

COURS 1

Autour de l'équation de Boltzmann (1)

- Généralités
- Collisions binaires
- Bilan collisionnel
- Forme polaire et espace des moments conservés

Introduction du Schéma de Boltzmann sur Réseau

Cours Master 2^o année

Université Paris-Sud; Juin 2010.

Cours ① Autour de l'équation de Boltzmann

• Généralités

Afin d'étudier les gaz dilués, Ludwig Boltzmann a proposé en 1872 d'introduire une fonction de distribution de particules $f(x, v, t)$. C'est une fonction de $x \in \mathbb{R}^d$ (d désigne la dimension de l'espace, $d=1, 2$ ou 3), de la vitesse $v \in \mathbb{R}^d$, du temps $t \in \mathbb{R}$. Au point x et au temps t , $f(x, v, t)$ représente la densité de particules de vitesse v ; c'est une grandeur essentiellement positive:

$$(1) \quad f(x, v, t) \geq 0, \quad x, v \in \mathbb{R}^d, t \in \mathbb{R}.$$

* Il s'agit d'écrire l'équation aux dérivées partielles satisfaite par cette fonction. Les collisions entre particules (molécules miscibles du point de vue physique) jouent bien entendu

un rôle déterminant et la première approche consiste à supposer qu'il n'y a pas de collision. Alors une particule de vitesse v suit une trajectoire spatiale qui est simplement une droite dirigée par la vitesse v ; on a

$$(2) \quad f(x + v\theta, v, t + \theta) = f(x, v, t), \quad \theta \in \mathbb{R}$$

ou le nombre de particules ayant cette propriété au temps t se transfère au temps $t + \theta$ du point x au point $x + v\theta$. On a alors:

Prop Advection

En absence de collision, la fonction de distribution $f(x, v, t)$ suit, si elle est régulière, une équation d'advection:

$$(3) \quad \frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f = 0, \quad x \in \mathbb{R}^d, v \in \mathbb{R}^d, t \in \mathbb{R}$$

- La preuve consiste simplement à dériver la relation (2) par rapport à θ puis à prendre $\theta = 0$. \square

Nous renvoyons à l'ouvrage de Chapman et Cowling (*Mathematical Theory of Non uniform Gases*) pour les éléments fondamentaux d'analyse des collisions et de dérivation de l'équation de Boltzmann lorsque la vitesse

v appartient au continuum \mathbb{R}^d . Dans la suite de ce cours, nous adoptons le point de vue proposé par Henri Cabannes et René Gatignol dans les années 1970. On introduit un ensemble fini (de cardinal $J+1$, J entier ≥ 0) de vitesses discrètes, noté \mathcal{V} et l'on suppose que v appartient à cet ensemble fini :

$$(4) \quad v \in \mathcal{V} \equiv \{v_0, v_1, \dots, v_J\} \subset \mathbb{R}^d.$$

Avec cette notation, le choix le plus courant est de supposer $v_0 = 0$, mais le formalisme qui suit ne l'impose pas.

* Nous modifions la notation et posons $f_j \equiv f(\cdot, v_j, \cdot)$ pour désigner la densité de particules de vitesses v_j . L'équation d'évolution "libre" (c'est-à-dire en l'absence de collision) (3) s'écrit donc maintenant

$$(5) \quad \frac{\partial f_j}{\partial t} + v_j \cdot \nabla f_j = 0, \quad \left. \begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^d, t \geq 0, \\ 0 \leq j \leq J \end{array} \right\}$$

avec $v \cdot \nabla \equiv v_\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta}$ avec sommation implicite sur β la lettre grecque β qui court de 1 à d , dimension de l'espace.

• Collisions binaires.

L'hypothèse de gaz dilué entraîne que

l'on peut supposer que le seul processus de collision effectif peut s'analyser avec un paradigme du type "collision de deux boules de billard", au niveau microscopique des interactions entre molécules élémentaires (Figure 1).

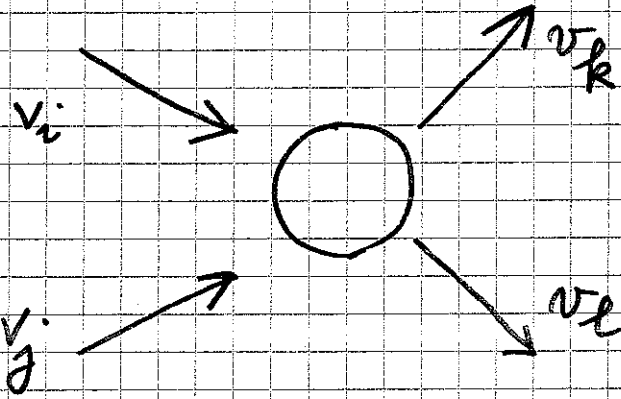


Figure 1. Collision binaire entre vitesses discrètes.

* Deux molécules de vitesses v_i et v_j (avec la restriction $v_i \in D$ et $v_j \in D$ dans ce formalisme à vitesses discrètes) entrent en collision et "resortent" de ce processus avec les vitesses v_k et v_l ($v_k \in D, v_l \in D$).
 on peut noter $(i, j) \rightarrow (k, l)$ une telle collision qui est de fait numérotée avec des indices i, j, k, l entre 0 et J compte tenu du choix (4).
 Avec René Gatiagnol, on note A_{ij}^{kl} la densité de probabilité d'une collision $(i, j) \rightarrow (k, l)$.
 la probabilité d'une collision $(i, j) \rightarrow (k, l)$ au point x et à l'instant t est donnée par

5

$A_{ij}^{kl} f_i f_j$ car elle est avant tout propor-
tionnelle à la densité f_i de f_j
particules de vitesse v_i et à la densité f_j
de particules de vitesse v_j . On a donc
l'hypothèse fondamentale

$$(b) \quad A_{ij}^{kl} \geq 0 \quad (\text{collision } (i,j) \rightarrow (k,l)).$$

* Une collision "microscopique" est décrite
à l'aide des outils classiques de mécanique
du point matériel. D'une part, on suppose
ici toutes les particules identiques. En
effet, si on veut décrire par exemple un
gaz avec deux types de molécules comme
l'air par exemple avec une grande pré-
cision, il est nécessaire d'introduire la fon-
ction de densité de chaque constituant.
Cette modélisation fine a pour effet de
complexifier la modélisation. Ce que nous
ne souhaitons pas pour ce cours d'intro-
duction. On suppose ensuite classiquement
(mais pas toujours ! c'est un des avantages de
cette approche que de pouvoir faire des hy-
pothèses physiques ad hoc en fonction du
contexte) la conservation de la quantité
de mouvement. Entre particules de même
masse, cette relation s'écrit

$$(7) \quad v_i + v_j = v_k + v_l, \text{ collision } (i,j) \rightarrow (k,l). \quad 6$$

Nous observons que la relation (7) est vectorielle puisque les vitesses de \mathcal{V} sont des éléments de \mathbb{R}^d ; il faut donc en pratique l'écrire composante par composante. Elle induit aussi une véritable contrainte cinématique comme illustré Figure 1. Enfin, on peut rajouter à la conservation de l'impulsion (7) la conservation de l'énergie cinétique au cours de la collision. On a alors

$$(8) \quad \frac{1}{2}|v_i|^2 + \frac{1}{2}|v_j|^2 = \frac{1}{2}|v_k|^2 + \frac{1}{2}|v_l|^2$$

dans la collision $(i,j) \rightarrow (k,l)$. Si un quadruplet $(v_i, v_j, v_k, v_l) \in \mathcal{V}^4$ viole l'une des relations (7)(8), la collision $(i,j) \rightarrow (k,l)$ ne peut pas avoir lieu, et $A_{ij}^{kl} = 0$.

* Nous pouvons maintenant énoncer les principales propriétés des collisions. Elles se lisent sur le tenseur A_{ij}^{kl} ; ce sont en fait des hypothèses d'un point de vue mathématique. Nous avons déjà introduit la positivité (6). Nous avons aussi

$$(9) \quad A_{ij}^{kl} = A_{ji}^{kl}, \quad 0 \leq i, j, k, l \leq J$$

qui exprime la symétrie des entrants.

Nous avons aussi la symétrie des sortants:

$$(10) \quad A_{ij}^{kl} = A_{ij}^{lk}, \quad 0 \leq i, j, k, l \leq J.$$

* d'hypothèse suivante en moins intuitive et est illustrée par la figure 2. Il s'agit de l'hypothèse de microréversibilité:

$$(11) \quad A_{ij}^{kl} = A_{kl}^{ij}, \quad 0 \leq i, j, k, l \leq J.$$

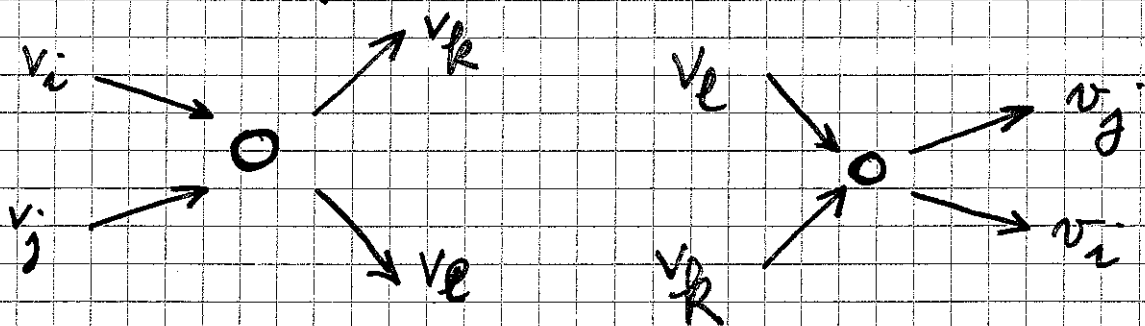


Figure 2. Microréversibilité.

Les collisions $(i, j) \rightarrow (k, l)$ et $(k, l) \rightarrow (i, j)$ ont même amplitude de probabilité (relation (11)). Cette hypothèse finalement peu intuitive exprime l'invariance du système microscopique dans l'inversion des "entrées" et des "sorties", c'est à dire l'invariance du modèle par retournement du temps.

Bilan collisionnel

Nous pouvons préciser comment la densité

de particules de vitesse v - évolue à cause des collisions. On peut d'une part créer une particule de vitesse v_j . Ceci a lieu dans une collision de type $(k, l) \rightarrow (i, j)$ avec une probabilité

$$\sum_{i, k, l} A_{kl}^{ij} f_k f_l$$

puisqu'on doit prendre en compte toutes les collisions qui autorise le système. On peut d'autre part détruire une particule de vitesse v_j avec une collision de la forme $(i, j) \rightarrow (k, l)$; celle-ci a lieu avec une probabilité

$$\sum_{i, k, l} A_{ij}^{kl} f_i f_j$$

* L'évolution $\left(\frac{df_j}{dt}\right)_{col}$ due aux collisions est la simple différence entre les deux expressions précédentes:

$$(12) \quad \left(\frac{df_j}{dt}\right)_{col} = \sum_{i, k, l} (A_{kl}^{ij} f_k f_l - A_{ij}^{kl} f_i f_j).$$

On introduit donc une forme quadratique $Q_j(f, f)$ donnée par le membre de droite de la relation (12):

$$(13) \quad Q_j(f, f) \equiv \sum_{i, k, l} (A_{kl}^{ij} f_k f_l - A_{ij}^{kl} f_i f_j).$$

$0 \leq j \leq J$

* d'équation de Boltzmann discrète
 (obtenue par K. Gatiqnel; nous renvoyons à
 la monographie "Théorie cinétique des gaz à
 répartition discrète de vitesses" Springer, 1975)
 exprime que l'évolution (15) est essen-
 tiellement perturbée par les collisions
 binaires (12); on a donc

$$(14) \quad \frac{\partial f_j}{\partial t} + v_j \cdot \nabla f_j = Q_j(f, f), \quad 0 \leq j \leq J$$

avec $Q_j(f, f)$ donné par la relation (13)

• Deux exemples très simples (a priori!) ont
 été proposés par T. Carleman (1957) et
 J. Broadwell (1964). Dans le modèle de
 Carleman, on dispose de deux vitesses +1 et
 -1; on note $u \equiv f_+$ la densité des vites-
 ses de la première famille et $v \equiv f_-$ celle
 relative à la deuxième famille de vitesses. Le
 modèle collisionnel n'a pas un sens physi-
 que très clair; le système d'équations s'é-
 crit

$$(15) \quad \begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} = v^2 - u^2 \\ \frac{\partial v}{\partial t} - \frac{\partial v}{\partial x} = u^2 - v^2 \end{cases}$$

La non-linéarité est d'ordre zéro. Elle stabili-
 sée l'évolution de u , comme de v .

* Le modèle de Broadwell comporte 10
trois vitesses $+1$ (de densité f), 0 (de densité h)
et -1 (de densité g). Une collision
binaire $(+, -)$ donne $(0, 0)$ (conservation
de l'impulsion mais pas de l'énergie
cinétique) et réciproquement. On obtient
ainsi le système d'équations aux dérivées
partielles

$$(16) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = h^2 - fg \\ \frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{1}{2}(h^2 - fg) \\ \frac{\partial g}{\partial t} - \frac{\partial g}{\partial x} = h^2 - fg \end{array} \right.$$

Ce système a été étudié par la com-
munité mathématique (L. Tartar, (1975)
JM Bony (1987)). Il reste l'objet de
travaux récents (Cornille (1989)).

• Forme polaire et espace des moments conservés.

Avec R. Gatiqnel (1975), on introduit bien
naturellement la forme polaire $Q_j(f, g)$
relative à la forme quadratique pro-
posée à la relation (13):

$$(17) \left\{ \begin{array}{l} Q_j(f, g) = \frac{1}{2} \sum_{i, k, l} A_{kl}^{ij} (f_k g_l + f_l g_k) \\ - \frac{1}{2} \sum_{i, k, l} A_{ij}^{kl} (f_i g_k + f_k g_i) \end{array} \right.$$

* Soit $\phi \equiv (\varphi_j)_{0 \leq j \leq J}$ un vecteur de \mathbb{R}^{J+1} . 11

On note $Q(f, g) \in \mathbb{R}^{J+1}$ le vecteur de composantes $Q_j(f, g)$ introduites à la relation (17). On introduit le produit scalaire

$$(18) \langle \phi, Q(f, g) \rangle \equiv \sum_j \varphi_j Q_j(f, g).$$

Prop Expression du produit scalaire.

Avec les hypothèses (6), (9), (10) relatives aux collisions binaires et avec les notations précédentes, on a

$$(19) \langle \phi, Q(f, g) \rangle = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} (\varphi_i + \varphi_j - \varphi_k - \varphi_l) A_{kl}^{ij} (f_k g_l + f_l g_k).$$

- La preuve utilise une réécriture des différents termes. On regarde le tout premier terme du membre de droite de (17) et on l'introduit dans le produit scalaire (18). Il vient

$$\begin{aligned} \sum_{ijkl} \varphi_j A_{kl}^{ij} f_k g_l &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} (\varphi_i + \varphi_j) A_{kl}^{ij} f_k g_l \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} (\varphi_i + \varphi_j) A_{kl}^{ij} f_l g_k \quad \text{car } A_{kl}^{ij} = A_{lk}^{ji} \end{aligned}$$

On regarde ensuite le tout premier terme négatif :

$$\sum_{ijkl} \varphi_i A_{ij}^{kl} f_i g_j = \sum_{ijkl} \varphi_l A_{kl}^{ij} f_k g_l$$

12

par changement de notation $\begin{cases} ij \\ kl \end{cases}$ des indices

$$= \frac{1}{2} \sum_{ijkl} (\varphi_k + \varphi_l) A_{kl}^{ij} f_k g_l \quad \text{car } A_{kl}^{ij} = A_{lk}^{ij}$$

$$= \sum_{ijkl} \varphi_i A_{ij}^{kl} f_i g_j \quad \text{car } A_{kl}^{ij} = A_{kl}^{ji}$$

* On regroupe les résultats précédents et il vient

$$\begin{aligned} \langle \phi, Q(f, g) \rangle &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} (\varphi_i + \varphi_j) A_{kl}^{ij} (f_k g_l + f_l g_k) \\ &\quad - \frac{1}{4} \sum_{ijkl} (\varphi_k + \varphi_l) A_{kl}^{ij} (f_k g_l + f_l g_k) \end{aligned}$$

ce qui établit la relation (19) et montre la propriété. \square

- On remarque que si le vecteur $\phi = (\varphi_j)_{0 \leq j \leq J}$ vérifie la relation

$$(20) \quad (\varphi_i + \varphi_j - \varphi_k - \varphi_l) A_{kl}^{ij} = 0, \quad \forall i, j, k, l,$$

alors $\langle \phi, Q(f, g) \rangle = 0$ pour tout choix de $f, g \in \mathbb{R}^{J+1}$ et le vecteur ϕ est orthogonal à tous les vecteurs de collisions $Q(f, g)$.

On introduit donc la

def Espace $\langle mc \rangle$ des moments conservés.

L'espace $\langle mc \rangle \subset \mathbb{R}^{J+1}$ est formé des vecteurs $\phi = (\phi_j)_{0 \leq j \leq J}$ qui vérifient les relations (20) pour tout quadruplet (i, j, k, l) dans $\{0, \dots, J\}$.

- Si les collisions sont binaires entre particules de même masse, on dispose d'un premier vecteur $\mu_0 \in \langle mc \rangle$:

$$(21) \quad \mu_0 = (1, \dots, 1)^t \in \langle mc \rangle$$

puisque la relation (20) est claire. Si les collisions $(i, j) \rightarrow (k, l)$ vérifient la conservation de l'impulsion (7), on pose pour $1 \leq \alpha \leq d$

$$(22) \quad \mu_\alpha = (v_0^\alpha, v_1^\alpha, \dots, v_J^\alpha)^t, \quad 1 \leq \alpha \leq d.$$

Alors $\mu_\alpha \in \langle mc \rangle$ dès que la relation (7) est vérifiée entre les collisions. Enfin, dans le cas où l'énergie cinétique est conservée (relation (8)), on introduit un nouveau vecteur μ_e :

$$(23) \quad \mu_e = \left(\frac{1}{2} |v_0|^2, \dots, \frac{1}{2} |v_J|^2 \right)$$

et $\mu_e \in \langle mc \rangle$ si la relation (8) a lieu pour toute collision admissible $(i, j) \rightarrow (k, l)$