Schéma D1Q3 — Stabilité

1. Thermodynamique des gaz

A la fin du XIX$^{\text{ième}}$ siècle, les travaux sur la théorie cinétique de Maxwell (1860) et Boltzmann (1872) ont permis de préciser la loi de répartition des vitesses d'un gaz à l'équilibre thermodynamique. Dans cette approche, on considère qu'en un "point" x et à l'instant t coexiste un continuum de vitesses possibles pour les molécules du gaz. Plus précisément, au point x à dx près, et pour une vitesse v à dv près, la masse de gaz présente vaut

$$\mathrm{d}m = f(v)\mathrm{d}x\mathrm{d}v.$$

La répartition de Maxwell-Boltzmann précise la fonction f ; elle est paramétrée par la densité ρ, la vitesse moyenne du gaz u et le paramètre β, relié simplement à la température T, à la masse μ d'une molécule et à la constante k de Boltzmann *via* la relation classique

$$\beta = \frac{\mu}{kT}.$$

La loi de répartition des vitesses s'écrit dans le cas de trois dimensions d'espace

$$f(v) = \rho \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\beta}{2}|v-u|^2\right). \tag{1}$$

Des calculs élémentaires d'intégrales gaussiennes montrent que

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^3} f(v)\,\mathrm{d}v, \qquad \rho u = \int_{\mathbb{R}^3} f(v) v\,\mathrm{d}v, \qquad \rho E = \int_{\mathbb{R}^3} f(v)\tfrac{1}{2}|v|^2\,\mathrm{d}v,$$

où E est l'énergie totale spécifique du gaz.

La distribution (1) correspond au cas idéal d'un équilibre *a priori* indépendant de l'espace et du temps. Dans le cas où une évolution dynamique a lieu, la répartition des vitesses f est une fonction de l'espace x, du temps t et des vitesses v ; elle suit l'équation de Boltzmann (1872)

$$\partial_t f + v\cdot\partial_x f = Q(f), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0. \tag{2}$$

Dans cette équation, le terme de gauche $\partial_t + v\cdot\partial_x$ correspond à un transport libre à la vitesse v alors que le terme de droite $Q(f)$ décrit les collisions au sein du gaz. Dans le modèle le plus classique pour un gaz dilué, on ne prend en compte que les collisions binaires (à deux points) et Q est une fonction quadratique de la distribution f.

2. Gaz de Boltzmann sur réseau — Schéma D1Q3

L'idée proposée par Mac Namara et Zanetti (1988) consiste à considérer une fonction f continue qui décrit la population moyenne sur site donné d'un réseau discret, ayant une vitesse discrète imposée par la géométrie du réseau. Nous nous intéresserons ici au cas le plus simple de gaz sur réseau : un réseau monodimensionnel à trois vitesses.

On se donne une grille réelle de pas dx, d'un pas de temps dt et on suppose fixe la vitesse de grille $c = dx/dt$. Au point $x_j = j\,dx$, $j \in \mathbb{Z}$, et à l'instant $t^n = n\,dt$, $n \in \mathbb{N}$, on cherche f_{0j}^n, f_{+j}^n et f_{-j}^n, où f_{0j}^n (respectivement f_{+j}^n, resp. f_{-j}^n) décrit le nombre moyen de particules au repos (respectivement animées de la vitesse $+c$, resp. $-c$) à l'instant t^n à la position x_j. Un pas de temps se compose de deux phases, une phase de transport libre suivie d'une phase de collision.

Au cours du transport libre, on résout en chaque point de la grille les trois équations d'advection

$$\partial_t f_- - c\partial_x f_- = 0, \qquad \partial_t f_0 = 0, \qquad \partial_t f_+ + c\partial_x f_+ = 0.$$

En notant $\tilde{f}^n_{0j}$, $\tilde{f}^n_{-j}$ et $\tilde{f}^n_{+j}$ les densités après la phase de transport, on obtient par la méthode des caractéristiques

$$\tilde{f}^n_{-j} = f^n_{-j+1}, \qquad \tilde{f}^n_{0j} = f^n_{0j}, \qquad \tilde{f}^n_{+j} = f^n_{+j-1}.$$

La phase de collision est une phase locale en espace. Elle traduit le fait que lors d'une collision, la masse et la quantité de mouvement sont conservées, et que l'énergie relaxe vers une énergie d'équilibre. On introduit pour cela les moments masse, quantité de mouvement et énergie

$$\rho = f_- + f_0 + f_+, \qquad q = -cf_- + cf_+, \qquad E = \tfrac{1}{2}c^2 f_- + \tfrac{1}{2}c^2 f_+, \tag{3}$$

le vecteur des moments $m = (\rho, q, E)^t$, le vecteur des fonctions de répartitions $f = (f_-, f_0, f_+)^t$. Etant donné les relations (3), on introduit la matrice M telle que $m = Mf$.

Question 1.
Ecrire la matrice M et l'inverser "à la main" ou en utilisant `Mupad`.

Il est donc possible de travailler dans l'espace des moments, ce qui est pratique pour prendre en compte les propriétés de conservation. Les variables conservées ρ et q sont conservées lors de la collision et l'énergie relaxe vers une énergie d'équilibre, ainsi

$$\rho^* = \rho, \qquad q^* = q, \qquad E^* = (1-s)E + sE^{eq},$$

où l'on a ajouté un exposant $*$ pour les quantités après la collision. On revient ensuite aux fonctions de répartitions grâce à la matrice M.

Question 2.
Ecrire un programme `Matlab` qui simule un gaz sur réseau en choisissant pour énergie à l'équilibre

$$E^{eq} = \alpha^2 \frac{c^2}{2}\rho, \tag{4}$$

avec α une constante strictement positive. On se placera sur un intervalle borné $[a,b]$ et l'on choisira des conditions aux limites de type périodique.

3. Equation de l'acoustique

On peut montrer par un développement asymptotique que le schéma proposé dans la partie 2 est équivalent au premier ordre à un système de deux équations de conservation, l'une de la masse et l'autre de la quantité de mouvement :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x q = \mathcal{O}(dt), \\ \partial_t q + \partial_x (2E^{eq}) = \mathcal{O}(dt). \end{cases} \tag{5}$$

Question 3.
En utilisant l'expression (4) de l'énergie d'équilibre, déterminer l'équation aux dérivées partielles du second ordre vérifiée par ρ, puis celle vérifiée par q. Vous donnerez également les solutions exactes de ces équations.

Question 4.
Tracer sur un même graphique la solution exacte du problème de l'acoustique (5) et la solution approchée par le schéma D1Q3 dans le cas où les conditions initiales sont périodiques de période adapté à l'intervalle de travail $[a,b]$.

4. Stabilité du schéma D1Q3

Dans cette partie, on s'intéresse à la propriété de stabilité du schéma D1Q3. On se donne une solution f du schéma de la forme $f_\sharp(x,t) = \phi_\sharp e^{i(\omega t - kx)}$, $\sharp \in \{-, 0, +\}$, où $\phi_\sharp$ sont des constantes. Dans la suite, nous noterons F le vecteur des densités $F = (f_-, f_0, f_+)$.

Question 5.
Montrer de façon analytique que $F(x, t + dt) = GF(x, t)$, où G est une matrice 3×3 que l'on déterminera.

Question 6.
En utilisant le schéma D1Q3 de la partie 2, construire la matrice G numériquement.

On dira que le schéma D1Q3 est stable si la matrice G a son rayon spectral inférieur à 1.

Question 7.
Déterminer numériquement les 3 valeurs propres de la matrice G et tracer les en fonction du nombre d'onde k. En particulier, étudier la stabilité du schéma pour différentes valeurs du paramètre de relaxation s.