

INTRODUCTION AU SCHÉMA DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU

COURS 3

Un exemple à deux dimensions d'espace (1)

- Généralités sur le schéma D2Q9
- Distribution d'équilibre à une dimension
- Polynomes de Hermite
- Distribution d'équilibre à deux dimensions d'espace
- Schéma D2Q9-BGK

Cours ③

Un exemple à deux dimensions spatiales

• Généralités sur le schéma D2Q9.

Nous présentons dans ce cours le schéma "D2Q9" (deux dimensions spatiales, neuf points voisins) pour l'approximation d'un fluide barotrope (trois équations aux dérivées partielles pour la conservation de la masse et des deux composantes de l'impulsion ; thermodynamique simplifiée). Nous définissons d'abord la famille v de vitesses discrètes grâce à l'ensemble des $(\xi_j)_{0 \leq j \leq 8}$ ($\xi_j \in \mathbb{R}^2$) définis par

$$(1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \xi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \xi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \xi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \xi_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \xi_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \xi_5 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \xi_6 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \xi_7 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \xi_8 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \end{array} \right.$$

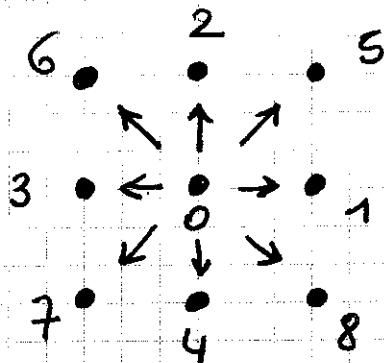


Figure 1. Schéma D2Q9.

et illustré Figure 1. On introduit une échelle de vitesse λ par

$$(2) \quad \lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad \lambda > 0$$

et on pose

$$(3) \quad v_j = \lambda \xi_j, \quad 0 \leq j \leq 8.$$

- Le réseau \mathcal{L} est un simple produit cartésien:

$$(4) \quad \mathcal{L} = (\Delta x \mathbb{Z})^2$$

(on ne traite pas de conditions aux limites dans le cadre de ce cours précis) et pour $x \in \mathcal{L}$ et $v_j \in \mathcal{V}$, on a $x - v_j \cdot \Delta t \in \mathcal{L}$.

Le schéma d'évolution en temps de l'approche "Boltzmann sur réseau" prend la forme

$$(5) \quad f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \cdot \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8, \quad x \in \mathcal{L}.$$

La phase d'advection est triviale (on utilise la méthode des caractéristiques dans le cas particulier où elle est exacte!) et le seul problème est de calculer l'opérateur de relaxation

$$(6) \quad \mathbb{R}^9 \ni f \mapsto f^* = Rf \in \mathbb{R}^9$$

qui est local en espace, et couple les composantes de f entre elles.

- Dans le cas de l'approximation BGK, la fonction de relaxation R est paramétrée par un temps de relaxation $\tau > 0$, le pas de temps $\Delta t > 0$ et la distribution d'équilibre f_j^{eq} :

$$(7) \quad f_j^* = f_j + \frac{\Delta t}{\tau} (f_j^{\text{eq}} - f_j), \quad 0 \leq j \leq 8.$$

Dans le cas du schéma à temps de relaxation multiples de d'Humières (1992), la relation algébrique qui permet de calculer R_f est un peu plus longue à écrire que la relation (7), mais elle utilise aussi une distribution d'équilibre $(f_j^{\text{eq}})_{0 \leq j \leq 8}$. La détermination de cette distribution d'équilibre est un point crucial dans la construction d'un schéma de Boltzmann sur réseau.

- Distribution d'équilibre à une dimension.

On remarque que pour le schéma D2Q9 tel qu'étudié ici, l'ensemble \mathcal{V} des vitesses définie par (1)(2)(3) peut s'écrire

$$(8) \quad \mathcal{V} = 3 \{-1, 0, 1\}^2.$$

Il est donc naturel de traiter d'abord le cas d'une seule dimension spatiale.

- Nous avons vu lors du premier cours que pour les systèmes à vitesses discrètes, l'équilibre thermodynamique impose que la distribution $(\log f)_{0 \leq j \leq 8}$ appartenait à l'espace des moments conservés. Dans le cas de vitesses variant dans le champ continu des composantes réelles, la conclusion de "théorème H" de Boltzmann (1872) est tout à fait analogue. La distribution continue de vitesse $\log f(v)$ ($v \in \mathbb{R}$) est encadrée par les fonctions $v \mapsto (1, v, \frac{1}{2}v^2)$. Il existe donc des nombres a, b, c réels tels que

$$(9) \quad \log f(v) \stackrel{\text{eq}}{=} a + bv + cv^2, \quad v \in \mathbb{R}.$$

Après changement du nom des paramètres, et afin d'assurer la condition $f \in L^1(\mathbb{R})$, il existe $\rho \in \mathbb{R}$ ($\rho > 0$ en pratique), $\beta > 0$ et $u \in \mathbb{R}$ de sorte que f^q soit égal à g_u , avec

$$(10) \quad g_u(\theta) = \rho \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \exp\left[-\frac{\beta}{2}(\theta-u)^2\right], \quad \theta \in \mathbb{R}.$$

- Dans la loi Gaussienne, Maxwellienne et Boltzmannienne (10) [sans oublier le Français Laplace!], le paramètre β peut s'interpréter comme l'inverse de la variance ;

il est également égal à l'inverse du produit $k_B T$ où k_B est la constante de Boltzmann et T la température :

$$(n) \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Avant de poursuivre le discours, notons la présence du

Catalogue d'intégrales Gaussiennes

On a les relations élémentaires suivantes :

$$(12) \quad \int_{\mathbb{R}} \exp(-\frac{\beta}{2}\theta^2) d\theta = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}$$

$$(13) \quad \int_{\mathbb{R}} \theta \exp(-\frac{\beta}{2}\theta^2) d\theta = 0$$

$$(14) \quad \int_{\mathbb{R}} \theta^2 \exp(-\frac{\beta}{2}\theta^2) d\theta = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}$$

$$(15) \quad \int_{\mathbb{R}} \theta^3 \exp(-\frac{\beta}{2}\theta^2) d\theta = 0$$

$$(16) \quad \int_{\mathbb{R}} \theta^4 \exp(-\frac{\beta}{2}\theta^2) d\theta = \frac{3}{\beta^2} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}.$$

Ce résultat figure dans tous les cours de mathématiques de premier cycle qui abordent ce sujet.

Prop. Moments de la distribution d'équilibre.

6

Avec la fonction g_u définie à la relation (10), on a :

$$(17) \quad \int_{\mathbb{R}} g_u(\theta) d\theta = p$$

$$(18) \quad \int_{\mathbb{R}} \theta g_u(\theta) d\theta = \mu$$

- La preuve est claire pour (17) compte tenu de la relation (12). Pour montrer la relation (18), on pose $\theta = u + x$ et on utilise la relation (13). 
- La distribution d'équilibre $g_u(\theta)$ est paramétrée par la densité p , la vitesse u et le paramètre $\beta > 0$. Dans l'approche du schéma de Boltzmann sur réseau, il faut remplacer dans (17)(18) les intégrales sur \mathbb{R} par des sommes discrètes sur les vitesses du réseau. Le plus simple, sans être trivial, consiste à utiliser les trois "moments" $-\lambda, 0, \lambda$ (cf (8)) du réseau D1Q3.
- Polynômes de Hermite

On suppose qu'on dispose d'une formule de quadrature

$$(19) \int_{\mathbb{R}} \varphi(\theta) \exp(-\frac{\beta}{2} \theta^2) d\theta \approx \sum_j w_j \varphi(s_j)$$

paramétrée par les poids w_j et les nœuds s_j . Si $\varphi \in C^0(\mathbb{R})$, on peut interpréter la relation (19) en termes de mesures. On pose

$$(20) d\mu \equiv \exp(-\frac{\beta}{2} \theta^2) d\theta$$

Alors (19) s'écrit aussi

$$(21) d\mu \approx \sum_j w_j \delta_{s_j}$$

* La relation (19) est exacte pour φ polynôme de degré modéré. On sait que la bonne façon de faire consiste par exemple à choisir pour s_j les points de Gauss. Alors on sait (voir un cours d'intégration numérique !) que le bon choix est celui des zéros de la famille des polynomes orthogonaux. Si $H_n(\theta)$ désigne le n^{e} polynôme orthogonal (pour le produit scalaire $(P, Q) = \int_{\mathbb{R}} P(\theta) Q(\theta) d\mu(\theta)$) de degré n , alors la formule de quadrature (19) est exacte pour tous les polynomes de degré inférieur ou égal à $2n-1$. Nous déterminons dans le paragraphe suivant les polynomes orthogonaux pour la mesure $d\mu$ donnée à la relation (20) de degré ≤ 3 . Ce sont les polynomes de Hermite.

Prop

Premiers polynômes de Kermite.

On pose

$$(22) \quad H_0(\theta) = 1, \quad H_1(\theta) = \theta, \quad H_2(\theta) = \theta^2 - \frac{1}{\beta}, \quad H_3(\theta) = (\theta^2 - \frac{3}{\beta})\theta$$

Alors on a

$$(23) \quad \int_R H_k H_l d\mu = 0 \quad \text{si } k \neq l, \quad k, l \leq 3$$

- La proue consiste à partir de $H_0 = 1$ et à construire les H_k de degré k par orthogonalisation de Gram-Schmidt. L'orthogonalité H_0, H_1 résulte de la relation (13). Vu la partie, il en va du même de chercher H_2 sous la forme $H_2(\theta) = \theta^2 - C$.

Alors

$$\begin{aligned} (H_2, H_0) &= \int_R H_2 \cdot 1 e^{-\frac{\beta}{2}\theta^2} d\theta = \int_R (\theta^2 - C) e^{-\frac{\beta}{2}\theta^2} d\theta \\ &= \left(\frac{1}{\beta} - C \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \quad (\text{cf (12) et (14)}) \end{aligned}$$

et la nullité de ce produit scalaire justifie la valeur de $H_2(\theta)$ donnée à la relation (22). Enfin, cherchant H_3 sous la forme d'un polynôme impair de degré 3 (alors l'orthogonalité avec H_0 et H_2 résulte facilement de (13)(15)), la seule orthogonalité non banale s'écrit

$$(H_3, H_1) = \int_R (\theta^3 - K\theta) \theta e^{-\frac{\beta}{2}\theta^2} d\theta = \left(\frac{3}{\beta^2} - K \frac{1}{\beta} \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}$$

grâce aux relations (14) et (16). Le choix $K = 3/\beta$ permet d'achever la construction des premiers polynômes de Hermite, telle que proposée à la relation (22).



Trois points de Gauss pour la Gausienne.

La relation (19) est exacte pour $\Phi \in P_5$ si on choisit pour S_j les zéros du polynôme H_3 donné à la relation (22) [$S_1 = -\sqrt{\frac{3}{\beta}}$, $S_0 = 0$, $S_{-1} = \sqrt{\frac{3}{\beta}}$] en posant les w_j données par

$$w_{-1} = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \frac{1}{6}, \quad w_0 = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \frac{2}{3}, \quad w_1 = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \frac{1}{6}.$$

$$(24) \int_R \Phi(\theta) \exp\left(-\frac{\beta}{2}\theta^2\right) d\theta \approx \left[\frac{2}{3}\Phi(0) + \frac{1}{6}\Phi\left(\sqrt{\frac{3}{\beta}}\right) + \frac{1}{6}\Phi\left(-\sqrt{\frac{3}{\beta}}\right) \right] \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}.$$

- La preuve s'obtient en imposant complément à la relation (19) d'être exacte pour $\Phi = 1, \theta, \theta^2$. Il n'y a pas de difficulté

$$\begin{cases} w_1 + w_0 + w_{-1} = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \\ w_1 - w_{-1} = 0 \\ 2w_1\left(\sqrt{\frac{3}{\beta}}\right)^2 = \frac{1}{\beta}\sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}. \end{cases}$$

D'où $w_{-1} = w_1 = \frac{1}{6}\sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}$ et w_0 résulte du complément à l'unité. Le reste de l'énoncé résulte des résultats classiques pour l'intégration numérique de Gauss.



- On peut faire le lien avec g_0 (faire $u=0$ dans la relation (10)) en choisissant β de sorte que les points de quadrature soient situés sur la "grille en n^esse" donnée à la relation (8), c'est à dire

$$(25) \quad \lambda = \sqrt{\frac{3}{\beta}}, \text{ i.e. } \beta = \frac{3}{\lambda^2}.$$

On a donc

$$(26) \quad g_0(\theta) d\theta \approx \rho \left(\frac{2}{3} \delta_0 + \frac{1}{6} \delta_\lambda + \frac{1}{6} \delta_{-\lambda} \right).$$

- Mais ici, on ne doit pas oublier que la distribution de n^esse à prendre en compte est $g_u(\cdot)$ et non $g_0(\cdot)$! on pourrait adapter (26) sans difficultés, grâce à $\delta_u, \delta_{u+\lambda}$ et $\delta_{u-\lambda}$ mais on doit se rappeler que la grille en n^esse (relation (8)) est fixe. On remarque toutefois que l'on a

$$(27) \quad g_u(\theta) = \exp(\beta u \theta - \frac{\beta}{2} u^2) g_0(\theta), \quad \theta \in \mathbb{R}.$$

Compte tenu de (25) et en développant les exponentielles en n^esse à l'ordre deux au plus, on a

$$(28) \quad g_u(\theta) d\theta \approx \left(1 + \frac{3u}{\lambda} \theta + 3 \frac{u^2}{\lambda^2} \right) \rho \left(\frac{2}{3} \delta_0 + \frac{1}{6} (\delta_\lambda + \delta_{-\lambda}) \right)$$

grâce à la relation (26). Cette dernière relation permet de proposer une distribution d'équilibre à une dimension d'espace:

$$(29) \quad \left\{ \begin{array}{l} f_0^{\text{eq}} = \frac{2\rho}{3} \left(1 - \frac{3}{2} \frac{u^2}{\lambda^2} \right) \\ f_1^{\text{eq}} = \frac{\rho}{6} \left(1 + \frac{3u}{\lambda} + \frac{3u^2}{\lambda^2} \right) \\ f_{-1}^{\text{eq}} = \frac{\rho}{6} \left(1 - \frac{3u}{\lambda} + \frac{3u^2}{\lambda^2} \right). \end{array} \right.$$

Prop. Moyennes discrètes.

Pour la distribution d'équilibre $(f_j^{\text{eq}})_{j=-1,0,1}$ proposée en (29), on a

$$(30) \quad \left\{ \begin{array}{l} f_1^{\text{eq}} + f_0^{\text{eq}} + f_{-1}^{\text{eq}} = \rho \\ -\lambda f_{-1}^{\text{eq}} + 0 f_0^{\text{eq}} + \lambda f_1^{\text{eq}} = \rho u. \end{array} \right.$$

- Cette proportion est non banale; en effet, elle permet de satisfaire les contraintes imposées à la distribution d'équilibre, qui peut être aussi recherchée par minimisation de l'entropie $\sum f_j \log f_j$.

Preuve des relations (30)

C'est clair pour la première. Pour la seconde,

$$\lambda(f_1^{\text{eq}} - f_{-1}^{\text{eq}}) = \lambda \frac{\rho}{6} \left(\frac{3u}{\lambda} + \frac{3u^2}{\lambda^2} \right) = \rho u.$$
□

Distribution d'équilibre à deux dimensions d'espace.

Il suffit de remarquer que l'on peut, en s'inspirant du théorème de Fubini, itérer deux fois de suite

l'approximation (24) si φ est continue de \mathbb{R}^2 dans \mathbb{R} :

$$\int_{\mathbb{R}^2} \varphi(\theta) \exp(-\frac{\beta}{2} |\theta|^2) d\theta =$$

$$\sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \left\{ \frac{2}{3} \int_{\mathbb{R}} \varphi(\theta_1, 0) \exp(-\frac{\beta}{2} \theta_1^2) d\theta_1, \right.$$

$$+ \frac{1}{6} \int_{\mathbb{R}} \varphi(\theta_1, \sqrt{\frac{3}{\beta}}) \exp(-\frac{\beta}{2} \theta_1^2) d\theta_1$$

$$\left. + \frac{1}{6} \int_{\mathbb{R}} \varphi(\theta_1, -\sqrt{\frac{3}{\beta}}) \exp(-\frac{\beta}{2} \theta_1^2) d\theta_1 \right\}$$

$$\simeq \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) \left\{ \left(\frac{2}{3} \right)^2 \varphi(0, 0) + \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{6} \left[\varphi(-\sqrt{\frac{3}{\beta}}, 0) + \varphi(\sqrt{\frac{3}{\beta}}, 0) \right. \right.$$

$$\left. + \varphi(0, -\sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \varphi(0, \sqrt{\frac{3}{\beta}}) \right] +$$

$$+ \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{6} \left[\varphi(-\sqrt{\frac{3}{\beta}}, \sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \varphi(\sqrt{\frac{3}{\beta}}, \sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \right.$$

$$\left. + \varphi(-\sqrt{\frac{3}{\beta}}, -\sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \varphi(\sqrt{\frac{3}{\beta}}, -\sqrt{\frac{3}{\beta}}) \right] \right\}$$

D'où

$$(31) \quad \left\{ \begin{array}{l} \int_{\mathbb{R}^2} \varphi(\theta) \exp(-\frac{\beta}{2} |\theta|^2) d\theta \simeq \left(\frac{2\pi}{\beta} \right) \left\{ \frac{4}{9} \varphi(0, 0) + \right. \\ \left. + \frac{1}{9} \left[\varphi(\sqrt{\frac{3}{\beta}}, 0) + \varphi(0, \sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \varphi(-\sqrt{\frac{3}{\beta}}, 0) + \varphi(0, -\sqrt{\frac{3}{\beta}}) \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{36} \left[\varphi(\sqrt{\frac{3}{\beta}}, \sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \varphi(-\sqrt{\frac{3}{\beta}}, \sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \varphi(-\sqrt{\frac{3}{\beta}}, -\sqrt{\frac{3}{\beta}}) + \varphi(\sqrt{\frac{3}{\beta}}, -\sqrt{\frac{3}{\beta}}) \right] \right\} \end{array} \right.$$

$$\frac{1}{36} \bullet \frac{1}{9} \bullet \frac{1}{36}$$

$$\frac{1}{9} \bullet \frac{4}{9} \bullet \frac{1}{9}$$

$$\frac{1}{36} \bullet \frac{1}{9} \bullet \frac{1}{36}$$

Figuré 2. Roids de Gauss pour le schéma D2Q9

er cette formule de quadrature en illustrée figure 2.

- Si on passe de une à deux dimensions spatiales, on remplace la gaussienne g_μ de la relation (10) par son analogue à deux dimensions d'espace

$$(32) \quad f_u(\theta) = \rho \left(\frac{\beta}{2\pi} \right) \exp \left[-\frac{\beta}{2} (\theta_1 - u_x)^2 - \frac{\beta}{2} (\theta_2 - u_y)^2 \right]$$

on a alors

$$(33) \quad f_u(\theta) = \exp \left[-\frac{\beta}{2} |u|^2 + \beta (\theta \cdot u) \right] f_0(\theta)$$

Donc

$$\begin{aligned} f_u(\theta) d\theta &\simeq \exp \left[-\frac{\beta}{2} |u|^2 + \beta (\theta \cdot u) \right] \rho \left\{ \frac{4}{9} \delta_{(0)} + \right. \\ &+ \frac{1}{9} \left(\delta_{(\lambda,0)} + \delta_{(0,\lambda)} + \delta_{(-\lambda,0)} + \delta_{(0,-\lambda)} \right) \\ &+ \frac{1}{36} \left(\delta_{(\lambda,\lambda)} + \delta_{(-\lambda,\lambda)} + \delta_{(-\lambda,-\lambda)} + \delta_{(\lambda,-\lambda)} \right) \left. \right\} \end{aligned}$$

$$\simeq \exp \left[-\frac{\beta}{2} |u|^2 + \beta (\theta \cdot u) \right] \rho \sum_{j=0}^8 w_j \delta_{\lambda_j \xi_j}$$

en introduisant les poids w_j illustrés figure 2 :

$$(34) \quad \left\{ \begin{array}{l} w_0 = \frac{4}{9} \\ w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = \frac{1}{9} \\ w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = \frac{1}{36} \end{array} \right.$$

En appliquant les masses de Dirac aux préfacteurs, il vient

$$\begin{aligned}
 f_u(w) dw &\stackrel{8}{\simeq} \rho \sum_{j=0}^8 \exp\left[-\frac{\beta}{2}|u|^2 + \beta \lambda (\xi_j \cdot u)\right] w_j \frac{\delta}{\lambda \xi_j} \\
 &\simeq \rho \sum_j \exp\left(-\frac{3|u|^2}{2\lambda^2} + \frac{3}{\lambda}(\xi_j \cdot u)\right) w_j \frac{\delta}{\lambda \xi_j} \\
 &\quad \text{avec } \beta = 3/2^2 \text{ (cf (25))}
 \end{aligned}$$

Puis on développe le facteur exponentiel au second ordre relativement à la vitesse. On pose

$$(36) \quad \psi_j(u) = 1 + \frac{3}{\lambda} \left(\frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right) + \frac{9}{2} \left(\frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right)^2 - \frac{3}{2} \frac{|u|^2}{\lambda^2}$$

On a donc établi l'approximation

$$(37) \quad f_u(w) dw \simeq \sum_{j=0}^8 \rho w_j \psi_j(u) \frac{\delta}{\lambda \xi_j}$$

- L'approximation (37) définit naturellement une distribution d'équilibre $G_j(\rho, u)$ par

$$(38) \quad G_j(\rho, u) = \rho w_j \psi_j(u), \quad 0 \leq j \leq 8,$$

w_j donné en (34) et $\psi_j(u)$ à la relation (37). Noter que les vecteurs ξ_j intervenant dans (36) sont donnés à la relation (1). La distribution de vitesse (38) est la distribution classique du schéma BGK.

Prop Cohérence de la distribution d'équilibre.

Avec $G_j(\rho, u)$ donné à la relation (38), on a :

$$(39) \quad \sum_{j=0}^8 G_j(\rho, u) = \rho, \quad \sum_{j=0}^8 v_j G_j(\rho, u) = \rho u.$$

ça peut être un long exercice qui repose de façon fondamentale sur un lemme élémentaire.

Lemme Sommes partielles.

Avec les notations précédentes, on a

$$(40) \quad \sum_{j=1}^4 (\xi_j \cdot u) = 0 \quad \sum_{j=5}^8 (\xi_j \cdot u) = 0$$

$$(41) \quad \sum_{j=1}^4 |\xi_j \cdot u|^2 = 2|u|^2 \quad \sum_{j=5}^8 |\xi_j \cdot u|^2 = 4|u|^2$$

$$(42) \quad \sum_{j=1}^4 \xi_j (\xi_j \cdot u) = 4u \quad \sum_{j=5}^8 \xi_j (\xi_j \cdot u) = 4u$$

$$(43) \quad \sum_{j=1}^4 \xi_j |\xi_j \cdot u|^2 = 0 \quad \sum_{j=5}^8 \xi_j |\xi_j \cdot u|^2 = 0$$

• Preuve du lemme.

Il suffit de s'intéresser aux relations (1).

Alors la relation (40) est claire. Par ailleurs,

$$\sum_{j=1}^4 |\xi_j \cdot u|^2 = u_x^2 + u_y^2 + u_x^2 + u_y^2 = 2|u|^2 \text{ comme annoncé}$$

$$\begin{aligned} \text{et } \sum_{j=5}^8 |\xi_j \cdot u|^2 &= (u_x + u_y)^2 + (-u_x + u_y)^2 + (-u_x - u_y)^2 + (u_x - u_y)^2 \\ &= 2(u_x^2 + u_y^2 + u_x^2 + u_y^2) = 4(u_x^2 + u_y^2) \end{aligned}$$

ce qui achève de prouver la relation (41). On a aussi

$$\sum_{j=1}^4 \xi_j (\xi_j \cdot u) = u_x \binom{1}{0} + u_y \binom{0}{1} - u_x \binom{-1}{0} - u_y \binom{0}{-1} = 2(u_x)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=5}^8 \xi_j (\xi_j \cdot u) &= (u_x + u_y) \binom{1}{1} + (-u_x + u_y) \binom{-1}{1} + (-u_x - u_y) \binom{-1}{-1} \\ &\quad + (u_x - u_y) \binom{1}{-1} = \binom{4u_x}{4u_y} = 4u \end{aligned}$$

ce qui établit (42). Enfin, on a

$$\sum_1^4 \xi_j |\xi_j \cdot u|^2 = ux^2(1) + uy^2(0) + (-ux)^2(-1) + uy^2(-1) = 0$$

$$\begin{aligned} \sum_5^8 \xi_j |\xi_j \cdot u|^2 &= (ux+uy)^2(1) + (-ux+uy)^2(-1) + \\ &\quad + (ux+uy)^2(-1) + (ux-uy)^2(-1) = 0, \end{aligned}$$

d'où la relation (43). \square

• Preuve de la cohérence de l'équilibre (BGK)

$$\begin{aligned} \text{On a } \frac{1}{\rho} \sum_0^8 G_j(\rho, u) &= \frac{4}{9} \left(1 - \frac{3}{2} \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \right) + \frac{1}{9} \sum_1^4 \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \right. \\ &\quad \left. + 3 \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} + \frac{9}{2} \left| \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right|^2 \right\} + \frac{1}{36} \sum_5^8 \left\{ 1 - \frac{3}{2} \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \right. \\ &\quad \left. + 3 \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} + \frac{9}{2} \left| \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right|^2 \right\} \\ &= \left(\frac{4}{9} + 4 \cdot \frac{1}{9} + 4 \cdot \frac{1}{36} \right) \left(1 - \frac{3}{2} \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \right) + \frac{1}{9} \cdot \frac{9}{2} \cdot 2 \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \\ &\quad + \frac{1}{36} \cdot \frac{9}{2} \cdot 4 \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \\ &= 1 + \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \left(-\frac{3}{2} + 1 + \frac{1}{2} \right) = 1 \text{ et} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \sum_0^8 v_j G_j(\rho, u) &= \frac{\lambda}{\rho} \sum_0^8 \xi_j G_j(\rho, u) = \frac{\lambda}{9} \left\{ \sum_1^4 \xi_j \left(1 - \frac{3}{2} \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + 3 \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} + \frac{9}{2} \left| \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right|^2 \right) \right\} + \frac{\lambda}{36} \sum_5^8 \xi_j \left(\right. \\ &\quad \left. 1 - \frac{3}{2} \left| \frac{u}{\lambda} \right|^2 + 3 \left| \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right|^2 \right) + \frac{9}{2} \left| \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right|^2 \end{aligned}$$

$$= \left\{ \frac{1}{9} \cdot 3 \cdot 2u + \frac{1}{36} \cdot 3 \cdot 4u \right\} = \left(\frac{2}{3}u + \frac{u}{3} \right) = u,$$

et les relations (39) sont démontrées. \square

Prop. Positivité de la distribution d'équilibre.

sous la condition

$$(44) \quad |u| \leq \frac{2}{\sqrt{3}}$$

la distribution $G_j(\rho, u)$ est positive si $\rho \geq 0$ et

$$(45) \quad \psi_j(u) \geq 0, \quad 0 \leq j \leq 8.$$

• Premre. Si ψ_j est donné à la relation (36), on

$$\begin{aligned} \text{a } \psi_j(u) &\geq 1 + 3 \left(\frac{u \cdot \xi_j}{\lambda} \right) + \frac{9}{2} \left| \frac{u \cdot \xi_j}{\lambda} \right|^2 - \frac{3}{2} \frac{1}{3} \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + 6 \frac{u \cdot \xi_j}{\lambda} + 9 \left(\frac{u \cdot \xi_j}{\lambda} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + 3 \frac{\xi_j \cdot u}{\lambda} \right)^2 \geq 0. \end{aligned}$$

\square

• Schéma D2Q9-BGK.

Avec $f_j^{eq} = G_j(\rho, u)$ donné à la relation (38) (sans oublier (34) et (36) !), la relaxation $f_j \rightarrow f_j^*$ (cf (6)) est facile à évaluer si on utilise l'approche BGK avec un unique temps de relaxation $\tau > 0$. Si $f(x)$ est supposée connue, la fonction $f_j \rightarrow f_j^*$ se décompose

sans difficulté :

$$(46) \quad \rho = \sum_j f_j, \quad \rho u = \sum_j v_j f_j.$$

$$(47) \quad f_j^{\text{eq}} = G_j(\rho, u), \quad 0 \leq j \leq 8$$

$$(48) \quad f_j^* = f_j + \frac{\Delta t}{\tau} (f_j^{\text{eq}} - f_j), \quad 0 \leq j \leq 8,$$

qui permet d'introduire le paramètre $s = \frac{\Delta t}{\tau}$, strictement positif.

• Moments et polynômes.

Afin de se donner une famille de vecteurs propres de la transposée de la matrice de relaxation, on introduit une famille de polynômes. Pour $0 \leq k \leq 8$, on pose

$$(49) \quad l_k = \begin{cases} 1 & 0 \\ x & 1 \\ y & 2 \\ x^2 + y^2 & 3 \\ x^2 - y^2 & 4 \\ xy & 5 \\ (x^2 + y^2)x & 6 \\ (x^2 + y^2)y & 7 \\ (x^2 + y^2)^2 & 8 \end{cases}$$

et on introduit la matrice L_{kj} grâce à la relation