



**Introduction
aux schémas de Boltzmann
sur réseau**

Mathématiques Appliquées et Calcul Scientifique

14 mars 2017

François Dubois

Introduction aux schémas de Boltzmann sur réseau

François Dubois
14 mars 2017

① Quelques mots sur l'équation de Boltzmann.

- En mécanique des milieux continus, on représente l'espace-temps comme un continuum (x, t) (avec $x \in \mathbb{R}^3$ et $t \in \mathbb{R}$) et les grandeurs physiques comme la densité de masse, d'impulsion ou d'énergie comme des fonctions de l'espace et du temps. Les inconnues d'un problème de dynamique des gaz sont la densité $\rho(x, t)$, l'impulsion $J(x, t)$ avec $J \equiv \rho u$ [u est la vitesse du milieu] et l'énergie $E(x, t)$. C'est une approche macroscopique caractéristique des sciences de l'ingénieur.
- Une approche microscopique de la physique suppose au contraire que la matière est constituée de constituants indiscutables qui interagissent entre eux lors de collisions ponctuelles.

2

Entre deux collisions, les billes, les particules suivent des lignes droites sans interaction avec le reste du monde. Lors de la collision de deux molécules, la masse totale, l'impulsion totale et l'énergie totale du système est conservée. Dans une collision élastique, les masses individuelles des composants sont conservées, l'impulsion est transférée d'une particule à l'autre ainsi que l'énergie cinétique correspondante.

- A la fin du 19^e siècle, Boltzmann propose une vision intermédiaire entre le macro et le microscopique, nommée mésoscopique depuis. Autour d'un point x de \mathbb{R}^3 , dans le volume infinitésimal (d'un point de vue macroscopique) dx , les particules sont animées de nombreuses vitesses différentes. On renonce à les décrire individuellement et on introduit un espace de toutes les vitesses ; dans le petit volume dx en vitesse, et le petit volume dv en espace coexistent une masse dm . La densité de masse $f(x, v, t)$ permet de décrire la masse dm autour du point x et de la vitesse v :

$$(1) \quad dm = f(x, v, t) dx dv.$$

Rappelons que dx est un élément de volume de l'espace \mathbb{R}^3 et dv un élément de volume dans l'espace des vitesses, lui aussi modélisé par l'espace \mathbb{R}^3 . La fonction $f(x, v, t)$ est appelée distribution de vitesse au point x et à l'instant t . Quand on intègre f sur toutes les vitesses, on trouve la masse volumique $\rho(x, t)$:

$$\int_{v \in \mathbb{R}^3} dm = \int_{v \in \mathbb{R}^3} f dx dv = dx \int_{\mathbb{R}^3} f dv = \rho dx, \text{ avec}$$

$$(2) \quad \rho(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(x, v, t) dv.$$

- A l'équilibre thermodynamique, la distribution de vitesse suit une loi de Gauss (ou de Maxwell Boltzmann):

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

La vitesse $u(x, t)$ est associée au premier moment de f^{eq} :

$$(3) \quad (\rho u)(x, t) = \int_{\mathbb{R}^3} v \cdot f^{eq}(x, v, t) dv$$

et le paramètre β est défini par

$$\beta = \frac{\mu}{k_B T(x, t)}$$

où μ est la masse d'une molécule microscopique, k_B la constante de Boltzmann, quotient de

la constante R des gaz parfaits par le nombre d'Avogadro $N \approx 6 \cdot 10^{23}$, et $T(x,t)$ la température locale. L'écart type de la gaussienne ci-dessus est de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{\beta}}$ (exercice!).

Le paramètre β est également relié au second moment de f^{eq} . A partir de β , on a la température, donc (pour un gaz parfait au moins) l'énergie mienne $e = cvT$, donc l'énergie totale volumique $\rho E = \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \rho e$. De plus, ρE est le second moment de f^{eq} .

$$(4) \quad \rho E = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 f^{eq}(x,v,t) dv.$$

- Nous retenons que l'équilibre thermodynamique est paramétré localement ($\alpha(x,t)$ fixé) par trois moments de masse, impulsion et énergie:

$$(5) \quad f^{eq} = G(\rho, \rho u, \rho E).$$

- L'évolution dynamique de la fonction de distribution suit l'équation de Boltzmann

$$(6) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = Q(f).$$

Le second membre $Q(f)$ s'obtient en analysant les collisions microscopiques. En général, ces collisions conservent la masse, l'impulsion et l'énergie. Quand on fait une analyse statistique de ces collisions, on peut montrer que le moyen de collision $Q(f)$ a ses trois premiers moments égaux à zéro:

$$(7) \int_{\mathbb{R}^3} Q(f) dv = 0, \int_{\mathbb{R}^3} v \cdot Q(f) dv = 0, \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v|^2}{2} Q(f) dv = 0.$$

Le résultat de la dynamique collisionnelle $\frac{df}{dt} = Q(f)$ est que f converge extrêmement vite vers f^{eq} ; cette relaxation conduit à l'équilibre thermodynamique qui satisfait à l'annulation globale des collisions:

$$(8) \quad Q(f^{eq}) = 0.$$

- Le membre de gauche de (6) décrit le transport sans collision des particules microscopiques. Dans le cas où on ne considère pas le terme $Q(f)$, l'équation de Boltzmann (6) s'écrit simplement

$$(9) \quad \frac{\partial f}{\partial t}(x, v, t) + v \cdot \nabla_x f(x, v, t) = 0.$$

C'est une simple équation d'advection où v joue simplement le rôle d'un paramètre.

La méthode des caractéristiques montre
facilement qu'une solution de (9) satisfait à
la relation 6

$$(10) f(x, v, t) = f(x - vt, v, 0)$$

qui exprime qu'en absence de collision, il y a
propagation de la densité f à la vitesse v .

- Une conséquence des contraintes (7) est qu'il est
utile d'introduire les moments ρ , J et ρE même
si on n'est pas à l'équilibre thermodynamique;
on a la relation (2) et de façon très générale,
on a aussi

$$(11) J = \rho u = \int_{\mathbb{R}^3} v \cdot f(v) dv$$

$$(12) \rho E = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 f(v) dv.$$

Dans les relations (11) et (12), ce n'est plus f à
l'équilibre, mais la distribution f que l'on
considère. Si on multiplie successivement l'équation
de Boltzmann par 1, v et $|v|^2/2$ et qu'on inté-
gre ensuite sur toutes les vitesses de \mathbb{R}^3 , on obtient
des lois de conservation pour les grandeurs
introduites en (2), (11) et (12):

$$(13) \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} J = 0, \\ \frac{\partial J_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} v_j v_k f(x, v, t) dv \right\} = 0, \quad 1 \leq j \leq 3, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div} \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 v f(x, v, t) dv \right\} = 0. \end{cases}$$

Après développement de f autour de l'équilibre (méthode de Chapman-Enskog) les relations (13) conduisent aux équations de Navier-Stokes.

- On insiste ici sur le caractère extrêmement rapide du retour à l'équilibre thermodynamique. Dans l'essentiel des situations utiles pour les applications, la distribution f est très proche de la distribution d'équilibre. On a le schéma suivant:

$$\begin{cases} f \mapsto \rho, \rho u, \rho E \text{ avec (2)/(11)/(12)} \\ (\rho, \rho u, \rho E) \mapsto f^{eq} \text{ avec (5)}. \end{cases}$$

A toute distribution f , on peut associer une distribution d'équilibre f^{eq} via une fonctionnelle en général très fortement non linéaire dans l'espace des vitesses. Comme f relaxe ensuite très vite vers une distribution à l'équilibre, Bhatnagar, Gross et Krook en proposent de

remplacer $Q(f)$ par son développement au premier ordre autour de f^{eq} (on suppose bien sûr $f \rightarrow Q(f)$ fonction différentiable!);

$$(14) \quad Q(f) \simeq Q(f^{eq}) + S^{eq} \cdot (f - f^{eq}).$$

En toute rigueur, $S^{eq} = dQ(f^{eq})$, opérateur dérivé de $Q(f)$. Dans les applications, S^{eq} est un simple opérateur diagonal proportionnel à l'identité: $S^{eq} \simeq -\frac{1}{\tau} \text{Id}$, avec $\tau > 0$ constante de temps très petite à l'échelle macroscopique. Compte tenu de (8), le premier terme du membre de droite de (14) est nul. On obtient alors le système "Boltzmann-BGK", composé de (6) avec (14), c'est à dire

$$(15) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = S^{eq} \cdot (f - f^{eq}),$$

où, comme expliqué plus haut f^{eq} est une fonctionnelle de f définie par les relations (2), (11), (12) et la relation d'équilibre (5).

- o Si on néglige le terme d'advection $v \cdot \nabla_x f$ dans (15) et qu'on fait le choix simple $S^{eq} = -\frac{1}{\tau} \text{Id}$, une solution heuristique de (15) peut s'écrire $f(t) = f^{eq} + \exp(-\frac{t}{\tau}) (f - f^{eq})|_{t=0}$ qui explicite le comportement de la distribution f . Dès que $t \gg \tau$, $f \simeq f^{eq}$, l'équilibre thermodynamique.

- Une approximation d'une autre nature consiste à simplifier le choix de l'espace des vitesses. au lieu de considérer $v \in \mathbb{R}^3$, on se donne un ensemble fini de q vitesses discrètes. On réduit ainsi considérablement la complexité de la résolution numérique de l'équation de Boltzmann.

Pour résoudre l'équation (6) par différences finies, on doit mailler l'espace de configuration $\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3$. Si on met 100 mailles le long d'une arête, on se retrouve avec $(10^2)^6 = 10^{12} =$ mille milliards de mots en mémoire. Avec des vitesses discrètes, on remplace (6) par

$$(6) \quad \frac{\partial f_j}{\partial t} + \frac{v_j}{j} \cdot \nabla_x f_j = Q_j(f), \quad 0 \leq j \leq q-1$$

où $f = (f_0, \dots, f_{q-1}) \in \mathbb{R}^q$ est un simple vecteur et non une fonction $\mathbb{R}^3 \ni v \mapsto f(v) \in \mathbb{R}$.

Avec $q \approx 10$ et 100 mailles, on a maintenant besoin de $(100)^3 \times 10 = 10^7 = 10$ millions de mailles, ce qui est tout à fait raisonnable avec les machines actuelles.

- Dans la suite, nous cherchons à approcher numériquement un système "Boltzmann-BGK à vitesses discrètes".

On se donne des vitesses v_j fixées dans \mathbb{R}^d , avec $d = 1, 2, \text{ ou } 3$. On dispose de q vitesses, ce qui fixe le nom "Dd Qq" pour un tel modèle. Les inconnues sont les distributions $f_j(x,t)$ pour les diverses vitesses v_j . A partir des f_j , on forme les deux premiers moments:

$$(17) \quad \rho = \sum_{j=0}^{q-1} f_j, \quad J^\alpha = \sum_{j=0}^{q-1} \frac{v_j^\alpha}{j} f_j, \quad 1 \leq \alpha \leq d.$$

[On ne considère pas en général l'énergie PE dans les applications opérationnelles pour les schémas de Boltzmann sur réseau].

On se donne q fonctions non-linéaires $G_j(\rho, J)$ (de $(d+1)$ variables) afin d'adapter (5) au cas des vitesses discrètes:

$$(18) \quad f_j^{eq} \equiv G_j(\rho, J), \quad 0 \leq j \leq q-1.$$

On se donne aussi un champ de matrices $S^{eq} = S(\rho, J)$ carrés d'ordre q . Alors le second membre $Q_j(f)$ de (16) est choisi ainsi:

$$(19) \quad Q_j(f) = \sum_{k=0}^{q-1} S_{jk}^{eq} (f_k - f_k^{eq}).$$

Le système (16)(17)(18)(19) est un problème d'équations aux dérivées partielles couplées, système "Boltzmann-BGK à vitesses discrètes", ou plus simplement "lattice Boltzmann Equation".

② algorithme d'un schéma D1Q3.

11

- La dénomination D1Q3 signifie qu'on se situe à une dimension spatiale, avec trois vitesses discrètes. On se donne un pas d'espace $\Delta x > 0$ et une grille $\mathbb{Z} \Delta x$; un point x de la grille (ou du réseau) est de la forme $k\Delta x$, avec $k \in \mathbb{Z}$. On se donne également un pas de temps $\Delta t > 0$ qui engendre une famille de temps discrets $t = n\Delta t$ avec $n \in \mathbb{N}$.
- A partir de Δx et Δt , on forme la vitesse λ du réseau:

$$(20) \quad \lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}.$$

on suppose λ fixé dans toute la suite de la minivie. Les trois vitesses du réseau sont construites à partir de λ . On adopte ici une numérotation spécifique:

$$(21) \quad v_- = -\lambda, \quad v_0 = 0, \quad v_+ = \lambda.$$

- Le champ inconnu est la distribution de densité de particules $f_-(x,t)$, $f_0(x,t)$, $f_+(x,t)$ de vitesses respectives v_- , v_0 et v_+ , pour x point du réseau (de la forme $k\Delta x$, $k \in \mathbb{Z}$) et

t temps discret (de la forme $n\Delta t, n \in \mathbb{N}$).

12

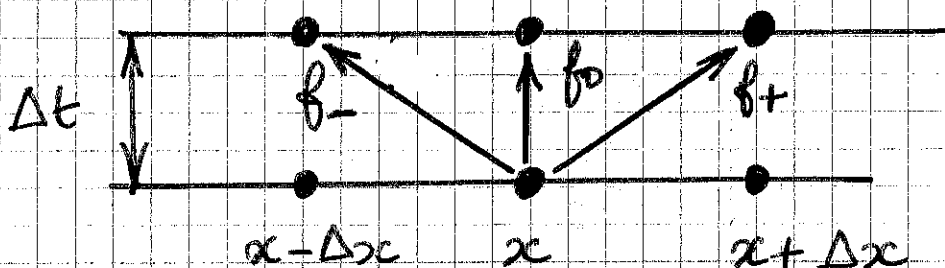


Figure 1. Transport de particules à vitesses discrètes sur le réseau D1Q3.

- on décrit maintenant l'algorithme qui permet de passer de $\{f_-(x,t), f_0(x,t), f_+(x,t), x \in \mathbb{Z}\Delta x\}$ à t fixé à l'ensemble analogue à l'instant suivant $t + \Delta t$. En d'autres termes, comment calculer $f_-(x, t + \Delta t)$, $f_0(x, t + \Delta t)$ et $f_+(x, t + \Delta t)$ en fonction des $f_{0,\pm}(y, t)$ à l'instant t pour tous les y de la forme $l\Delta x$? L'idée est d'appliquer une approche de directions alternées à l'équation à vitesses discrètes (16). Partant de tous les $f(x,t)$, on calcule $f^*(x,t)$ après résolution en temps entre t et $t + \Delta t$ de l'équation qui décrit les collisions:

$$(22) \quad \frac{df_j}{dt} = Q_j(f).$$

Puis à partir de $f^*(x,t)$, on calcule $f(x, t + \Delta t)$ par résolution de l'équation d'advection.

$$(23) \quad \frac{\partial f_j}{\partial t} + v_j \cdot \nabla f_j = 0$$

• l'étape de collision et locale et en général non linéaire. Ici, nous n'abordons qu'un modèle très simple et la supposons également linéaire. Elle s'exprime bien dans les moments m de la distribution f . on pose avant tout

$$(24) \quad f = \begin{pmatrix} f_- \\ f_0 \\ f_+ \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3.$$

Puis on construit les deux premiers moments, conservés, comme au paragraphe précédent:

$$(25) \quad \begin{cases} p = f_- + f_0 + f_+ \\ J = -\lambda f_- + \lambda f_+ \\ E = \lambda^2 f_- - 2\lambda^2 f_0 + \lambda^2 f_+ \end{cases}$$

et le troisième de sorte que si on pose $m \equiv \begin{pmatrix} p \\ J \\ E \end{pmatrix}$, la matrice M de passage entre f et m :

$$(26) \quad m = M f$$

a ses lignes orthogonales deux à deux. Compte tenu de (24), on a en effet, pour ce choix de moments,

$$(27) \quad M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\lambda & 0 & \lambda \\ \lambda^2 & -2\lambda^2 & \lambda^2 \end{pmatrix}.$$

- La matrice M est inversible ; si on résout le système (24) où (ρ, J, E) sont maintenant supposés connus, on a facilement

$$\begin{cases} f_- + f_0 + f_+ = \rho \\ -f_- + f_+ = J/\lambda \\ f_- - 2f_0 + f_+ = E/\lambda^2 \end{cases}.$$

on en déduit

$$\begin{cases} 3f_0 = \rho - E/\lambda^2 \\ 3(f_+ + f_-) = 2\rho + E/\lambda^2 \\ f_+ - f_- = J/\lambda \end{cases}$$

Donc

$$(28) \quad \begin{cases} f_- = \frac{1}{3}\rho - \frac{1}{2\lambda}J + \frac{1}{6}\frac{E}{\lambda^2} \\ f_0 = \frac{1}{3}\rho - \frac{E}{3\lambda^2} \\ f_+ = \frac{1}{3}\rho + \frac{1}{2\lambda}J + \frac{1}{6}\frac{E}{\lambda^2} \end{cases}$$

soit

$$(29) \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{6\lambda^2} \\ \frac{1}{3} & 0 & -\frac{1}{3\lambda^2} \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{6\lambda^2} \end{pmatrix}.$$

- Une fois dans la représentation des moments (ρ, J, E) , on détermine d'abord un état à l'équilibre. Nous choisissons ici

$$(30) \quad \rho^{eq} = \rho, \quad J^{eq} = J, \quad E^{eq} = \alpha \lambda^2 \rho$$

où α est un coefficient sans dimension. Les moments ρ et J sont dits à l'équilibre, alors que E va relaxer vers cette valeur d'équilibre.

- La relaxation (22) est écrite dans l'espace des moments :

$$(31) \quad \frac{dm}{dt} = M Q (M^{-1} m)$$

Elle s'écrit de façon très simple pour les moments à l'équilibre :

$$(32) \quad \frac{d\rho}{dt} = 0, \quad \frac{dJ}{dt} = 0.$$

Pour l'énergie, on adopte un modèle linéaire de relaxation :

$$(33) \quad \frac{d}{dt} (E - E^{eq}) + \frac{1}{\tau} (E - E^{eq}) = 0.$$

La solution exacte de (33) s'écrit

$$E(t) = E^{eq} + \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) E(0) \quad t > 0$$

où $E(0)$ est en fait E à l'instant t . On s'intéresse à E pour $t = \Delta t$ et on se

continue d'écrire un schéma explicite pour l'équation différentielle (33), avec ε^* la valeur de ε au temps Δt à l'issue de cette étape. On a donc

$$\frac{1}{\Delta t} (\varepsilon^* - \varepsilon) + \frac{1}{\tau} (\varepsilon - \varepsilon^{eq}) = 0,$$

soit

$$(34) \quad \varepsilon^* = \varepsilon + \frac{\Delta t}{\tau} (\varepsilon^{eq} - \varepsilon).$$

- Dans la pratique, on note λ le paramètre sans dimension $\Delta t / \tau$:

$$(35) \quad \lambda = \frac{\Delta t}{\tau}.$$

- A l'issue de cette étape, on dispose de m^* tel que

$$(36) \quad m^* = \begin{pmatrix} \rho \\ J \\ \varepsilon^* \end{pmatrix},$$

avec ε^* calculé aux relations (34) et (35).

- on repasse aux distributions de particules en inversant la relation (26):

$$(37) \quad f^* = M^{-1} m^*.$$

- L'étape d'advection est linéaire et couple les points voisins sur le réseau. On résout l'advection (33) pour les diverses vitesses et avec comme condition initiale le champ f^* obtenu à l'issue de l'étape de collision. Il vient alors

$$(38) \quad f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \cdot \Delta t, t).$$

Dans le cas du schéma D1Q3, ces relations s'écrivent

$$(39) \quad \left\{ \begin{array}{l} f_-(x, t + \Delta t) = f_-^*(x + \Delta x, t) \\ f_0(x, t + \Delta t) = f_0^*(x, t) \\ f_+(x, t + \Delta t) = f_+^*(x - \Delta x, t) \end{array} \right.$$

- L'algorithme de ce schéma D1Q3 peut se synthétiser de la façon suivante:

initialisation: $f(x, t)$.

Puis $m = Mf$, d'où (ρ, J, E) en tout point x .

Relaxation de l'énergie $E^* = E + \lambda(E^{eq} - E)$, soit

$$E^* = E + \lambda(\alpha \Delta^2 \rho - E)$$

Distribution f^* après relaxation.

$$(40) \begin{cases} f_-^* = \frac{1}{3} p - \frac{1}{2\lambda} J + \frac{1}{6} \frac{E^*}{\lambda^2} \\ f_0^* = \frac{1}{3} p - \frac{E^*}{3\lambda^2} \\ f_+^* = \frac{1}{3} p + \frac{1}{2\lambda} J + \frac{1}{6} \frac{E^*}{\lambda^2} \end{cases}$$

18

Adirection :

$$\begin{cases} f_-(x, t + \Delta t) = f_-^*(x + \Delta x, t) \\ f_0(x, t + \Delta t) = f_0^*(x, t) \\ f_+(x, t + \Delta t) = f_+^*(x - \Delta x, t) \end{cases}$$

puis retour à l'étape d'initialisation.

③ Equations aux dérivées partielles équivalentes.

L'analyse qui suit permet de montrer formellement que si Δx et Δt tendent vers 0 tout en gardant fixe la vitesse $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ du réseau, alors les moments coupés suivent un modèle acoustique linéaire.

- on commence par exprimer tout l'algorithme en terme uniquement des moments.
on déduit de (25), (39) et (40) :

$$(41) \left\{ \begin{aligned} \rho(x, t + \Delta t) &= \rho(x, t) \\ &+ \frac{1}{3} (\rho(x + \Delta x, t) - 2\rho(x, t) + \rho(x - \Delta x, t)) \\ &- \frac{1}{2\lambda} (J(x + \Delta x, t) - J(x - \Delta x, t)) \\ &+ \frac{1}{6\lambda^2} (\varepsilon^*(x + \Delta x, t) - 2\varepsilon^*(x, t) + \varepsilon^*(x - \Delta x, t)) \end{aligned} \right.$$

$$(42) \left\{ \begin{aligned} J(x, t + \Delta t) &= -\frac{\lambda}{3} (\rho(x + \Delta x, t) - \rho(x - \Delta x, t)) \\ &+ J(x, t) + \frac{1}{2} (J(x + \Delta x, t) - 2J(x, t) + J(x - \Delta x, t)) \\ &- \frac{1}{6\lambda} (\varepsilon^*(x + \Delta x, t) - \varepsilon^*(x - \Delta x, t)) \end{aligned} \right.$$

$$(43) \left\{ \begin{aligned} \varepsilon(x, t + \Delta t) &= \frac{\lambda^2}{3} (\rho(x + \Delta x, t) - 2\rho(x, t) + \rho(x - \Delta x, t)) \\ &- \frac{\lambda}{2} (J(x + \Delta x, t) - J(x - \Delta x, t)) \\ &+ \varepsilon^*(x, t) + \frac{1}{6} (\varepsilon^*(x + \Delta x, t) - 2\varepsilon^*(x, t) + \varepsilon^*(x - \Delta x, t)). \end{aligned} \right.$$

- on voit apparaître quelques différences finies bien classiques pour divers champs φ :

$$(44) \left\{ \begin{aligned} \varphi(x + \Delta x) - 2\varphi(x) + \varphi(x - \Delta x) &= \Delta x^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + O(\Delta x^4) \\ \frac{1}{2} (\varphi(x + \Delta x) - \varphi(x - \Delta x)) &= \Delta x \frac{\partial \varphi}{\partial x} + O(\Delta x^3). \end{aligned} \right.$$

- on développe la relation (43) à l'ordre 0 sachant que Δt et Δx sont proportionnels :

$$E + O(\Delta t) = O(\Delta x^2) + O(\Delta x) + E^* + O(\Delta x^2), \text{ soit}$$

$$(45) \quad E^* = E + O(\Delta x).$$

Or E^* est donné en fonction de Δx par (34). Donc

$$(46) \quad \lambda(E^{eq} - E) = O(\Delta x).$$

- Dans la suite, on suppose toujours le coefficient de relaxation λ fixé à une valeur non nulle (sinon l'énergie E ne peut pas relaxer) on peut donc écrire (46) sous la forme

$$(47) \quad E = E^{eq} + O(\Delta x).$$

Compte tenu de (45), on a aussi

$$(48) \quad E^* = E^{eq} + O(\Delta x).$$

- Dans la suite, on s'autorise à dériver les relations (47) et (48) en espace et en temps, alors que nous n'avons pas prouvé que c'est possible. C'est un des points qui limitent l'analyse qui suit à un processus d'abord formel.

Prop ①. Analyse à l'ordre 1.

La densité ρ et l'impulsion J satisfont au modèle acoustique suivant à l'ordre 1 de précision

$$(49) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = O(\Delta x)$$

$$(50) \quad \frac{\partial J}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = O(\Delta x)$$

avec (51) $p = c_0^2 \rho$, $c_0 = \lambda \sqrt{\frac{2+\alpha}{3}}$.

Preuve de la proposition ①

on développe la relation (41) au premier ordre:

$$\begin{aligned} \rho + \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t} + O(\Delta t^2) &= \rho + O(\Delta x^2) \\ &\quad - \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\partial J}{\partial x} \Delta x + O(\Delta x^3) \right) \\ &\quad + \frac{1}{6\lambda^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} (\alpha \lambda^2 \rho) \Delta x^2 + O(\Delta x^4) \right] \end{aligned}$$

on simplifie le ρ présent des deux côtés de l'équation précédente et on divise par Δt :

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

ce qui exprime exactement (49) puisque $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$.

- on développe ensuite la relation (42) au premier ordre:

$$J + \Delta t \frac{\partial J}{\partial t} + O(\Delta t^2) = -\frac{\lambda}{3} \left(2 \frac{\partial \rho}{\partial x} \Delta x + O(\Delta x^3) \right) + J + O(\Delta x^2) - \frac{1}{6\lambda} \left(2 \frac{\partial}{\partial x} (\alpha \lambda^2 \rho) \Delta x + O(\Delta x^3) \right)$$

on soustrait J des deux côtés et on divise par Δt :

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -\frac{2}{3} \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + O(\Delta x) - \frac{1}{3} \alpha \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x}$$

C'est à dire

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \lambda^2 \left(\frac{2}{3} + \frac{\alpha}{3} \right) \frac{\partial \rho}{\partial x} = O(\Delta x),$$

relation qui prouve les relations (50) et (51).
La proposition est établie. \square

- Avant de poursuivre l'étude à l'ordre 2, nous allons préciser l'erreur d'ordre 1 des relations (47) et (48).

Prop 2) Développement de l'énergie à l'ordre 1.

Dans les mêmes conditions que ci-dessus, nous avons

$$(51) \quad E = \alpha \lambda^2 \rho - \frac{1}{2} \lambda \Delta x (1 - \alpha) \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x^2)$$

$$(52) \quad E^* = \alpha \lambda^2 \rho + \left(1 - \frac{1}{2}\right) \lambda \Delta x (1 - \alpha) \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x^2)$$

Preuve de la proposition (2)

23

en reprenant la relation (43), en la développant cette fois à l'ordre 1 :

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

D'où

$$\begin{aligned} \lambda(E - E^{eq}) &\equiv E - E^* = -\Delta t \frac{\partial E^{eq}}{\partial t} - \lambda \Delta x \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x^2) \\ &= -\Delta t \alpha \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} - \lambda \Delta x \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x^2) \\ &= \alpha \lambda \Delta x \frac{\partial J}{\partial x} - \lambda \Delta x \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x^2) \\ &= -\lambda(1-\alpha) \Delta x \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x) \end{aligned}$$

et la relation (51) en résulte.

• Pour E^* , on a

$$\begin{aligned} E^* &= (1-\sigma)E + \sigma E^{eq} \\ &= E^{eq} + (1-\sigma) \left[-\frac{\lambda \Delta x (1-\alpha)}{\sigma} \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x^2) \right] \\ &= E^{eq} + \left(1 - \frac{1}{\sigma}\right) \lambda \Delta x (1-\alpha) \frac{\partial J}{\partial x} + O(\Delta x^2) \end{aligned}$$

ce qui est exactement (52). \square

Prop 3 Analyse à l'ordre 2.

24

La densité ρ et l'impulsion J satisfont au modèle diffusif suivant à l'ordre 2 de précision:

$$(53) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = O(\Delta x^2)$$

$$(54) \quad \frac{\partial J}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\lambda \Delta x}{3} (1-d) \left(\frac{1}{S} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} = O(\Delta x^2)$$

- Avec Michel Hénon (en 1987), on peut introduire le paramètre σ

$$(55) \quad \sigma = \frac{1}{S} - \frac{1}{2}$$

Alors la viscosité μ du modèle (54) s'écrit

$$(56) \quad \mu = \frac{\lambda}{3} \Delta x (1-d) \sigma.$$

Elle est positive pour $d < 1$ et $\sigma > 0$. On remarque que la condition $\sigma > 0$, jointe à $\lambda > 0$ exprime une limite pour le pas de relaxation:

$$(57) \quad \lambda < 2.$$

- Preuve de la proposition 3.

On dérive d'abord en temps les équations

du modèle (49)(50) à l'ordre 1:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(- \frac{\partial J}{\partial x} \right) + O(\Delta x) \\ &= - \frac{\partial}{\partial x} \left[- \frac{\alpha+2}{3} \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] + O(\Delta x) \end{aligned}$$

$$(58) \quad \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \frac{\alpha+2}{3} \lambda^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} = O(\Delta x).$$

d'acoustique satisfait à l'équation des ondes.

• on a aussi

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(- \frac{\alpha+2}{3} \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) + O(\Delta x) \\ &= - \frac{\alpha+2}{3} \lambda^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(- \frac{\partial J}{\partial x} \right) + O(\Delta x) \end{aligned}$$

$$(59) \quad \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} - \frac{\alpha+2}{3} \lambda^2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} = O(\Delta x).$$

• on développe la relation (41) à l'ordre 2:

$$\begin{aligned} \rho + \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) &= \\ \rho + \frac{\Delta x^2}{3} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\Delta x^4) - \frac{1}{\lambda} \frac{\partial J \Delta x}{\partial x} + O(\Delta x^3) &+ \\ + \frac{1}{6} \lambda^2 \Delta x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\alpha \lambda^2 \rho) + O(\Delta x^4). & \end{aligned}$$

Après division par Δt et utilisation de (58),

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \lambda^2 \frac{\alpha+2}{3} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\Delta t^2) &= \lambda \frac{\Delta x}{3} \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \\ - \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{1}{6} \lambda \Delta x \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + O(\Delta x^2). & \end{aligned}$$

Tous les termes en $\frac{\partial \rho}{\partial x^2}$ s'éliminent et la relation (53) en résulte.

- on développe maintenant la relation (42) au second ordre:

$$J + \Delta t \frac{\partial J}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) = -\frac{2}{3} \lambda \Delta x \frac{\partial \rho}{\partial x} + O(\Delta x^3) \\ + J + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + O(\Delta x^4) - \frac{1}{3\lambda} \Delta x \frac{\partial E^*}{\partial x} + O(\Delta x^3).$$

D'où après division par Δt et prise en compte de l'équation d'onde (59):

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \left(\lambda^2 \alpha + 2 \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} \right) + O(\Delta t^2) = -\frac{2}{3} \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + O(\Delta x^2) \\ + \lambda \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} - \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[\alpha \lambda^2 \rho + \left(1 - \frac{1}{5}\right) \lambda \Delta x (1 - \alpha) \frac{\partial J}{\partial x} \right]$$

compte tenu du développement (52) de E^* .

on fait passer les termes d'ordre 0 en Δx dans le membre de gauche:

$$\frac{\partial J}{\partial t} + \left(\frac{2}{3} + \frac{\alpha}{3} \right) \lambda^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = \lambda \Delta x \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} \left[-\frac{\alpha}{6} - \frac{1}{3} + \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{5}\right) (1 - \alpha) \right] \\ + O(\Delta x^2).$$

on calcule le crochet:

$$[\] = \frac{1}{6} (1 - \alpha) + \frac{1}{3} \left(\frac{1}{5} - 1 \right) (1 - \alpha) \\ = \frac{1 - \alpha}{3} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{5} - 1 \right) = \frac{1 - \alpha}{3} \left(\frac{1}{5} - \frac{1}{2} \right).$$

on a au membre de droite $\lambda \Delta x \frac{1 - \alpha}{3} \sigma \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + O(\Delta x^2)$, ce qui est exactement (54).



④ Conditions aux limites.

27

on peut utiliser l'algorithme DQ3 "tel quel" avec des conditions aux limites périodiques. C'est tout à fait conseillé lors d'une première mise en œuvre pour vérifier qu'aucune erreur ne s'est glissée dans le programme et montrer expérimentalement que les équations (53) (54) sont bien vérifiées pour diverses quilles.

- Dans des applications plus réalistes, on se donne souvent l'impulsion J au bord ou la densité ρ au bord. on en a alors dans la situation de la figure 2: les particules entrantes f_+^* en $x=0$ ne sont pas connues et les particules entrantes f_-^* en $x=L$ sont elles aussi indéterminées.

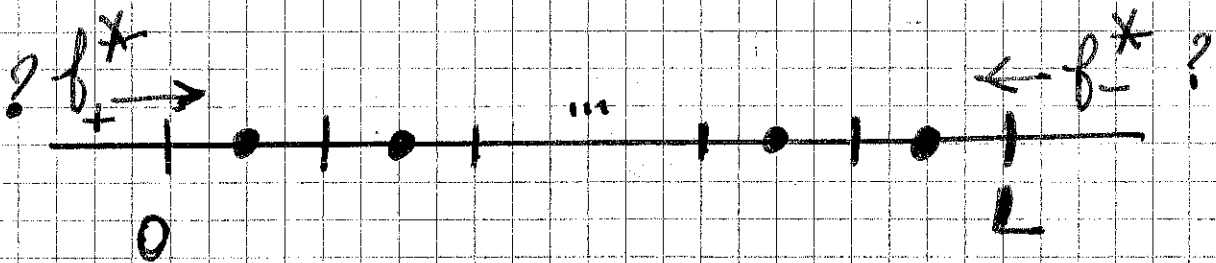


Figure 2. Données manquantes en $x=0$ et $x=L$ pour définir le schéma DQ3 sur un intervalle de longueur finie.

• L'étude faite au paragraphe 3 montre (relation (48)) qu'on a toujours $\epsilon^* = \epsilon^{eq} + O(\Delta x)$, donc $m^* = m^{eq} + O(\Delta x)$ pour les trois moments (ρ, J, E) . Enfin, compte tenu de (37), on en déduit $f^* = f^{eq} + O(\Delta x)$: la distribution de particules après collision est bien approchée par la distribution à l'équilibre. Pour l'écriture des conditions limites les plus usuelles, on se contente de l'approximation $f^* \simeq f^{eq}$. Il est utile d'expliciter cette distribution à l'équilibre:

$$(60) \quad f^{eq} = M^{-1} \begin{pmatrix} \rho \\ J \\ \alpha \rho \Delta^2 \end{pmatrix},$$

soit

$$(61) \quad \begin{cases} f_-^{eq} = \frac{1}{3} \rho - \frac{1}{2\lambda} J + \frac{\alpha}{6} \rho \\ f_0^{eq} = \frac{1}{3} \rho - \frac{\alpha \rho}{3} \\ f_+^{eq} = \frac{1}{3} \rho + \frac{1}{2\lambda} J + \frac{\alpha}{6} \rho \end{cases}$$

• on remarque que

$$(62) \quad f_+^{eq} - f_-^{eq} = \frac{1}{\lambda} J$$

on peut fixer une valeur donnée de l'impulsion J avec une condition de rebond:

en $x=0$:

$$(63) \quad f_+^* = f_-^* + \frac{1}{\lambda} J(0, t),$$

en $x=L$:

$$(64) \quad f_-^* = f_+^* - \frac{1}{\lambda} J(L, t).$$

• De façon analogue, on a

$$(65) \quad f_+^{eq} + f_-^{eq} = \left(\frac{2}{3} + \frac{\alpha}{3} \right) \rho.$$

Si on se donne la pression (ou la densité, qui lui est proportionnelle, cf (51)) au bord, on utilise un anti-rebord:

en $x=0$:

$$(66) \quad f_+^* = -f_-^* + \frac{2+\alpha}{3} \rho(0, t),$$

en $x=L$:

$$(67) \quad f_-^* = -f_+^* + \frac{2+\alpha}{3} \rho(L, t).$$

• Les relations (63), (64), (66) et (67) permettent un calcul explicite des densités particulières entrantes dans le domaine de calcul, et complètent les relations (39).

Jubois

Paris, 4 avril 2017.