le cnam

Introduction aux schémas de Boltzmann sur réseau

Paris, 2012 - 2013

Cours 03

Schéma de Boltzmann D1Q3 en thermique

François Dubois

décembre 2012, 6 pages

. CSI, dec 2012

Schéma de Boltzmann D1Q3 en thermique

- L'algorithme est essentiellement décrit dans le document relatif à l'acoustique. On a des moments (ρ, J, ε) fonctions des densités de particules (f_+, f_0, f_-) :

$$(1) \quad \begin{cases} \rho = f_+ + f_0 + f_- \\ J = \lambda (f_+ - f_-) \\ \varepsilon = \frac{\lambda^2}{2} (f_+ + f_-) . \end{cases}$$

Maintenant, on n'a qu'un seul moment conservé, la "densité" ρ. Les valeurs d'équilibre de J et ε sont données typiquement par

$$(2) \quad J^{eq} = \lambda v \rho \, , \quad \varepsilon^{eq} = \frac{\lambda^2}{2} \alpha \rho \; ; \lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t} .$$

L'impulsion et l'énergie relaxent vers leurs valeurs d'équilibre selon une extrapolation (ou une interpolation) à partir des valeurs courantes :

$$(3) \quad \begin{cases} J^* = J + s \, (J^{eq} - J) \, , \quad s > 0 \\ \varepsilon^* = \varepsilon + \tilde{s} \, (\varepsilon^{eq} - \varepsilon) \, , \quad \tilde{s} > 0 . \end{cases}$$

- on évalue les densités de particules après relaxation par résolution de (1) "étoilé"; il vient

$$(4) \quad \begin{cases} f_+^* = \frac{1}{2\lambda} J^* + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2} \\ f_0^* = \rho - \frac{2}{\lambda^2} \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2} \\ f_-^* = -\frac{J^*}{2\lambda} + \frac{\varepsilon^*}{\lambda^2} \end{cases}$$

- L'évolution en temps consiste à suivre la méthode des caractéristiques:

$$(5) \quad \begin{cases} (f_+)_j^{n+1} = (f_+^*)_{j-1}^n \\ (f_0)_j^{n+1} = (f_0^*)_j^n \\ (f_-)_j^{n+1} = (f_-^*)_{j+1}^n \end{cases}$$

- On peut exprimer ρ, J, ε au nouvel instant en fonction des valeurs étoilées à l'instant courant. Le calcul a été fait pour l'acoustique. Il conduit à

$$(6) \quad \rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{1}{2\lambda}\left(J_{j+1}^* - J_{j-1}^*\right)^n + \frac{1}{\lambda^2}\left(\varepsilon_{j+1}^* - 2\varepsilon_j^* + \varepsilon_{j-1}^*\right)^n$$

$$(7) \quad J_j^{n+1} = \frac{1}{2}\left(J_{j+1}^* + J_{j-1}^*\right)^n - \frac{1}{\lambda}\left(\xi_{j+1}^* - \varepsilon_{j-1}^*\right)^n$$

$$(8) \quad \xi_j^{n+1} = \frac{1}{2}\left(\xi_{j+1}^* + \xi_{j-1}^*\right)^n - \frac{\lambda}{4}\left(J_{j+1}^* - J_{j-1}^*\right)^n.$$

• On déduit des conditions $s>0$ et $\tilde{s}>0$ dans (3) les relations

$$(9)\quad \begin{cases} J = J^{eq} + O(\Delta) = \lambda v \rho + O(\Delta) \\ J^* = J^{eq} + O(\Delta) = \lambda v \rho + O(\Delta) \end{cases}$$

$$(10)\quad \begin{cases} \mathcal{E} = \mathcal{E}^{eq} + O(\Delta) = \frac{\lambda^2}{2}\alpha\rho + O(\Delta) \\ \mathcal{E}^* = \mathcal{E}^{eq} + O(\Delta) = \frac{\lambda^2}{2}\alpha\rho + O(\Delta). \end{cases}$$

• On développe (6) au premier ordre:

$$\rho_j^n + \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t} + O(\Delta^2) = \rho - \frac{1}{2\lambda}\left[2\Delta x \frac{\partial}{\partial x}(\lambda v \rho) + O(\Delta^2)\right] + O(\Delta^2)$$

et $\dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \lambda \dfrac{\partial}{\partial x}(v\rho) = O(\Delta)$

Donc avec $v =$ constante,

$$(11)\qquad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \lambda v \frac{\partial \rho}{\partial x} = O(\Delta)$$

• On affine le développement (9) et (10) de J^* et $\mathcal{E}^*$.
D'après la relation (7),

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

et $J_j^* - J_j^n = -s(J - J^{eq})$

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

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

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

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

on en déduit un développement analogue pour J^* :

$$J^* = J + s\,(\lambda v \rho - J)$$

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

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

• on a aussi la dérivée seconde de la variable conservée :

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

$$= -\lambda v \frac{\partial}{\partial x}\left(-\lambda v \frac{\partial \rho}{\partial x}\right) + O(\Delta)$$

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

• On développe la relation (6) à l'ordre 2 :

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n + \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta t^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + O(\Delta^3)$$

$$= \rho_j^n - \frac{1}{2\lambda}\left[2\Delta x \frac{\partial J^*}{\partial x} + O(\Delta^3)\right] + \frac{\Delta x^2}{\lambda^2}\frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2} + O(\Delta^4)$$

$$= \rho_j^n - \frac{\Delta x}{\lambda}\frac{\partial}{\partial x}\left[\lambda v \rho + \left(1 - \frac{1}{s}\right)\lambda^2 \Delta t (\alpha - v^2)\frac{\partial \rho}{\partial x} + O(\Delta^2)\right]$$
$$+ \frac{1}{\lambda^2}\Delta x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{\lambda^2}{2}\alpha \rho\right) + O(\Delta^4).$$

D'où

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

on pose

(15) $\quad \sigma = \dfrac{1}{s} - \dfrac{1}{2}$.

alors l'équation équivalente du schéma à l'ordre 2 s'écrit

(16) $\quad \dfrac{\partial \rho}{\partial t} + \lambda v \dfrac{\partial \rho}{\partial x} - \Delta t\, \lambda^2 (\alpha - v^2)\, \sigma \dfrac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = O(\Delta^2)$

on a une équation d'advection-diffusion de la forme

(17) $\quad \left(\dfrac{\partial}{\partial t} + a\dfrac{\partial}{\partial x} - \mu \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}\right)\psi(x,t) = 0$

avec

(18) $\quad a = \lambda v, \quad \mu = \lambda^2(\alpha - v^2)\,\sigma \Delta t$

Si μ est fixé, si on change Δt en $\Delta t/2$, le produit $\sigma\Delta t$ doit être maintenu constant. Le nouveau paramètre s' satisfait donc à

(19) $\quad \left(\dfrac{1}{s'} - \dfrac{1}{2}\right)\dfrac{1}{2} = \left(\dfrac{1}{s} - \dfrac{1}{2}\right)$.

Dubois 14/12/12.