

COURS 4

Equation équivalente et application

- Rappels
- Deux approches classiques
- Développement à l'ordre zéro
- Développement au premier ordre
- Développement au second ordre
- Application au schéma D2Q9

Equation équivalente et application

• Rappels.

Avec la nomenclature devenue classique "DdQ(J+)",
un schéma de Boltzmann sur réseau à d
dimensions spatiales et $(J+)$ points s'écrit sous
la forme

$$(1) \quad f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq J.$$

• Pour fixer les idées, nous supposons dans ce cours
que les moments à l'équilibre sont d'une
part la densité

$$(2) \quad \rho = \sum_{j=0}^J f_j = m_0$$

et d'autre part l'impulsion

$$(3) \quad q = \rho u = \sum_{j=0}^J v_j f_j \in \mathbb{R}^d.$$

Ces moments conservés définissent les premières
lignes de la matrice M via les relations

$$(4) \quad M_{0j} = 1, \quad M_{\alpha j} = v_j^\alpha, \quad 1 \leq \alpha \leq d, \quad 0 \leq j \leq J.$$

• La matrice M (avec $(M_{kj})_{0 \leq k, j \leq J}$ réel)
et un prolongement

des relations (4) et on la suppose inversible.

- Les moments à l'équilibre m_k^{eq} sont supposés pouvoir être calculés pour $k > d$ à l'aide de fonctions (a priori non linéaires) des moments conservés p et q :

$$(5) \quad m_k^{eq} = \psi_k(p, q), \quad k > d$$

Pour $k = i \leq d$, on a simplement

$$(6) \quad m_i = m_i^* = m_i^{eq}, \quad 0 \leq i \leq d.$$

- Le calcul de la distribution particulière après collision f^* est supposé donné par les relations

$$(7) \quad m_k = \sum_{j=0}^J M_{kj} f_j, \quad 0 \leq k \leq J$$

puis l'équilibre m_k^{eq} à l'aide de (5)(6). Pour $k > d$, la relaxation des moments hors équilibre s'obtient à l'aide des coefficients $\alpha_k > 0$:

$$(8) \quad m_k^* = m_k + \alpha_k (m_k^{eq} - m_k), \quad k > d.$$

Le retour aux particules ne demande que l'inversion d'une relation de type de celle proposée en (7):

$$(9) \quad f_j^* = \sum_{k=0}^J (M^{-1})_{jk} m_k^*, \quad 0 \leq j \leq J.$$

• Deux approches classiques

Pour analyser le schéma de Boltzmann sur réseau, de nombreux auteurs suivent une méthodologie adaptée du développement de Chapman-Enskog pour l'équation de Boltzmann continue. Dans ce cas (tout comme pour l'équation de Boltzmann à entées discrètes étudiée au cours (1)), l'infiniment petit naturel est le rapport ε entre le libre parcours moyen (distance moyenne parcourue par une molécule entre deux collisions) et une dimension macroscopique typique :

$$(10) \quad \varepsilon = \frac{l_{pm}}{L}, \quad 0 < \varepsilon \ll 1.$$

On utilise cet infiniment petit pour développer la distribution $f(x, v, t)$ de Boltzmann autour de la distribution de l'équilibre de Maxwell Boltzmann: f^0

$$(11) \quad f = f^0 + \varepsilon f^1 + \varepsilon^2 f^2 + \dots$$

on introduit formellement cet équilibre dans l'équation de Boltzmann et on peut résoudre alors en cascade d'abord les équations d'Euler, puis la perturbation au premier ordre qui redonne les équations de Navier-Stokes.

• Dans le cas du schéma de Boltzmann sur réseau, on dispose d'un infiniment petit naturel, le pas Δx du réseau, relié au pas de temps Δt à l'aide d'une célérité typique λ que nous supposons constante:

$$(12) \quad \lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}.$$

Nous proposons au paragraphe suivant d'adapter une méthode classique d'analyse (Lerat-Peyret (1974), Warming-Hyett (1974)) dite de l'équation aux dérivées partielles équivalente. Afin de ne pas dérouter le lecteur, nous en rap-pelons ici les grandes lignes pour un cas des plus élémentaires.

• On suppose qu'on approche l'équation d'ad-vection

$$(13) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad a > 0$$

par le schéma aux différences décentré au point du premier ordre:

$$(14) \quad \left\{ \begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} [v(x, t + \Delta t) - v(x, t)] + \\ & + \frac{a}{\Delta x} [v(x, t) - v(x - \Delta x, t)] = 0. \end{aligned} \right.$$

L'erreur de troncature $\mathcal{O}(\Delta; u)$ s'obtient en remplaçant dans l'expression (14) du schéma la solution approchée v par la solution exacte $u(x, t)$ aux divers points de grille :

$$(15) \left\{ \begin{aligned} \mathcal{O}(\Delta; u) &= \frac{1}{\Delta t} (u(x, t + \Delta t) - u(x, t)) \\ &\quad + \frac{a}{\Delta x} (u(x, t) - u(x - \Delta x, t)) . \end{aligned} \right.$$

Dans le cas du couple (14), (15), on obtient sans difficulté

$$(16) \quad \mathcal{O}(\Delta; u) = \mathcal{O}(\Delta) ,$$

si la fonction u est assez régulière. L'idée de l'équation aux dérivées partielles équivalente est de trouver une autre équation aux dérivées partielles de façon à remplacer l'erreur du premier ordre (16) par une erreur (formelle) d'ordre 2, 3 ou plus

- Dans le cas du schéma de l'autre (14), on développe les différences finies à l'aide de la formule de Taylor :

$$(17) \quad \begin{aligned} v(x, t + \Delta t) &= v + \Delta t \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^3}{6} \frac{\partial^3 v}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta^4) \\ \frac{1}{\Delta t} (v(x, t + \Delta t) - v(t)) &= \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 v}{\partial t^3} + \mathcal{O}(\Delta^3) \end{aligned}$$

$$v(x-\Delta x, t) = v - \Delta x \partial_x v + \frac{\Delta x^2}{2} \partial_x^2 v - \frac{\Delta x^3}{6} \partial_x^3 v + O(\Delta^4) \quad 6$$

$$(18) \quad \frac{1}{\Delta x} (v(x, t) - v(x-\Delta x, t)) = \partial_x v - \frac{\Delta x}{2} \partial_x^2 v + \frac{\Delta x^2}{6} \partial_x^3 v + O(\Delta^3)$$

En sommant (17) et a x (18), on peut écrire le schéma (14) sous la forme d'une équation aux dérivées partielles équivalente d'ordre trois :

$$(19) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} \\ + a \left\{ \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right\} = O(\Delta^3) \end{array} \right.$$

- Cette expression n'est pas satisfaisante à cause des dérivées partielles d'ordre élevé en temps dans le membre de gauche de (19). On peut les éliminer de proche en proche. En effet, on tire de la relation (19) :

$$(20) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = O(\Delta)$$

donc $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -a \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = -a \frac{\partial}{\partial x} \left(-a \frac{\partial u}{\partial x} \right) + O(\Delta) :$

$$(21) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + O(\Delta)$$

on reporte cette valeur dans (19) ; il vient

$$(22) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{a \Delta t}{2} (1-a) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = O(\Delta^2),$$

qui donne l'équation équivalente au schéma (14) au second ordre.

On sait que le schéma (4) est stable si $a > 0$
 sous la condition $a \frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$, ce qui peut aussi
 s'écrire

$$(23) \quad 0 < a < \lambda$$

et le coefficient de diffusion dans (22) est bien
 négatif dans ce cas comme attendu, puisque
 $a \Delta t (\lambda - a) > 0$.

- On utilise l'équation au second ordre (22) pour
 affiner la relation (21). On a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \left(-a \frac{\partial}{\partial x} + a \frac{\Delta t}{2} (\lambda - a) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) + O(\Delta^2) \\ &= \left(-a \frac{\partial}{\partial x} + a \frac{\Delta t}{2} (\lambda - a) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \\ &\quad \left[-a \frac{\partial u}{\partial x} + a \frac{\Delta t}{2} (\lambda - a) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right] + O(\Delta^4) \end{aligned}$$

$$(24) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^2} - a^2 \Delta t (\lambda - a) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta^4).$$

Par ailleurs, on a par utilisation de (20) et (21) :

$$(25) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -a^3 \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + O(\Delta)$$

on reporte les résultats (24) et (25) au sein de (19).

Il vient

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} \Delta t \left[a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a^2 \Delta t (\lambda - a) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \right] - a^3 \frac{\Delta t^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} \\ - \frac{a \Delta x}{2} \frac{\partial u}{\partial x^2} + \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = O(\Delta^3) \end{aligned}$$

8

Au second ordre, on retrouve l'équation équivalente -
 l'équation (22). Le coefficient de $\partial_x^3 u$ dans l'expression
 précédente vaut

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\Delta t^2}{2} a^2 (\lambda - a) - a^2 \frac{\Delta t^2}{6} + \frac{1}{6} \Delta x^2 = \\
 & = -a^2 \frac{\Delta t \Delta x}{2} + a^3 \Delta t^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{6} \right) + \frac{1}{6} \Delta x^2 \\
 & = \frac{a \Delta t^2}{6} (2a^2 - 3\lambda + \lambda^2) \\
 & = a \frac{\Delta t^2}{6} (\lambda - a)(\lambda - 2a)
 \end{aligned}$$

et l'équation équivalente au troisième ordre
 prend la forme

$$(26) \left\{ \begin{aligned}
 & \frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} - a \frac{\Delta t}{2} (\lambda - a) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\
 & + a \frac{\Delta t^2}{6} (\lambda - a)(\lambda - 2a) \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = o(\Delta^3)
 \end{aligned} \right.$$

On a mis en évidence des effets dispersifs
 d'ordre 2 en Δt . L'analyse du schéma aux
 différences (14) se poursuit à tout ordre sans
 difficulté majeure. La méthodologie de
 l'équation équivalente permet de comprendre
 les propriétés des schémas numériques avec
 des équations aux dérivées partielles de type
 linéaires bien connues.

• Développement à l'ordre zéro

Mais appliquons la méthodologie précédente au schéma de Boltzmann sur réseau défini par les relations (1) à (9).

Prop. Présence de l'équilibre.

On suppose qu'il existe une fonction régulière f_j de $x \in \mathbb{R}^d$ et $t \in \mathbb{R}$ de sorte que (1) a lieu.

Alors on a

$$(27) \quad f_j = f_j^{eq} + O(\Delta)$$

$$(28) \quad f_j^* = f_j^{eq} + O(\Delta)$$

si on suppose $k \geq 0$ fixé pour $k > d$.

• La preuve consiste à calculer les moments m_k à partir de (1) et (4):

$$(29) \quad m_k(x, t + \Delta t) = \sum_{j=0}^J M_{kj} f_j^*(x - v_j \Delta t, t).$$

on développe cette relation à l'ordre zéro:

$$m_k(t) + O(\Delta) = \sum_j M_{kj} f_j^* + O(\Delta)$$

$$(30) \quad m_k = m_k^* + O(\Delta), \quad 0 \leq k \leq J.$$

si $k \leq d$, cette relation est claire compte tenu

de la relation (6). Pour $k > d$, les relations (30) et (8) entraînent

$$(31) \quad \rho_k (m_k - m_k^{eq}) = O(\Delta), \quad k > d$$

donc

$$(32) \quad m_k = m_k^{eq} + O(\Delta) \quad \text{si } \rho_k > 0 \text{ fixé}$$

* On reporte alors cette expression au sein de la relation (8):

$$m_k^* = m_k^{eq} + O(\Delta) + \rho_k (m_k^{eq} - m_k) = m_k^{eq} + O(\Delta)$$

$$(33) \quad m_k^* = m_k^{eq} + O(\Delta), \quad k > d$$

Les relations (27) et (28) s'obtiennent à partir de (32) et (33) par application de la matrice M^{-1} (cf (9) par exemple) et la proposition est démontrée. \square

• Développement au premier ordre

on suppose toujours dans ce paragraphe (et le suivant) qu'il existe une fonction $f_j(x,t)$ régulière de $(x,t) \in \mathbb{R}^{d+1}$ pour $0 \leq j \leq J$ de sorte que pour $x \in \mathcal{L}$ et $t \in \Delta \cap \mathbb{N}$, la relation (1) du schéma de Boltzmann sur réseau a lieu. Alors on a

Prop Equations d'Euler à l'ordre un.

Avec les notations et les hypothèses précédentes, les moments conservés p et pu_α ($1 \leq \alpha \leq d$) satisfont au premier ordre aux lois de conservation suivantes :

$$(34) \quad \frac{\partial p}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^d \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (pu_\alpha) = O(\Delta)$$

$$(35) \quad \frac{\partial}{\partial t} (pu_\alpha) + \sum_{\beta=1}^d \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\sum_{j=0}^J v_j^\alpha v_j^\beta f_j^{eq} \right) = O(\Delta).$$

Dans la suite, les sommes sur les lettres grecques (de 1 à d) seront implicites en cas de présence d'indices répétés. On pose aussi

$$(36) \quad F_{\alpha\beta} = \sum_{j=0}^J v_j^\alpha v_j^\beta f_j^{eq}.$$

- La preuve de mane à partir de l'identité (29) au lieu de développer cette relation à l'ordre 0 comme à la proposition précédente, on le fait à l'ordre 1. Il vient

$$(37) \quad \left\{ \begin{aligned} m_k + \Delta t \frac{dm_k}{dt} + O(\Delta^2) &= \\ &= m_k^* - \Delta t \sum_j M_{kj} v_j^\alpha \frac{\partial f_j^*}{\partial x_\alpha} + O(\Delta^2). \end{aligned} \right.$$

On dérive formellement les développements (27) et (28) en temps et en espace respectivement.

Il vient

$$(38) \quad \frac{\partial m_k}{\partial t} = \frac{\partial m_k^{eg}}{\partial t} + O(\Delta)$$

$$(39) \quad \frac{\partial p_j^*}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial p_j^{eg}}{\partial x_\alpha} + O(\Delta)$$

et en reportant ces expressions dans (37), on obtient

$$(40) \quad \left\{ \begin{aligned} m_k + \Delta t \frac{\partial m_k^{eg}}{\partial t} &= \\ &= m_k^* - \Delta t \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\sum_j M_{\alpha j} M_{\beta j} p_j^{eg} \right] + O(\Delta^2) \end{aligned} \right.$$

- on utilise la relation (40) avec $k=0$, i.e. $m_0 = \rho$. Comme $m_0 = m_0^*$, ce terme d'ordre 0 ne contribue pas. On divise par Δt et on remarque que $M_{0j} \equiv 1$. On en déduit

$$\frac{\partial m_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\sum_j M_{\alpha j} p_j^{eg} \right) = O(\Delta),$$

ce qui est exactement la relation (34), compte tenu de la relation (3) qui définit le moment d'impulsion.

- Avec $k = \alpha \in \{1, \dots, d\}$, on a $m_\alpha = m_\alpha^* = \rho u_\alpha$ et le terme d'ordre 0 s'élimine encore. Après division par Δt , on obtient

$$\frac{\partial (\rho u_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[\sum_j M_{\alpha j} M_{\beta j} p_j^{eg} \right] = O(\Delta),$$

relation qui constitue (35), aux différences de notation près. \square

- Avant de passer au second ordre, il faut entrer un peu dans la technique. On définit d'une part le tenseur des moments - inertes, Λ à trois indices par

$$(41) \quad \Lambda_{pq}^r = \sum_{j=0}^J M_{pj} \cdot M_{qj} \cdot M_{jr}^{-1}, \quad 0 \leq p, q, r \leq J.$$

D'autre part, on introduit le défaut d'équilibre θ_k selon les relations

$$(42) \quad \theta_k = \partial_t m_k^{eq} + \sum_j M_{kj} \cdot M_{\beta j} \cdot \partial_\beta b^{eq}, \quad 0 \leq k \leq J.$$

Prop Défaut d'équilibre

on a de façon générale

$$(43) \quad \theta_k = \partial_t m_k^{eq} + \sum_{\beta} \Lambda_{k\beta}^l \partial_\beta m^{eq}, \quad 0 \leq k \leq J.$$

De plus,

$$(44) \quad \theta_i = O(\Delta) \quad \text{si } i \leq d$$

$$(45) \quad \theta_k = O(1) \quad \text{si } k > d.$$

- La relation (43) résulte de (42) et du remplac.

ment de $\partial_{\beta} f^{eq}$ par $\sum_k (M^{-1})_{\beta\ell} \partial_{\ell} m_k^{eq}$ 14

Alors le coefficient Λ_{β}^{ℓ} s'obtient par sommation sur j des produits $M_{kj} \Pi_{\beta} (M^{-1})_{\ell j}$.

Les relations (44) ne font qu'exprimer les équations d'Euler (34) et (35). Les relations (45) expriment qu'à priori, θ_k ne tend pas vers 0 si $\Delta t \rightarrow 0$; car alors on disposerait de loi de conservation supplémentaire, ce qui est à priori exclu. \square

- Nous pouvons maintenant préciser l'ordre Δt des développements (32)(33).

Prop Moments hors équilibre à l'ordre 1.

Avec les hypothèses précédentes (fonctions régulières qui interpolent les valeurs de grille si $\Delta t, \Delta x$ tendent vers 0) et la liberté de dériver formellement les développements limites, il vient

$$(46) \quad m_k = m_k^{eq} - \frac{\Delta t}{\theta_k} \theta_k + O(\Delta^2), \quad k > d$$

$$(47) \quad m_k^* = m_k^{eq} + \left(1 - \frac{1}{\theta_k}\right) \Delta t \theta_k + O(\Delta^2), \quad k > d$$

- La preuve réelle du développement (46) et de la relation (8) qui lie m_k et m_k^* :

$$m_k - m_k^* = -\Delta t \sigma_k + O(\Delta^2) \text{ d'une part}$$

$$m_k - m_k^* = \rho_k (m_k - m_k^{eq}) \text{ d'autre part}$$

et on en déduit la relation (46). Si on reporte le développement (46) au sein de (8), il vient :

$$\begin{aligned} m_k^* &= m_k^{eq} - \frac{\Delta t}{\rho_k} \sigma_k + O(\Delta^2) + \rho_k \left(\frac{\Delta t}{\rho_k} \sigma_k + O(\Delta^2) \right) \\ &= m_k^{eq} + \left(1 - \frac{\Delta t}{\rho_k} \right) \sigma_k + O(\Delta^2), \end{aligned}$$

et la relation (49) est établie. \square

• Développement au second ordre

on a d'abord une proposition préliminaire :

Prop Lemme technique

Avec les notations précédentes et les méthodes de calcul déjà utilisées, il vient

$$(48) \begin{cases} m_k + \Delta t \sum_j M_{kj} \sigma_j + \frac{1}{2} \Delta t^2 \sum_j \sum_{\beta} M_{kj}^2 \sigma_j^{\beta} = O(\Delta^3) + \\ = m_k^* - \Delta t \sum_j \frac{M_{kj}}{\rho_j} \sigma_j + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_j \frac{M_{kj}}{\rho_j} \sum_{\beta} \sum_{\delta} \sigma_j^{\beta} \sigma_j^{\delta} \end{cases}$$

• La preuve consiste par exemple à dévelop-
per la relation (1) au second ordre rela-
tivement à l'infiniment petit numérique
 $\Delta = O(\Delta t) = O(\Delta x)$ [car $\lambda \equiv \Delta x / \Delta t$ est tou-
jours fixé]. Il vient

$$f_j + \Delta t \partial_t f_j + \frac{1}{2} \Delta t^2 \partial_t^2 f_j + O(\Delta^3) =$$

$$f_j^* - \Delta t v_j \cdot \beta_j \partial_\beta f_j^* + \frac{\Delta t^2}{2} v_j \cdot \beta_j v_j \cdot \partial_\beta \partial_\beta f_j^* + O(\Delta^3).$$

On utilise alors l'équilibre (27)(28) pour les
termes d'ordre deux :

$$(49) \left\{ \begin{aligned} & f_j + \Delta t \partial_t f_j + \frac{\Delta t^2}{2} \partial_t^2 f_j^{eq} = \\ & = f_j^* - \Delta t v_j \cdot \beta_j \partial_\beta f_j^* + \frac{1}{2} \Delta t^2 M_{\beta j} M_{\beta j} \partial_\beta \partial_\beta f_j^* + O(\Delta^3) \end{aligned} \right.$$

On multiplie ensuite par $M_{\beta j}$ (qui est une
matrice fixe) et on somme sur j (de 0 à J).
La relation (48) résulte alors de $M_{\beta j} = v_j \cdot \beta_j$. \square

• Le lemme établi à la relation (48) a de nombreuses
conséquences

Prop Conservation de la masse à l'ordre deux

Dans le contexte décrit plus haut, on a

$$(50) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_\alpha (\rho u_\alpha) = O(\Delta^2).$$

Un schéma de Boltzmann sur réseau conserve la masse à l'ordre deux.

- La preuve de la relation (50) part de la relation (48) avec $k=0$. Il faut exprimer les termes non banals, ie $\partial_t^2 \rho$ et

$$\begin{aligned} \partial_\beta \left(\sum_j M_{0j} \cdot M_{\beta j} p_j^* \right) &= \partial_\beta \left(\sum_j M_{\beta j} p_j^* \right) \text{ car } M_{0j} \equiv 1 \\ &= \partial_\beta \left(\sum_j M_{\beta j} p_j \right) \text{ car ce moment est conservé} \\ &= \partial_\beta (\rho u_\beta) \end{aligned}$$

Par ailleurs, $\partial_t^2 \rho = \partial_t (-\partial_\alpha q_\alpha) + O(\Delta)$ cf (34)

$$= -\partial_\alpha (-\partial_\beta F^{\alpha\beta}) + O(\Delta) \text{ cf (35)}$$

$$(51) \quad \partial_t^2 \rho = \partial_\alpha \partial_\beta F^{\alpha\beta} + O(\Delta).$$

* On reporte cette expression dans (48) et il reste après division par Δt :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \frac{\Delta t}{2} \partial_\alpha \partial_\beta \left(\sum_j M_{\alpha j} \Pi_{\beta j} p_j^{eq} \right) + \partial_\beta q_\beta \\ - \frac{\Delta t}{2} \sum_j M_{0j} \Pi_{\beta j} \Pi_{\alpha j} (\partial_\beta \partial_\alpha p_j^{eq}) = O(\Delta^2). \end{aligned}$$

Les deux termes en Δt sont égaux car $M_{0j} \equiv 1$.
La relation (50) résulte de la relation précédente

- On rappelle ici que la relaxation $m_k \rightarrow m_k^*$ (relation (8)) peut être vue comme l'emploi d'un schéma d'Euler explicite pour la relaxation du moment $m_k(t)$ vers l'équilibre m_k^{eq} .

$$(52) \quad \frac{d}{dt} (m_k - m_k^{eq}) + \frac{1}{\tau_k} (m_k - m_k^{eq}) = 0, \quad k > d, \tau_k > 0.$$

Alors m_k^* est l'approximation de $m_k(t + \Delta t)$ à l'aide du schéma d'Euler explicite :

$$(53) \quad \frac{1}{\Delta t} (m_k^* - m_k) + \frac{1}{\tau_k} (m_k - m_k^{eq}) = 0, \quad k > d.$$

Cette dernière relation est identique à (8) avec le choix

$$(54) \quad \lambda_k = \Delta t / \tau_k, \quad k > d.$$

* On sait que le schéma d'Euler est monotone sous la condition $0 < \lambda_k \leq 1$. On obtient en général qu'il reste stable sous la condition moins restrictive

$$(55) \quad 0 < \lambda_k < 2.$$

Ce sont précisément les valeurs de λ_k comprises entre 1 et 2 qui vont avoir de l'intérêt pour les simulations effectuées avec le schéma de Boltzmann sur réseau. On introduit même le coefficient de Michel Hénon (1987):

$$(56) \quad \sigma_k = \frac{1}{\lambda_k} - \frac{1}{2}, \quad k > d.$$

La condition $\sigma_k > 0$ exprime exactement les deux inégalités (55).

19

Prop Conservation de l'impulsion à l'ordre deux.

Dans le contexte décrit plus haut, avec $F^{\alpha\beta}$ introduit en (36), σ_k en (56), $\Lambda_{k\beta}^l$ en (41) et θ_k en (42), on a l'équation aux dérivées partielles équivalente au schéma de Boltzmann sur réseau suivante pour les composantes de l'impulsion :

$$(57) \quad \partial_t q_\alpha + \partial_\beta F^{\alpha\beta} - \Delta t \sum_{k>d} \sigma_k \Lambda_{k\beta}^l (\partial_\beta \theta_k) = o(\Delta^2), \quad 1 \leq \alpha \leq d.$$

- La preuve est fondée sur le lemme (48), utilisé avec $k = \alpha \in \{1, \dots, d\}$. Après division par Δt , puisque $m_\alpha = m_\alpha^* = m_\alpha^{eq} = q_\alpha = \rho u_\alpha$, il vient

$$(58) \quad \begin{cases} \partial_t q_\alpha + \frac{\Delta t}{2} \partial_t^2 q_\alpha + \sum_j M_{\alpha j} M_{\beta j} \partial_\beta p_j^* \\ - \frac{\Delta t}{2} \sum_j \Pi_{\alpha j} \Pi_{\beta j} M_{\alpha j} \partial_\beta p_j^{eq} = o(\Delta^2) \end{cases}$$

On a, compte tenu du développement (35) de l'impulsion au premier ordre :

$$\begin{aligned} \partial_t^2 q_\alpha &= -\partial_t (F^{\alpha\beta}) + o(\Delta t) \\ &= -\partial_\beta \left\{ \sum_j M_{\alpha j} M_{\beta j} \partial_t p_j^{eq} \right\} + o(\Delta t) \end{aligned}$$

$$\partial_t^2 q_\alpha = -\partial_\beta \left\{ \sum_{j,l} M_{jl} M_{\alpha j} M_{jl}^{-1} \partial_t m_l^{eq} \right\} + O(\Delta) \quad 20$$

$$= -\partial_\beta \sum_{j,l} M_{jl} M_{\alpha j} M_{jl}^{-1} \left\{ \theta_l - \sum_p M_{lp} M_{\alpha p} \partial_\beta p_p^{eq} \right\} + O(\Delta)$$

compte tenu de (43)

$$= -\partial_\beta \sum_l \Lambda_{\alpha\beta}^l \theta_l + \sum_{jlp} M_{jl} M_{\alpha j} M_{jl}^{-1} M_{lp} M_{\alpha p} \left(\partial_\beta \partial_\alpha p_p^{eq} \right) + O(\Delta)$$

$$= -\partial_\beta \left(\sum_{l>d} \Lambda_{\alpha\beta}^l \theta_l \right) + \sum_{jlp} M_{jl} M_{\alpha j} M_{jl}^{-1} M_{lp} M_{\alpha p} \left(\partial_\beta \partial_\alpha p_p^{eq} \right) + O(\Delta)$$

car $\theta_l = O(\Delta)$ si $l \leq d$, cf (44)

$$(59) \quad \partial_t^2 q_\alpha = -\partial_\beta \left(\sum_{l>d} \Lambda_{\alpha\beta}^l \theta_l \right) + \sum_{jlp} M_{jl} M_{\alpha j} M_{jl}^{-1} M_{lp} M_{\alpha p} \left(\partial_\beta \partial_\alpha p_p^{eq} \right) + O(\Delta)$$

• Par ailleurs, en réécrivant les relations (46) et (47) à l'aide du paramètre σ_k introduit en (56), c'est à dire

$$(60) \quad \begin{cases} m_k = m_k^{eq} - \Delta t \left(\frac{1}{2} + \sigma_k \right) \theta_k + O(\Delta^2), & k > d \\ m_k^* = m_k^{eq} + \Delta t \left(\frac{1}{2} - \sigma_k \right) \theta_k + O(\Delta^2), & k > d, \end{cases}$$

on a le calcul suivant

$$\begin{aligned} \sum_j M_{\alpha j} M_{\beta j} \partial_\beta p_j^* &= \sum_{j,l} M_{jl} M_{\alpha j} M_{jl}^{-1} \left(\partial_\beta m_l^* \right) \\ &= \partial_\beta \left\{ \sum_{j,l} M_{jl} M_{\alpha j} M_{jl}^{-1} \left[m_l^{eq} + \Delta t \left(\frac{1}{2} - \sigma_l \right) \theta_l \right] \right\} + O(\Delta^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \partial_{\beta} \left(\sum_j M_j M_j \frac{f^{eq}}{\beta_j} \right) + \\
&\quad + \Delta t \sum_{l \neq d} \left(\sum_j M_j M_j M_j^{-1} \right) \left(\frac{1}{2} - \sigma_l \right) \left(\partial_{\beta} \theta_l \right) + O(\Delta^2) \\
&= \partial_{\beta} F^{\alpha\beta} + \Delta t \sum_{l \neq d} \Lambda_{\alpha\beta}^l \left(\frac{1}{2} - \sigma_l \right) \left(\partial_{\beta} \theta_l \right) + O(\Delta^2),
\end{aligned}$$


expression que l'on reporte au sein de la relation (58). En tenant compte de la relation (59), il en obtient :

$$\begin{aligned}
&\partial_t q_{\alpha} + \frac{\Delta t}{2} \left\{ \partial_{\beta} \left(\sum_{l \neq d} \Lambda_{\alpha\beta}^l \theta_l \right) + \sum_j M_j M_j M_j \left(\partial_{\beta} \frac{f^{eq}}{\beta_j} \right) \right\} \\
&+ \partial_{\beta} F^{\alpha\beta} + \Delta t \sum_{l \neq d} \left(\frac{1}{2} - \sigma_l \right) \Lambda_{\alpha\beta}^l \left(\partial_{\beta} \theta_l \right) \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2} \sum_j M_j M_j M_j \left(\partial_{\beta} \frac{f^{eq}}{\beta_j} \right) = O(\Delta^2)
\end{aligned}$$

Les triples produits en M avec double dérivation spatiale s'éliminent. Le terme en $\Lambda_{\alpha\beta}^l \left(\partial_{\beta} \theta_l \right)$ vaut : $-\frac{\Delta t}{2} + \Delta t \left(\frac{1}{2} - \sigma_l \right) = -\Delta t \sigma_l$;

la relation précédente peut s'écrire

$$\partial_t q_{\alpha} + \partial_{\beta} F^{\alpha\beta} - \Delta t \sum_{l \neq d} \sigma_l \Lambda_{\alpha\beta}^l \left(\partial_{\beta} \theta_l \right) = O(\Delta^2)$$

qui n'est qu'une ré-écriture de la relation (57). 

• Application au schéma D2Q9

Nous nous plaçons dans le cas classique de moments m_k orthogonalisés. Nous précisons les matrices $\Lambda_{\alpha\beta}^k$ qui interviennent dans (57) afin de savoir quelles variables Q_k doivent être explicitées.

Prop. Quelques valeurs du tenseur des moments vites

Pour le schéma de Boltzmann sur réseau D2Q9, dans la variante où la matrice M a ses lignes orthogonales (relation (71) du chapitre précédent) on a les valeurs suivantes des $\Lambda_{\alpha\beta}^k$ pour $1 \leq \alpha, \beta \leq 2$ et $0 \leq k \leq 8$:

$$(61) \quad \Lambda_{11}^{\bullet} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \lambda^2 & 0 & 0 & \frac{1}{6} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(62) \quad \Lambda_{12}^{\bullet} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(63) \quad \Lambda_{22}^{\bullet} = \begin{pmatrix} \frac{2\lambda^2}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{6} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- La preuve est un calcul austère qu'on peut mener avec un logiciel de calcul formel. Seule la relation (62) est claire. On a eu effet

$$(64) \quad v_j^1 v_j^2 = M_{ij}^{-1} M_{ij} = (XY)(v_j^i) = M_{5j}^{-1}, \quad \forall j=0, \dots, 8.$$

on multiplie cette identité par M_{jk}^{-1} et on

somme sur j de 0 à 8. Il vient

$$\Lambda_{12}^k = \sum_j M_{5j} \cdot M_{jk}^{-1} = \delta_{5k}, \quad 0 \leq k \leq J$$

ce qui exprime exactement la relation (62). \square

Prop. D'autres valeurs des moments - vitesses

Afin de préparer le calcul de θ_3, θ_4 et θ_5 qui interviennent dans la relation (57), on a le résultat préliminaire

$$(65) \quad \Lambda_{31}^\bullet = \begin{pmatrix} 0 & \lambda^2 & 0 & 000 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(66) \quad \Lambda_{32}^\bullet = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \lambda^2 & 000 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(67) \quad \Lambda_{41}^\bullet = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\lambda^2}{3} & 0 & 000 & -\frac{1}{3} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(68) \quad \Lambda_{42}^\bullet = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\frac{\lambda^2}{3} & 000 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}$$

$$(69) \quad \Lambda_{51}^\bullet = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{2\lambda^2}{3} & 000 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}$$

$$(70) \quad \Lambda_{52}^\bullet = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2\lambda^2}{3} & 0 & 000 & \frac{1}{3} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- La preuve est un long calcul algébrique sans intérêt particulier. Il est laissé au lecteur!
Pour la proposition suivante, nous notons $\mathcal{O}(NL)$ des termes non linéaires d'ordre deux ou plus, sachant que seule la linéarisation de θ_k qui peut se réinterpréter en termes de mécanique

des fluides.

Prop Linéarisation de quelques défauts d'équilibre.

Avec le défaut d'équilibre calculé à la relation (43), on a pour le schéma D2Q9 avec moments orthogonaux :

$$(71) \quad \theta_3 = 2\lambda^2 (\partial_x q_x + \partial_y q_y) + o(NL) + O(\Delta)$$

$$(72) \quad \theta_4 = \frac{2\lambda^2}{3} (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + o(NL) + O(\Delta)$$

$$(73) \quad \theta_5 = \frac{\lambda^2}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) + o(NL) + O(\Delta).$$

- La preuve utilise explicitement les moments à l'équilibre dont nous rappelons la valeur (relation (73) du chapitre précédent) :

$$(74) \quad \left\{ \begin{array}{l} \rho, \rho u_x, \rho u_y, \rho(3|u|^2 - 2\lambda^2), \rho(u_x^2 - u_y^2), \\ \rho u_x u_y, -\lambda^2 \rho u_x, -\lambda^2 \rho u_y, \rho \lambda^2 (\lambda^2 - 3|u|^2) \end{array} \right.$$

On déduit alors de (43), (65), (66) et (74) :

$$\begin{aligned} \theta_3 &= \partial_t \{ 3\rho|u|^2 - 2\lambda^2 \rho \} + \partial_x [\lambda^2 q_x + (-\lambda^2 q_x)] \\ &\quad + \partial_y [\lambda^2 q_y + (-\lambda^2 q_y)] \\ &= -2\lambda^2 \partial_t \rho + o(NL) \\ &= 2\lambda^2 (\partial_x q_x + \partial_y q_y) + o(NL) + O(\Delta) \end{aligned}$$

à l'aide de la conservation de la masse au premier ordre. La relation (71) en résulte.

* De façon analogue, au vu de (67)(68) et (74):

$$\begin{aligned} \sigma_4 &= \partial_t (\rho u_x^2 - \rho u_y^2) + \partial_x \left[\frac{\lambda^2}{3} q_x - \frac{1}{3} (-\lambda^2 q_x) \right] \\ &\quad + \partial_y \left[-\frac{\lambda^2}{3} q_y + \frac{1}{3} (-\lambda^2 q_y) \right] \\ &= \frac{2\lambda^2}{3} (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + o(NL) \end{aligned}$$

ce qui établit la relation (72). Enfin, avec les relations (69) et (70), on a

$$\begin{aligned} \sigma_5 &= \partial_t (\rho u_x u_y) + \partial_x \left[\frac{2}{3} \lambda^2 q_y + \frac{1}{3} (-\lambda^2 q_y) \right] \\ &\quad + \partial_y \left[\frac{2}{3} \lambda^2 q_x + \frac{1}{3} (-\lambda^2 q_x) \right] \\ &= \frac{1}{3} \lambda^2 (\partial_x q_x + \partial_y q_y) + o(N) \end{aligned}$$

et la relation (73) est établie, ce qui montre la proposition. \square

Prop) Lien avec les équations fluides.

sous la condition

$$(75) \quad \lambda_4 = \lambda_5,$$

c'est à dire $\sigma_4 = \sigma_5$ de façon équivalente, l'équation de l'impulsion (57) équivalente au second ordre peut se réécrire sous la forme

$$(76) \quad \partial_t q_\alpha + \partial_\beta F^{\alpha\beta} - \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} = \sigma(ML) + O(\Delta^2), \quad 1 \leq \alpha \leq d,$$

avec un tenseur visqueux $\tau_{\alpha\beta}$ donné par

$$(77) \quad \tau_{\alpha\beta} = \mu (\partial_\alpha q_\beta + \partial_\beta q_\alpha) + (\gamma - \mu) (\operatorname{div} q) \delta_{\alpha\beta}, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq d,$$

une viscosité de cisaillement μ et une viscosité de volume γ qui satisfont aux relations

$$(78) \quad \mu = \frac{\lambda^2}{3} \sigma_4 \Delta t$$

$$(79) \quad \gamma = \frac{\lambda^2}{3} \sigma_3 \Delta t.$$

Le schéma D2Q9 a l'aptitude d'approcher à l'ordre deux, aux effets non linéaires près relatif au terme de diffusion, les équations de Navier-Stokes des fluides compressibles dans l'approximation acoustique.

- La preuve consiste d'abord à remarquer que si $\tau_{\alpha\beta}$ est donné par la relation (77), on a

$$(80) \quad \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} = \mu \Delta q_\alpha - \gamma \partial_\alpha (\operatorname{div} q), \quad \alpha \in \{1, 2\}.$$

on cherche donc à mettre en évidence cette structure caractéristique à partir des relations (57) de conservation de l'impulsion à l'ordre 2.

$$\begin{aligned}
 \text{or} \\
 \sum_{l>2} \Delta t \sigma_l \Lambda_{1\beta}^l \left(\partial_\beta \theta_l \right) &= \\
 &= \Delta t \partial_x \left\{ \frac{1}{6} \sigma_3 \theta_3 + \frac{1}{2} \sigma_4 \theta_4 \right\} + \Delta t \partial_y (\sigma_5 \theta_5) + o(\Delta^2) \\
 &= \Delta t \partial_x \left\{ \frac{1}{6} \sigma_3 (2\lambda^2 \operatorname{div} q) + \frac{\lambda^2}{3} \sigma_4 (\partial_x q_x - \partial_y q_y) \right\} \\
 &\quad + \Delta t \partial_y \left\{ \sigma_5 \frac{\lambda^2}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \right\} + o(NL) + o(\Delta^2) \\
 &= \Delta t \frac{\lambda^2}{3} \Delta q_x + \Delta t \frac{\lambda^2}{3} \partial_x (\operatorname{div} q) + o(NL) + o(\Delta^2)
 \end{aligned}$$

$$\text{si } \sigma_4 = \sigma_5$$

ce qui prouve la relation (76) pour $\alpha=1$. Pour $\alpha=2$,

on a

$$\begin{aligned}
 \sum_{l>2} \Delta t \sigma_l \Lambda_{2\beta}^l \left(\partial_\beta \theta_l \right) &= \\
 &= \Delta t \partial_x (\sigma_5 \theta_5) + \Delta t \partial_y \left\{ \frac{1}{6} \sigma_3 \theta_3 - \frac{1}{2} \sigma_4 \theta_4 \right\} \\
 &= \Delta t \partial_x \left\{ \frac{\lambda^2}{3} \sigma_5 (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \right\} \\
 &\quad + \Delta t \partial_y \left\{ \frac{1}{6} \sigma_3 \cdot (2\lambda^2) (\partial_x q_x + \partial_y q_y) \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} \cdot \frac{2\lambda^2}{3} \sigma_4 (\partial_x q_x - \partial_y q_y) \right\} + o(NL) + o(\Delta^2) \\
 &= \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \sigma_4 \Delta q_y + \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \sigma_3 \partial_y (\operatorname{div} q) + o(NL) + o(\Delta^2)
 \end{aligned}$$

$$\text{si } \sigma_4 = \sigma_5$$



Jubois

30 mars 2010.