégral	42
$\ \cdot \ _l$	200
$\ \perp \odot$	104–105
$\langle\langle ., . \rangle\rangle$ produit scalaire	65
$\langle\langle ., . \rangle\rangle$ produit scalaire	30

$\langle \cdot, \cdot \rangle$ produit scalaire.....	38
$\overline{\otimes^a \mathcal{C}_k}$ tenseur d'ordre a	87