Introduction aux schémas de Boltzmann sur réseau

Paris, 2012 - 2013

Cours 01

Analyse asymptotique du schéma de de Boltzmann D1Q3 pour l'acoustique

- Description de l'algorithme
- Equilibre à l'ordre zéro
- Acoustique à l'ordre un
- Acoustique dissipative à l'ordre deux

François Dubois

novembre 2012, 13 pages

CSI
Nov 2012

Analyse asymptotique du schéma de Boltzmann D1Q3 pour l'acoustique

① Description de l'algorithme

- on dispose en tout point $j\Delta x$ ($j \in \mathbb{Z}$, $\Delta x > 0$ fixé) de l'espace et pour tout temps $n\Delta t$ ($n \in \mathbb{N}$, $\Delta t > 0$ fixé) des densités de particules f_-, f_0, f_+, de vitesses respectives $-\lambda$, 0, $+\lambda$, avec

$$\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (1)$$

La question posée est de calculer $(f_+)_j^{n+1}$, $(f_0)_j^{n+1}$, $(f_-)_j^{n+1}$ si les données sont connues aux points de grille $(k\Delta x)_{k\in\mathbb{Z}}$ et à l'instant antérieur $n\Delta t$: $(f_+)_k^n$, $(f_0)_k^n$ et $(f_-)_k^n$ sont donnés pour $k \in \mathbb{Z}$.

- on calcule en tout point trois moments:

$$\rho = f_+ + f_0 + f_- \quad (2)$$

$$J = \lambda (f_+ - f_-) \quad (3)$$

(4) $\quad \varepsilon = \frac{\lambda^2}{2}(f_+ + f_-)$.

- Puis ces moments relaxent : la densité ρ et l'impulsion J restent inchangés

(5) $\quad \rho^* = \rho \, , \; J^* = J$.

Le calcul de ε^* demande d'abord de définir une énergie à l'équilibre :

(6) $\quad \varepsilon^{eq} = \frac{\alpha \lambda^2}{2} \rho$

où $\alpha > 0$ est un paramètre du schéma de Boltzmann. Ensuite l'énergie relaxe vers ε^* selon une interpolation entre ε et ε^{eq} :

(7) $\quad \varepsilon^* = \varepsilon + s(\varepsilon^{eq} - \varepsilon), \quad s > 0$.

- Une fois les trois moments ρ, J, ε relaxés, on calcule la distribution post-relaxation f_+^*, f_0^*, f_-^* avec une relation particules-moments analogue à (2)(3)(4). Compte tenu de (5), on doit résoudre le système

$$(8) \quad \begin{cases} f_+^* + f_0^* + f_-^* = \rho \\ \lambda(f_+^* - f_-^*) = J \\ \frac{\lambda^2}{2}(f_+^* + f_-^*) = \varepsilon^* \end{cases} .$$

on obtient alors sans difficulté

$$(9)\quad \begin{cases} f_+^* = \dfrac{J}{2\lambda} + \dfrac{\varepsilon^*}{\lambda^2} \\ f_0^* = \rho - \dfrac{2}{\lambda^2}\,\varepsilon^* \\ f_-^* = -\dfrac{J}{2\lambda} + \dfrac{\varepsilon^*}{\lambda^2} \,. \end{cases}$$

- Le schéma en temps s'obtient en advectant les moments f_+, f_0, f_- avec les vitesses $+\lambda$, 0 et $-\lambda$ respectivement :

$$(10)\quad (f_+)_j^{n+1} = (f_+^*)_{j-1}^n$$

$$(11)\quad (f_0)_j^{n+1} = (f_0^*)_j^n$$

$$(12)\quad (f_-)_j^{n+1} = (f_-^*)_{j+1}^n \,.$$

② Equilibre à l'ordre zéro.

Calculons le moment ε au nouvel instant $(n+1)\Delta t$ et au point de grille $j\Delta x$:

$$\varepsilon_j^{n+1} = \frac{\lambda^2}{2}\left[(f_+)_j^{n+1} + (f_-)_j^{n+1}\right] \qquad \text{cf } (4)$$

$$= \frac{\lambda^2}{2}\left[(f_+^*)_{j-1}^n + (f_-^*)_{j+1}^n\right] \qquad \text{cf } (10) \text{ et } (12)$$

$$= \frac{\lambda^2}{2}\left[\left(\frac{J}{2\lambda} + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2}\right)_{j-1}^n + \left(-\frac{J}{2\lambda} + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2}\right)_{j+1}^n\right]$$

(13) $\varepsilon_j^{n+1} = -\frac{\lambda}{4}\left(J_{j+1} - J_{j-1}\right)^n + \frac{1}{2}\left(\varepsilon^*_{j+1} + \varepsilon^*_{j-1}\right)^n$.

- on développe maintenant cette expression, en supposant toutes les fonctions régulières :

$$\varepsilon_j^{n+1} = \varepsilon_j + \Delta t \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + O(\Delta^2).$$

$$J_{j+1} - J_{j-1} = 2\Delta x \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^3).$$

$$\frac{1}{2}\left(\varepsilon^*_{j+1} + \varepsilon^*_{j-1}\right) = \varepsilon^*_j + O(\Delta^2)$$

en omettant les indices en temps. On déduit alors de (13) :

$$\varepsilon_j + O(\Delta t) = O(\Delta x) + \varepsilon_j^* + O(\Delta^2),$$

ou (14) $\varepsilon^* = \varepsilon + O(\Delta)$.

or $\varepsilon^* = \varepsilon + s(\varepsilon^{eq} - \varepsilon)$ (relation (7)).

Comme $s \neq 0$, on tire de (14) et de (7) :

(15) $\varepsilon = \varepsilon^{eq} + O(\Delta)$.

A l'ordre 0, l'énergie ε est égale à sa valeur à l'équilibre donnée par la relation (6).

- La relation (15) est encore vraie quand on change ε en ε^* :

(16) $\varepsilon^* = \varepsilon^{eq} + O(\Delta)$.

En effet, on tire de (7) :

$$\varepsilon^* = (1-s)\,\varepsilon + s\,\varepsilon^{eq} = (1-s)\left(\varepsilon^{eq} + O(\Delta)\right) + s\,\varepsilon^{eq}$$
$$= \varepsilon^{eq} + (1-s)\,O(\Delta) = \varepsilon^{eq} + O(\Delta).$$

3 Acoustique à l'ordre 1.

- on établit pour ρ_j^{n+1} une relation exacte dans le même genre que (13). On a

$$\rho_j^{n+1} = (f_+)_j^{n+1} + (f_0)_j^{n+1} + (f_-)_j^{n+1} \qquad \text{cf } (2)$$
$$= (f_+^*)_{j-1}^{n} + (f_0^*)_j^{n} + (f_-^*)_{j+1}^{n} \qquad \text{cf } (10)(11)(12)$$
$$= \left(\frac{J}{2\lambda} + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2}\right)_{j-1}^{n} + \left(\rho - \frac{2}{\lambda^2}\varepsilon^*\right)_j^{n} + \left(\frac{-J}{2\lambda} + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2}\right)_{j+1}^{n}$$
$$\text{cf } (9)$$

$$(17) \quad \rho_j^{n+1} = \rho_j^{n} - \frac{1}{2\lambda}\left(J_{j+1} - J_{j-1}\right)^{n} + \frac{1}{\lambda^2}\left(\varepsilon^*_{j+1} - 2\varepsilon^*_j + \varepsilon^*_{j-1}\right)^{n}.$$

- on suppose toutes les grandeurs ci-dessus fonctions régulières de l'espace et du temps. On a de façon classique

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^{n} + \frac{\partial \rho}{\partial t}\,\Delta t + O(\Delta^2)$$
$$J_{j+1} - J_{j-1} = 2\,\Delta x\,\frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^3)$$

$$\varepsilon^*_{j+1} - 2\varepsilon^*_j + \varepsilon^*_{j-1} = \Delta x^2 \, \frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2} + O(\Delta^4).$$

on injecte ces développements dans l'identité (17) :

$$\rho_j^n + \Delta t \, \frac{\partial \rho}{\partial t} + O(\Delta^2) = \rho_j^n - \frac{1}{2\lambda} \cdot 2\Delta x \, \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^2).$$

on retranche ρ_j^n, on divise par Δt, et on prend en compte la relation (1) $\frac{1}{\lambda}\frac{\Delta x}{\Delta t} = 1$.
On en déduit

$$(18) \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = O(\Delta) \; ;$$

cette relation exprime qu'à la limite Δx (proportionnel à Δt) tendant vers 0, le schéma de Boltzmann permet de discrétiser à l'ordre 1 la conservation de la masse.

- on établit une identité analogue à (17) pour l'impulsion J. on a :

$$J_j^{n+1} = \lambda \left[(f_+)_j^{n+1} - (f_-)_j^{n+1} \right] \qquad \text{cf (3)}$$

$$= \lambda \left[(f_+^*)_{j-1}^n - (f_-^*)_{j+1}^n \right] \qquad \text{cf (10) et (12)}$$

$$= \lambda \left[\left(\frac{J}{2\lambda} + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2} \right)_{j-1}^n - \left(\frac{-J}{2\lambda} + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2} \right)_{j+1}^n \right]$$

$$(19) \quad J_j^{n+1} = \frac{1}{2}\left(J_{j+1} + J_{j-1} \right)^n - \frac{1}{\lambda}\left(\varepsilon^*_{j+1} - \varepsilon^*_{j-1} \right)^n .$$

On approche les grandeurs présentes dans la relation (19) par des développements de Taylor :

$$J_j^{n+1} = J_j^n + \Delta t \frac{\partial J}{\partial t} + O(\Delta^2)$$

$$\frac{1}{2}(J_{j+1} + J_{j-1})^n = J_j^n + O(\Delta^2)$$

$$\varepsilon^*_{j+1} - \varepsilon^*_{j-1} = 2\Delta x \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x} + O(\Delta^3).$$

On suppose aussi (et cette hypothèse est en fait assez restrictive !) qu'on peut dériver en espace la relation (16) :

$$(20) \qquad \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x} = \frac{\partial \varepsilon^{eq}}{\partial x} + O(\Delta).$$

On tire alors de (19) et (20) :

$$J_j^n + \Delta t \frac{\partial J}{\partial t} + O(\Delta^2) = J_j^n + O(\Delta^2) - \frac{1}{\lambda} \cdot 2\Delta x \frac{\partial \varepsilon^{eq}}{\partial x}$$

on retranche J_j^n, on divise par Δt et on remplace ε^{eq} par sa valeur donnée à la relation (6). D'où

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \frac{2}{\lambda} \frac{\Delta x}{\Delta t} \alpha \frac{\lambda^2}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x} = O(\Delta)$$

$$(21) \qquad \frac{\partial J}{\partial t} + \alpha \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = O(\Delta),$$

relation qui exprime la conservation de l'impulsion à l'ordre zéro.

- Le système (18)(21) est une approximation à l'ordre 1 du système de l'acoustique classique, obtenu par linéarisation des équations d'Euler de la dynamique des gaz autour d'un état constant de vitesse nulle :

$$(22)\quad \begin{cases} \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \dfrac{\partial u}{\partial x} = 0 \\ \rho_0 \dfrac{\partial u}{\partial t} + c_0^2 \dfrac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \end{cases},$$

où ρ_0 est une densité de référence et c_0 la vitesse des ondes sonores.

- En reliant (22) avec (18)(21), il vient $J = \rho_0 u$ et

$$(23)\qquad c_0 = \lambda \sqrt{\alpha} .$$

La vitesse du son du milieu acoustique est fixée (grâce à (23)) à partir de la loi (6) qui donne l'énergie à l'équilibre.

④ Acoustique dissipative à l'ordre 2.

- Nous reprenons la relation (13) en vue d'enrichir (15) par un développement à l'ordre deux. De (15), on tire par dérivation en temps :

(24) $$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} = \frac{\partial \varepsilon^{eq}}{\partial t} + O(\Delta).$$

Donc la relation (13) entraîne :

$$\varepsilon_j + \Delta t \frac{\partial \varepsilon^{eq}}{\partial t} + O(\Delta^2) = -\frac{\lambda}{4} \cdot 2\Delta x \frac{\partial J}{\partial x} + \varepsilon_j^* + O(\Delta^2)$$

soit, compte tenu de (7) :

$$\varepsilon - \varepsilon^* = s(\varepsilon - \varepsilon^{eq}) = -\Delta t \frac{\partial}{\partial t}\left(\alpha \frac{\lambda^2}{2} \rho\right) - \frac{\lambda \Delta x}{2} \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^2)$$

$$= -\lambda^2 \frac{\Delta t}{2}\left(\alpha \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x}\right) + O(\Delta^2)$$

$$= -\frac{\lambda^2}{2} \Delta t (1-\alpha) \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^2) \qquad \text{cf (18)}$$

(25) $$\varepsilon = \varepsilon^{eq} - \frac{\lambda^2}{2s} \Delta t (1-\alpha) \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^2).$$

Cette relation est plus précise que (15) car le terme d'ordre 1 par rapport à Δt a été explicité.

- On passe au ε^* après relaxation de façon analogue au passage de (15) à (16). Compte tenu de (7) :

$$\varepsilon^* = (1-s)\varepsilon + s\,\varepsilon^{eq}$$

$$= (1-s)\left[\varepsilon^{eq} - \frac{\lambda^2}{2s} \Delta t (1-\alpha) \frac{\partial J}{\partial x}\right] + s\,\varepsilon^{eq} + O(\Delta^2)$$

$$= \varepsilon^{eq} - \frac{1-s}{2s} \lambda^2 \Delta t (1-\alpha) \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^2).$$

(26) $$\varepsilon^* = \varepsilon^{eq} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2s}\right) \lambda^2 \Delta t (1-\alpha) \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta^2).$$

Comme plus haut, nous supposons pour la suite avoir le droit de dériver cette relation par rapport à l'espace x :

$$(27) \qquad \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x} = \alpha \frac{\lambda^2}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2s}\right) \lambda^2 \Delta t (1-\alpha) \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + O(\Delta^2)$$

- On développe la relation (17) en allant un cran plus loin en précision :

$$\rho + \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + O(\Delta^3) =$$

$$= \rho - \frac{1}{2\lambda} \cdot 2 \Delta x \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{1}{\lambda^2} \frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2} \Delta x^2 + O(\Delta^3).$$

Comme plus haut, on retranche ρ et on divise par Δt. On met aussi en évidence le membre de gauche de (18) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{1}{\lambda} \Delta x \frac{\partial^2 \varepsilon^{eq}}{\partial x^2} + O(\Delta^2)$$

$$= - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \Delta t \cdot \frac{1}{2} \lambda^2 \alpha \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\Delta^2)$$

$$(28) \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = - \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \lambda^2 \alpha \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \right) + O(\Delta^2).$$

- Or on tire en dérivant (18) par rapport à t et (21) par rapport à x :

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\left(- \frac{\partial J}{\partial x}\right) = - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial J}{\partial t}\right) = \alpha \lambda^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\Delta).$$

Soit

$$(29) \qquad \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \lambda^2 \alpha \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = O(\Delta).$$

C'est l'équation des ondes de d'Alembert, ou la forme scalaire des équations de l'acoustique. On en déduit que le membre de droite de (28) est un $O(\Delta^2)$, donc que l'approximation de l'équation de la masse (18) est en fait précise à l'ordre 2 :

$$(30) \qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = O(\Delta^2).$$

- on applique la même méthodologie à la relation (19), sachant que

$$\frac{1}{2}(J_{j+1} + J_{j-1}) = J_j + \frac{1}{2}\Delta x^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + O(\Delta^4).$$

Il vient

$$J_j^n + \Delta t \frac{\partial J}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2}\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + O(\Delta^3) =$$

$$= J_j^n + \frac{1}{2}\Delta x^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} - \frac{2}{\lambda}\Delta x \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x} + O(\Delta^3)$$

On retranche J_j^n et on divise par Δt :

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + \frac{\Delta x}{2}\lambda \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} - 2\frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x} + O(\Delta^2)$$

$$= -\frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + \frac{\Delta x}{2}\lambda\frac{\partial^2 J}{\partial x^2} - \left[\alpha\lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + \right.$$

$$\left. + \left(1 - \frac{1}{s}\right)\lambda^2 \Delta t (1-\alpha)\frac{\partial^2 J}{\partial x^2}\right] + O(\Delta^2)$$

or, compte tenu de (18) et (21), on a

$$\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial t}\left(-\alpha\lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}\right) + O(\Delta) \qquad \text{cf (21)}$$

$$= -\alpha\lambda^2 \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right) + O(\Delta)$$

$$= \alpha\lambda^2 \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial J}{\partial x}\right) + O(\Delta) \qquad \text{cf (18)}$$

(31) $$\frac{\partial^2 J}{\partial t^2} - \alpha\lambda^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} = O(\Delta),$$

nouvelle forme scalaire de l'équation des ondes. On tire alors du calcul précédent

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \alpha\lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = -\frac{\Delta t}{2}\alpha\lambda^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\lambda^2 \Delta t \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + \left(\frac{1}{s}-1\right)\lambda^2 \Delta t\,(1-\alpha)\frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + O(\Delta^2)$$

$$= \lambda^2 \Delta t \frac{\partial^2 J}{\partial x^2}\left(\frac{1}{2}(1-\alpha) + \left(\frac{1}{s}-1\right)(1-\alpha)\right) + O(\Delta^2)$$

$$= \lambda^2 \Delta t\,(1-\alpha)\frac{\partial^2 J}{\partial x^2}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{s}-1\right) + O(\Delta^2)$$

$$= \left(\frac{1}{s}-\frac{1}{2}\right)\lambda^2 \Delta t\,(1-\alpha)\frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + O(\Delta^2),$$ soit

(32) $$\frac{\partial J}{\partial t} + \alpha\lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = \sigma\lambda^2 \Delta t\,(1-\alpha)\frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + O(\Delta^2)$$

(33) $$\sigma = \frac{1}{s} - \frac{1}{2}$$ <u>coefficient de Hénon</u>.

Le système (30)(32) décrit l'acoustique dissipative, avec une dissipation $\mu = \sigma\lambda^2 \Delta t\,(1-\alpha)\frac{\partial^2 J}{\partial x^2}$.

Paris, 13 novembre 2012. Dubois.