



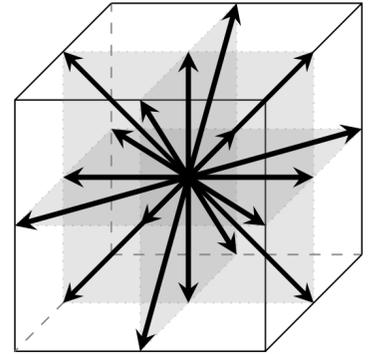
# Développement de modèles conservatifs pour la LBM hybride compressible

Groupe de travail « Schémas de Boltzmann sur réseau »  
23 Mars 2022

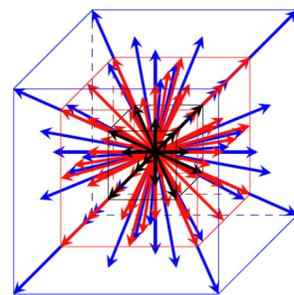
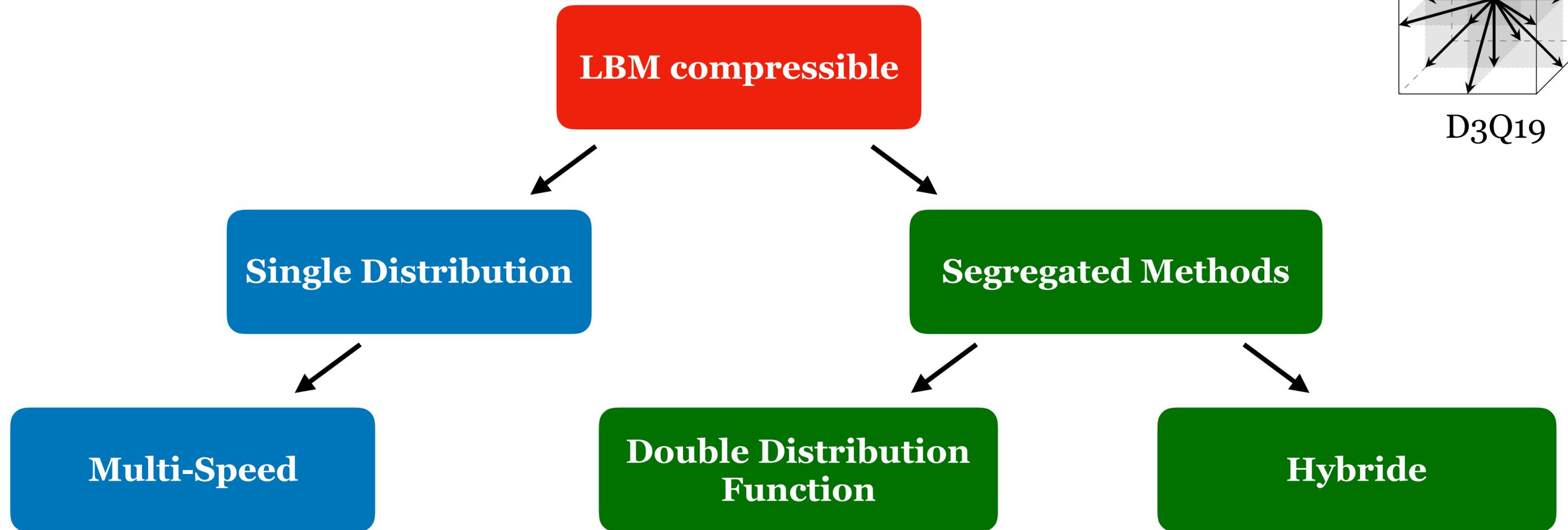
Gauthier Wissocq, Thomas Coratger, Gabriel Farag, Song Zhao,  
Pierre Boivin, Pierre Sagaut

# LBM compressible : différentes approches

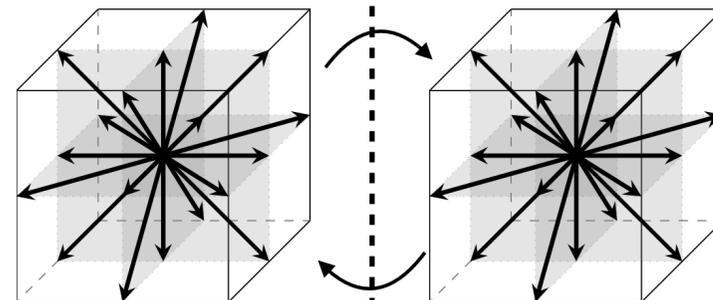
La **LBM standard** est limitée aux écoulements isothermes faiblement compressibles.



D3Q19

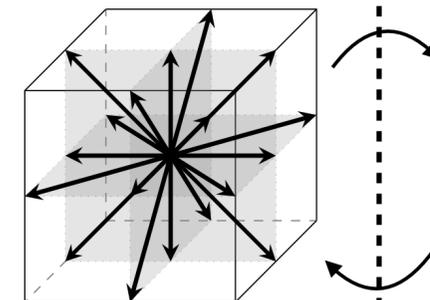


D3Q103



D3Q19

D3Q19

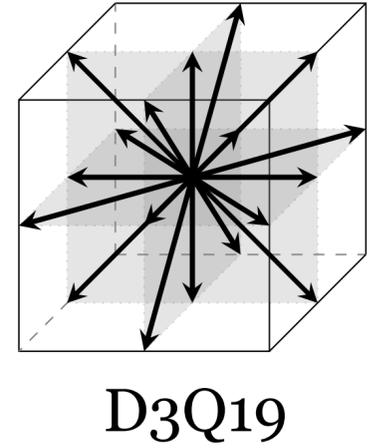


D3Q19

Schéma FV/FD pour l'équation d'énergie

# LBM compressible : différentes approches

La **LBM standard** est limitée aux écoulements isothermes faiblement compressibles.



**LBM compressible**

Single Distribution

**Segregated Methods**

Multi-Speed

Double Distribution Function

**Hybride**

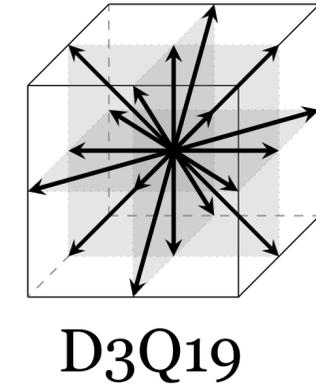
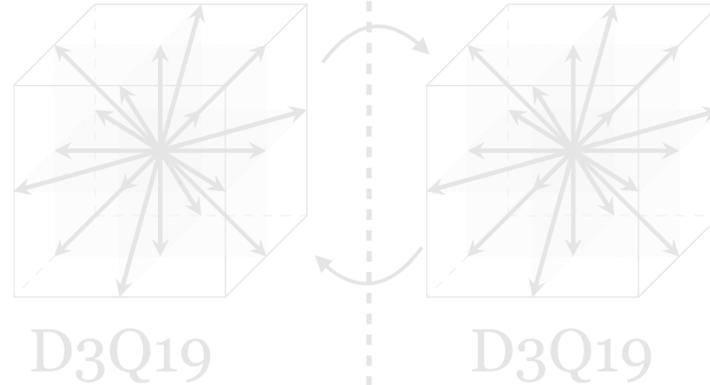
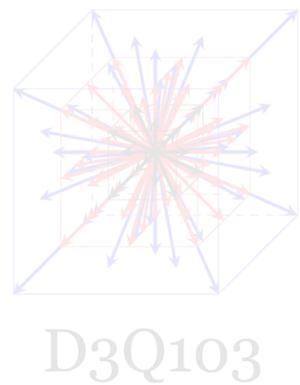
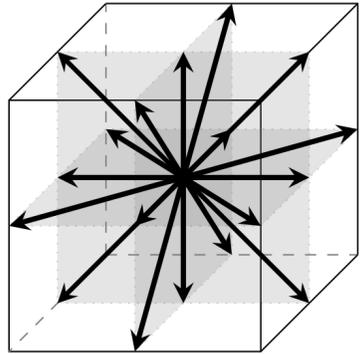


Schéma FV/FD pour l'équation d'énergie

# Principe de l'approche hybride compressible

## Méthode lattice Boltzmann

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{eq}(x, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t/2}\right) f_i^{neq}(x, t) + \frac{\Delta t}{2} \Psi_i$$



D3Q19

$$\begin{cases} f_i^{eq} = f_i^{eq}(f_j) & \text{(équilibre)} \\ f_i^{neq} = f_i^{neq}(f_j) & \text{(hors-équilibre)} \\ \Psi_i = \Psi_i(f_j) & \text{(correction en Mach)} \\ \tau \sim \text{viscosité} \end{cases}$$

$$\rho = \sum_i f_i$$

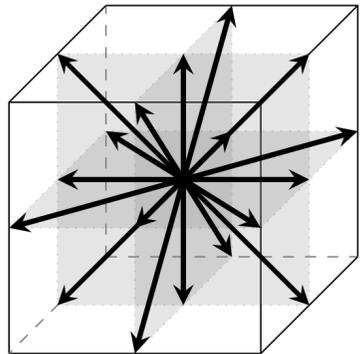
$$\rho u = \sum_i e_i f_i$$

Résout les équations de masse et de quantité de mouvement

# Principe de l'approche hybride compressible

## Méthode lattice Boltzmann

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{eq}(x, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t/2}\right) f_i^{neq}(x, t) + \frac{\Delta t}{2} \Psi_i$$



D3Q19

$$\begin{cases} f_i^{eq} = f_i^{eq}(f_j, T) & \text{(équilibre)} \\ f_i^{neq} = f_i^{neq}(f_j, T) & \text{(hors-équilibre)} \\ \Psi_i = \Psi_i(f_j, T) & \text{(correction en Mach)} \\ \tau \sim \text{viscosité} \end{cases}$$

$$\rho = \sum_i f_i$$

$$\rho u = \sum_i e_i f_i$$

Résout les équations de masse et de quantité de mouvement

## Différence finies / Volumes finis

Une forme discrète de l'équation d'énergie est explicitement résolue. Plusieurs possibilités :

Température :  $\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + (\gamma - 1) \rho T \frac{\partial u}{\partial x} = \text{Heating} + \text{Viscosity}$

Energie totale :  $\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(u(\rho E + \rho T))}{\partial x} = \text{Heating} + \text{Viscosity}$

Entropie :  $\frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} = \text{Heating} + \text{Viscosity}$

Des choix intelligents d'équation et de discrétisation doivent être faits.

Résout l'équation d'énergie

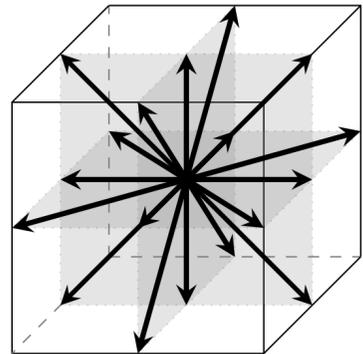
$\rho, u$

$T$

# Principe de l'approche hybride compressible

## Méthode lattice Boltzmann

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^{eq}(x, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau + \Delta t/2}\right) f_i^{neq}(x, t) + \frac{\Delta t}{2} \Psi_i$$



D3Q19

$$\begin{cases} f_i^{eq} = f_i^{eq}(f_j, T) & \text{(équilibre)} \\ f_i^{neq} = f_i^{neq}(f_j, T) & \text{(hors-équilibre)} \\ \Psi_i = \Psi_i(f_j, T) & \text{(correction en Mach)} \\ \tau \sim \text{viscosité} \end{cases}$$

$$\rho = \sum_i f_i$$

$$\rho u = \sum_i e_i f_i$$

Résout les équations de masse et de quantité de mouvement

## Différence finies / Volumes finis

*Formulation conservative*

$$\text{Energie totale : } \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(u(\rho E + \rho T))}{\partial x} = \text{Heating} + \text{Viscosity}$$

$$\text{Entropie : } \frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} = \text{Heating} + \text{Viscosity}$$

*Approche la plus stable [1]*

Résout l'équation d'énergie

$\rho, u$

$T$

# Plan

I. Energie totale vs. Entropie

II. Construction de modèles conservatifs stables

III. Validation

# Plan

I. Energie totale vs. Entropie

II. Construction de modèles conservatifs stables

III. Validation

# I. Caractéristiques d'un système hyperbolique

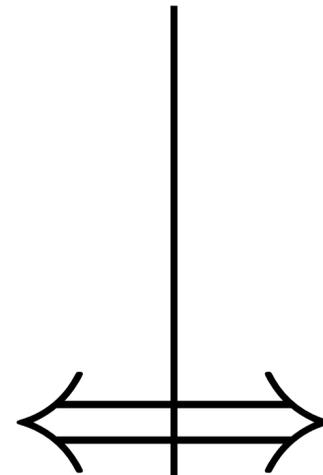
## *Systeme conservatif*

- Systeme Euler **conservatif** :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0$$

Variables conservées :  $U = [\rho, \rho u, \rho E]^T$

Flux :  $F(U) = [\rho u, \rho u^2 + p, u(\rho E + p)]^T$



## *Caracteristiques*

- Décomposition en **caractéristiques** (diagonalisation du système)

$$\frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial x} = 0 \quad \lambda_i = \{u - c, u, u + c\}$$

**Simplees equations d'advection**

# I. Caractéristiques d'un système hyperbolique

## Systeme conservatif

- Systeme Euler **conservatif** :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F(U)}{\partial x} = 0$$

Variables conservées :  $U = [\rho, \rho u, \rho E]^T$

Flux :  $F(U) = [\rho u, \rho u^2 + p, u(\rho E + p)]^T$

- Schéma de **Godunov** (+ solveur de Riemann)

$$U(x, t + 1) - U(x, t) + F_{+1/2}(x, t) - F_{-1/2}(x, t) = 0$$

- LBM couplée avec une discrétisation de l'**énergie totale upwind**

## Caractéristiques

- Décomposition en **caractéristiques** (diagonalisation du système)

$$\frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial t} + \bar{\lambda}_i \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial x} = 0 \quad \bar{\lambda}_i = \{\bar{u} - \bar{c}, \bar{u}, \bar{u} + \bar{c}\}$$

## Simplees équations d'advection

Deux avantages :

- 1) En **linéaire**, équations totalement **découplées**
- 2) On sait comment les discrétiser

- Exemple : discrétisation classique **upwind**

$$\mathcal{L}_i(x, t + 1) - \mathcal{L}_i(x, t) + \lambda_i (\mathcal{L}_i(x, t) - \mathcal{L}_i(x - 1, t)) = 0$$

si  $\lambda_i > 0$

- Les caractéristiques ne sont pas bien discrétisées !

**Très instable [1]**

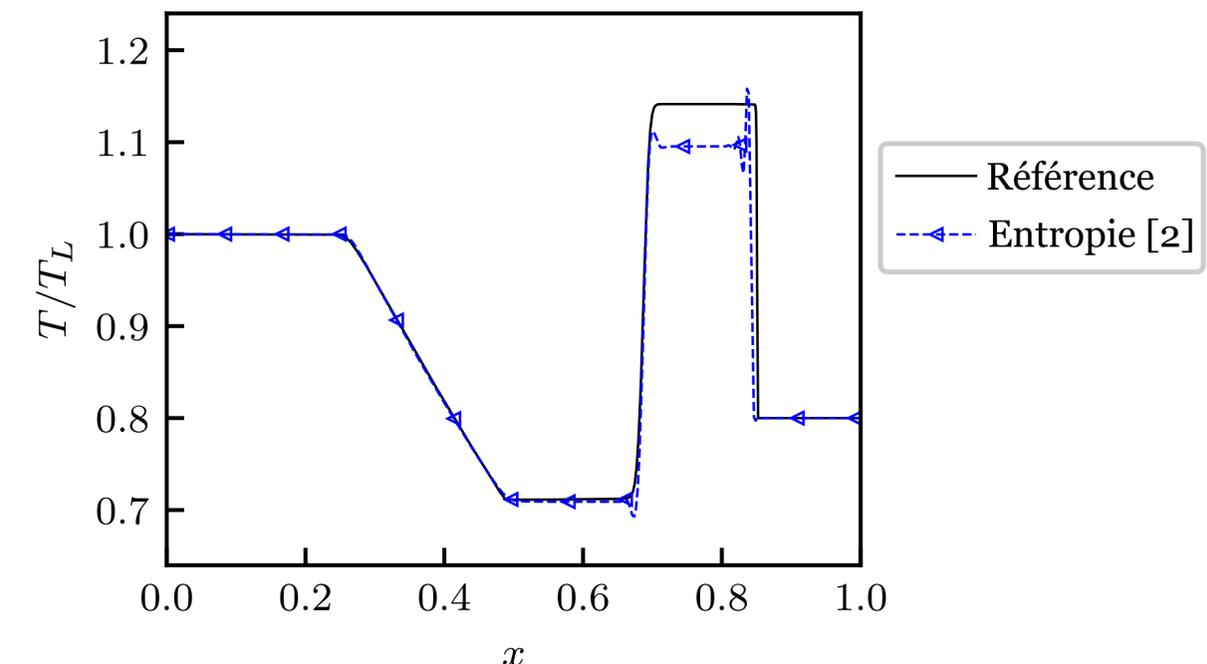
# I. Intérêt de l'entropie

- Pour le couplage hybride, **l'entropie** est une variable particulièrement intéressante car c'est une des **caractéristiques**  $\mathcal{L}_i$ .

$$\frac{\partial s}{\partial t} + u \frac{\partial s}{\partial x} = 0$$

**Equation d'advection**  
(+ terme dissipatif en NS)

- La discrétisation de cette équation n'introduit pas d'instabilités de couplages, puisque les 2 systèmes sont **entièrement découplés** [2]:
  - ▶ Les différences finies s'occupent de l'entropie
  - ▶ La LBM s'occupe des phénomènes isentropiques (acoustique, vorticité)
- **Problème : Formulation non conservative inadaptée au traitement des discontinuités**
- **Question : Comment construire un schéma hybride conservatif en gardant les avantages de l'équation de l'entropie ?**



# Plan

I. Energie totale vs. Entropie

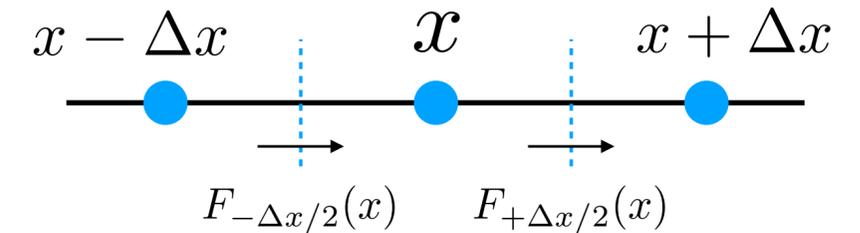
**II. Construction de modèles conservatifs stables**

III. Validation

## II. Qu'est-ce qu'un système conservatif ?

- Ecriture générale d'un système discret en volumes finis :

$$\frac{U(x, t + \Delta t) - U(x, t)}{\Delta t} = \frac{F_{-\Delta x/2}(x, t) - F_{+\Delta x/2}(x, t)}{\Delta x}$$



- Le système est conservatif si le flux entrant dans une cellule est égal au flux quittant la cellule voisine :

$$F_{-\Delta x/2}(x) = F_{+\Delta x/2}(x - \Delta x)$$

- Le système conservatif peut alors se réécrire comme :

$$\frac{U(x, t + \Delta t) - U(x, t)}{\Delta t} = \frac{F_{+\Delta x/2}(x - \Delta x, t) - F_{+\Delta x/2}(x, t)}{\Delta x}$$

**Objectif :** Trouver une écriture unique du flux

## II. Cas du schéma LBM

- Le schéma LBM s'écrit de manière générale comme :

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i^{coll}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t)$$

- Cela permet de calculer les évolutions de masse et de quantité de mouvement comme [3] :

$$\frac{\rho(\mathbf{x}, t + \Delta t) - \rho(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \sum_i (f_i^{coll}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t) - f_i^{coll}(\mathbf{x}, t))$$

$$\frac{\rho u_\alpha(\mathbf{x}, t + \Delta t) - \rho u_\alpha(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \sum_i c_{i,\alpha} (f_i^{coll}(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t) - f_i^{coll}(\mathbf{x}, t))$$

- Réécriture sous une formulation flux :

$$\frac{\Phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) - \Phi(\mathbf{x}, t)}{\Delta t} + \frac{F_{+\Delta x/2}^\Phi(\mathbf{x}, t) - F_{+\Delta x/2}^\Phi(\mathbf{x} - \Delta \mathbf{x}, t)}{\Delta x} = 0 \quad \Phi \in \{\rho, \rho u_\alpha\}$$

**La LBM peut être réécrite sous forme volumes finis conservative [4]**

[3] S. Zhao, G. Farag, P. Boivin, P. Sagaut, Toward fully conservative hybrid lattice Boltzmann methods for compressible flows. Physics of Fluids, 32(12) (2020).

## II. Réécriture du schéma couplé entropie

- La LBM s'écrit comme :

$$\begin{cases} \delta_t \rho + \delta_x F_{\text{LBM}}^\rho = 0, \\ \delta_t(\rho u) + \delta_x F_{\text{LBM}}^{\rho u} = 0. \end{cases} \quad \delta_t, \delta_x \quad : \text{opérateurs dérivées discrètes}$$

- On peut la coupler avec une forme de l'équation de l'entropie :

$$\delta_t s + u \delta_x^* s = 0 \quad \delta_x^* \quad : \text{opérateur choisi pour discrétiser l'équation de l'entropie (upwind, Lax-Wendroff, MUSCL,...)}$$

qui peut se réécrire comme :

$$\delta_t s + u \delta_x \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(s) = 0$$

- Le système couplé s'écrit alors comme :

$$\delta_t V + A^V \delta_x F^V = 0$$

$$A^V = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & u \end{bmatrix}$$

$$V = [\rho, \rho u, s]^T \quad F^V = [F_{\text{LBM}}^\rho, F_{\text{LBM}}^{\rho u}, \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(s)]^T$$

## II. Construction du schéma conservatif 1/2

*Schéma hybride sur l'entropie :*

$$\delta_t V + A^V \delta_x F^V = 0$$

**But :** construire un système conservatif **linéairement équivalent** à ce système

- On multiplie cette équation par la matrice Jacobienne :

$$M = \frac{\partial U}{\partial V} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ h - u^2/2 & u & \rho T \end{bmatrix}$$

$(h = c_p T)$

$$(U = [\rho, \rho u, \rho E]^T)$$

non conservatif

$$\delta_t U + M A^V \delta_x F^V = 0$$

L'équation de l'énergie (dernière ligne) devient :

$$\delta_t(\rho E) + (h - u^2/2)\delta_x F_{\text{LBM}}^\rho + u\delta_x F_{\text{LBM}}^{\rho u} + \rho u T \delta_x \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(s) = 0.$$

- On peut alors utiliser l'égalité différentielle suivante :

$$\rho T u_\alpha ds = d(u(\rho E + p))$$

$$- (h - u^2/2)d(\rho u) - ud(\rho u^2 + p)$$

$$\begin{aligned} \delta_t(\rho E) + \delta_x \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(u(\rho E + p)) + (h - u^2/2)\delta_x (F_{\text{LBM}}^\rho - \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(\rho u)) \\ + u \delta_x (F_{\text{LBM}}^{\rho u} - \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(\rho u^2 + p)) = 0 \end{aligned}$$

## II. Construction du schéma conservatif 2/2

$$\delta_t(\rho E) + \delta_x^*(u(\rho E + p)) + (h - u^2/2)\delta_x(F_{\text{LBM}}^\rho - \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(\rho u)) \\ + u\delta_x(F_{\text{LBM}}^{\rho u} - \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(\rho u^2 + p)) = 0$$

- Les **préfacteurs** peuvent être intégrés dans les dérivées spatiales **sans modifier les propriétés linéaires !**
- On obtient alors une équation **d'énergie totale conservative linéairement équivalente à l'équation d'entropie** :

$$\delta_t(\rho E) + \delta_x F^{\rho E} = 0$$

$$F^{\rho E} = \underbrace{\mathcal{F}_{\text{FD}}^*(u(\rho E + p))}_{\text{Flux d'énergie totale discrétisé avec le schéma initial de l'entropie (Upwind, Lax-Wendroff, MUSCL,...)}} + \underbrace{(h - u^2/2)(F_{\text{LBM}}^\rho - \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(\rho u))}_{\text{Correction permettant de découpler les erreurs liées à la conservation de la masse}} + \underbrace{u(F_{\text{LBM}}^{\rho u} - \mathcal{F}_{\text{FD}}^*(\rho u^2 + p))}_{\text{Correction permettant de découpler les erreurs liées à la conservation de quantité de mouvement + calcul implicite de l'échauffement par effet visqueux}}.$$

Flux d'énergie totale discrétisé avec le schéma initial de l'entropie (Upwind, Lax-Wendroff, MUSCL,...)

Correction permettant de découpler les erreurs liées à la conservation de la masse

Correction permettant de découpler les erreurs liées à la conservation de quantité de mouvement + calcul implicite de l'échauffement par effet visqueux

- L'ajout du terme de Fourier se fait de manière explicite (discrétisation centrée classique)

# Plan

I. Energie totale vs. Entropie

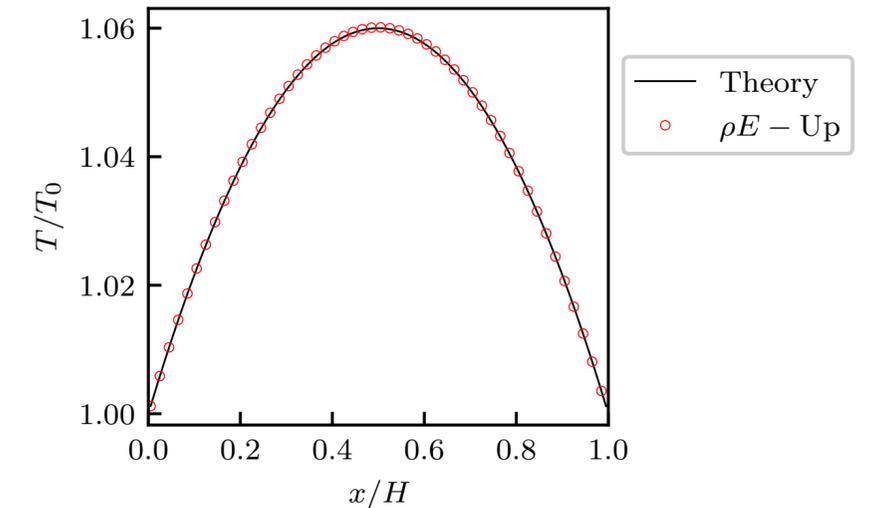
II. Construction de modèles conservatifs stables

III. Validation

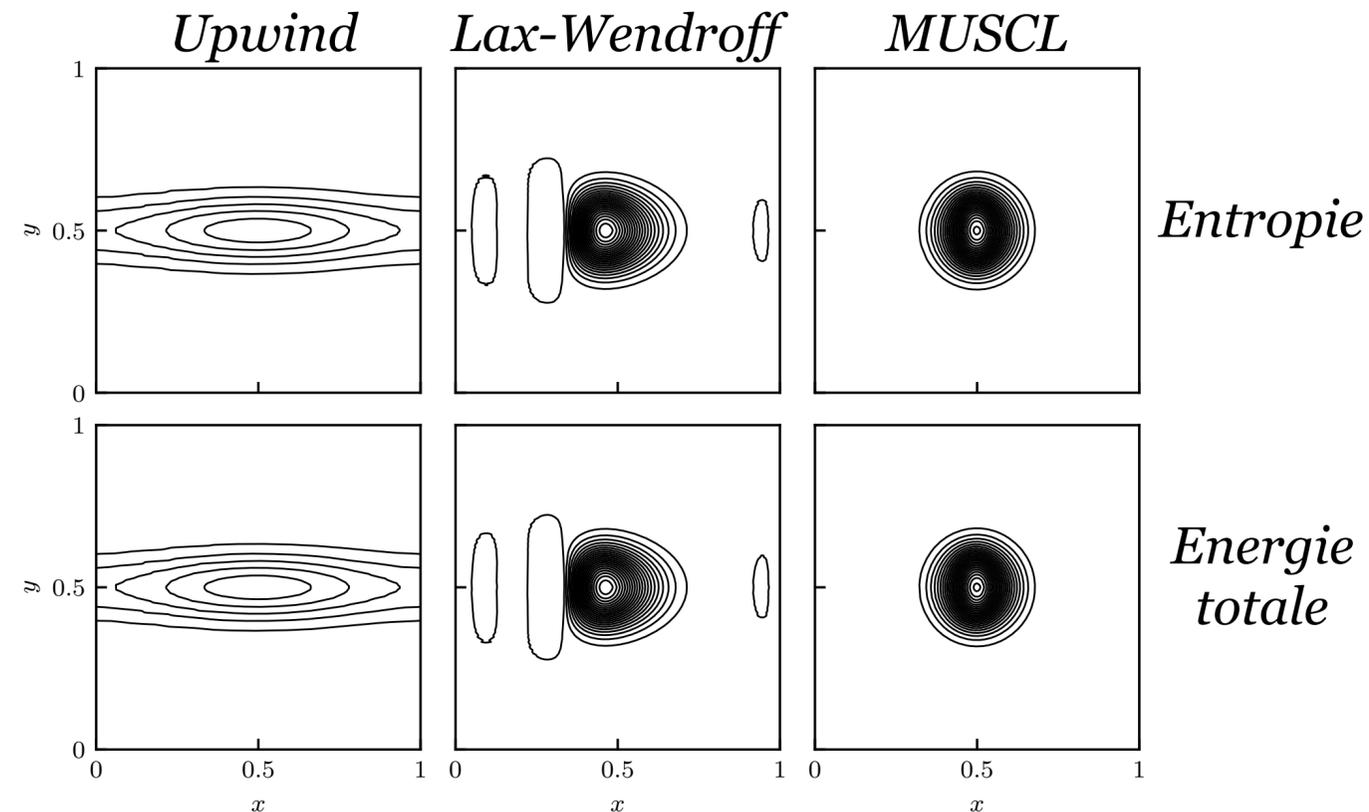
### III. Couette / Spot entropique

- Trois types de modèles énergie totale codés dans proLB : Upwind, Lax-Wendroff et MUSCL. Dans tous les cas tests, utilisation du modèle unifié [2], sigma=1.
- Cas test 1 : Ecoulement de Couette chauffé à Mach = 1.3, 100 points, CFL = 0.5.

Le bon profil de température valide l'échauffement par effet visqueux.



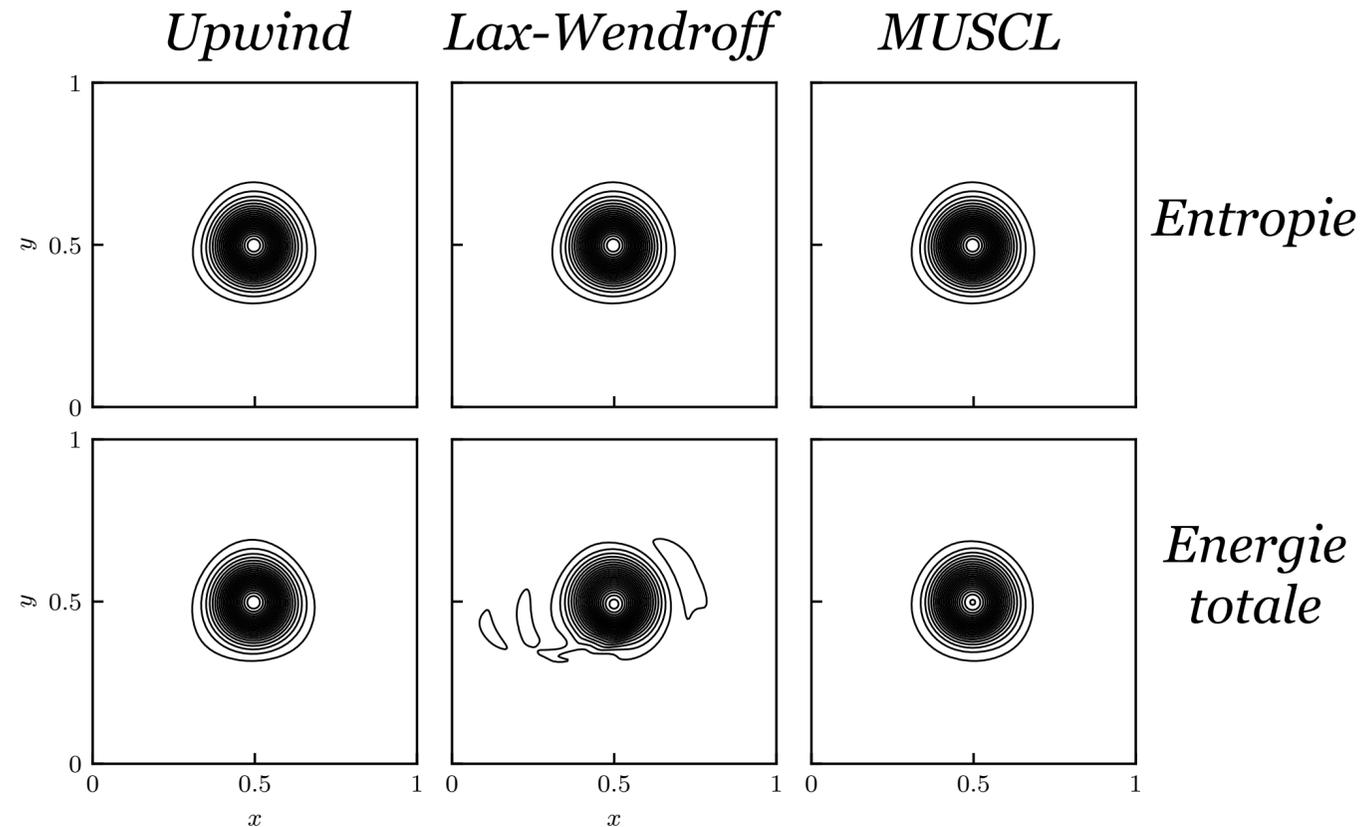
- Cas test 2 : Spot entropique à Mach = 2 sur 20 tours, maillage 200x200 CFL = 0.2



L'équivalence linéaire entre les schémas non conservatifs/conservatifs est validée

# III. Vortex isentropique / Sod

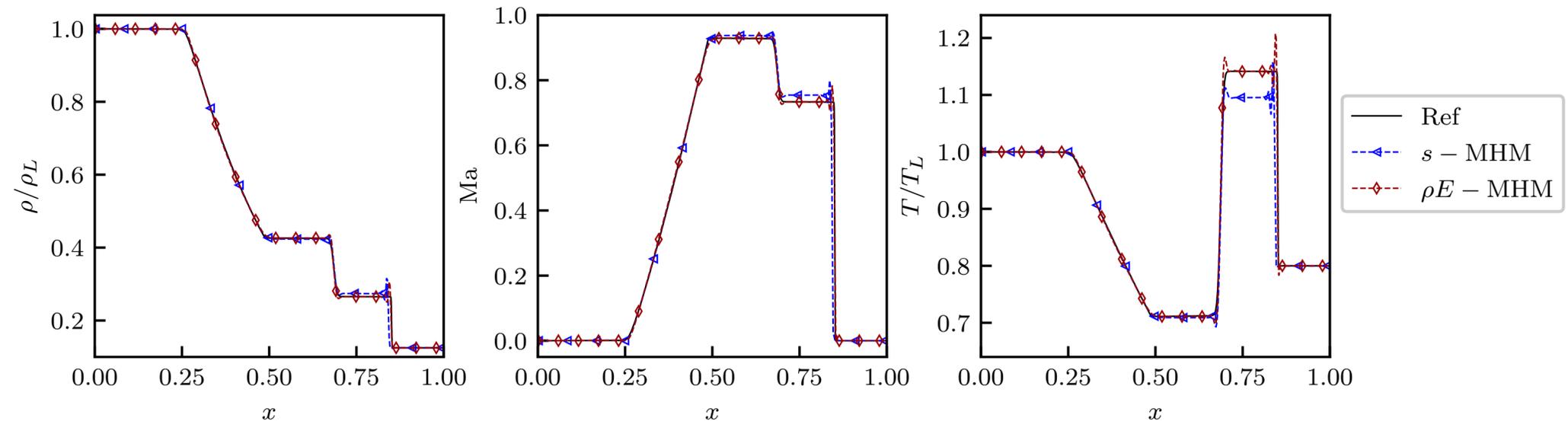
- Cas test 3 : Vortex isentropique à Mach=2 sur 20 tours, maillage 200x200, CFL = 0.2



Cas test très délicat pour la stabilité.  
Comportements très proches entre tous les modèles.  
Seule différence : dispersion sur le LW conservatif.

- Cas test 4 : Tube de Sod sur 400 pts (viscosité nulle, sans senseur de choc) CFL < 0.45

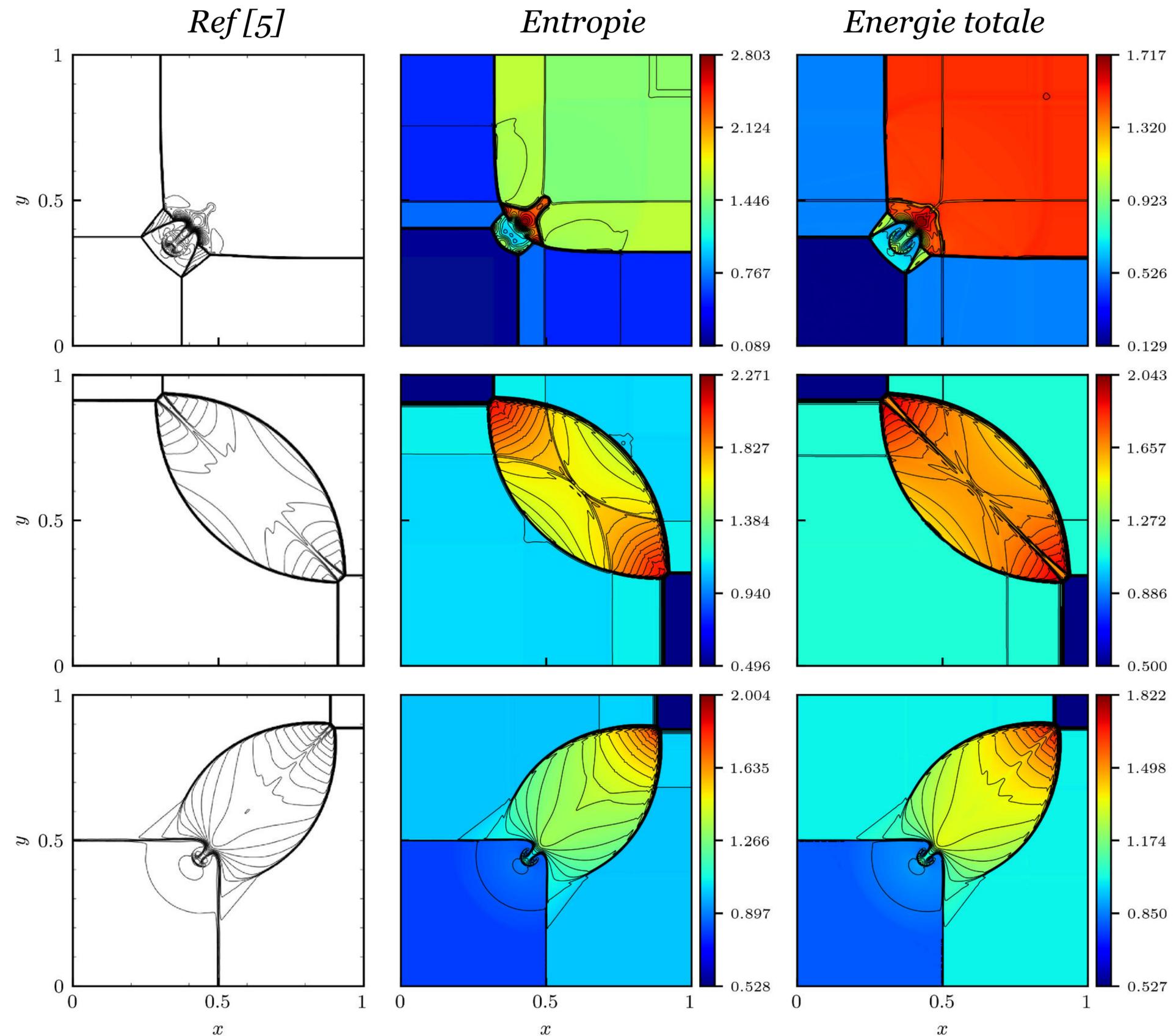
De bonnes relations de saut sont retrouvées



### III. Riemann 2D [5]

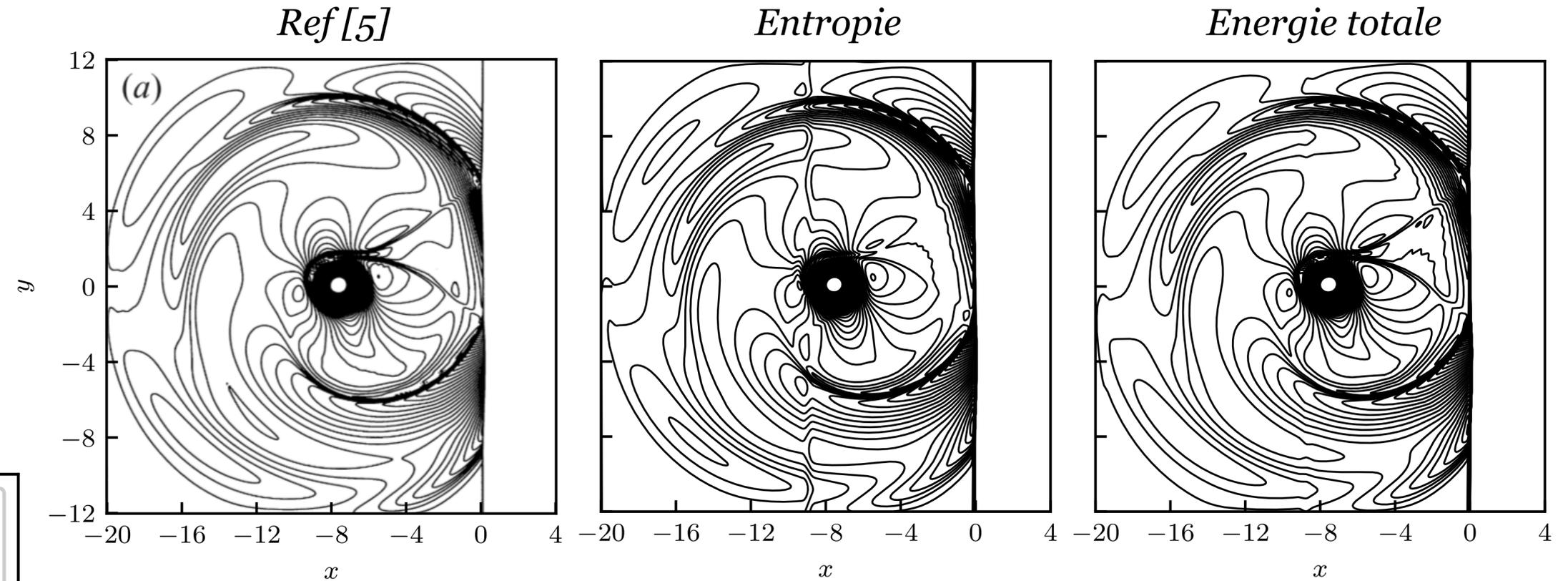
- Modèle utilisé : MUSCL. Viscosité nulle, senseur de choc activé.  
Maillage : 400x400  
CFL < 0.45  
Mach max ~ 3

Bonne structure des chocs

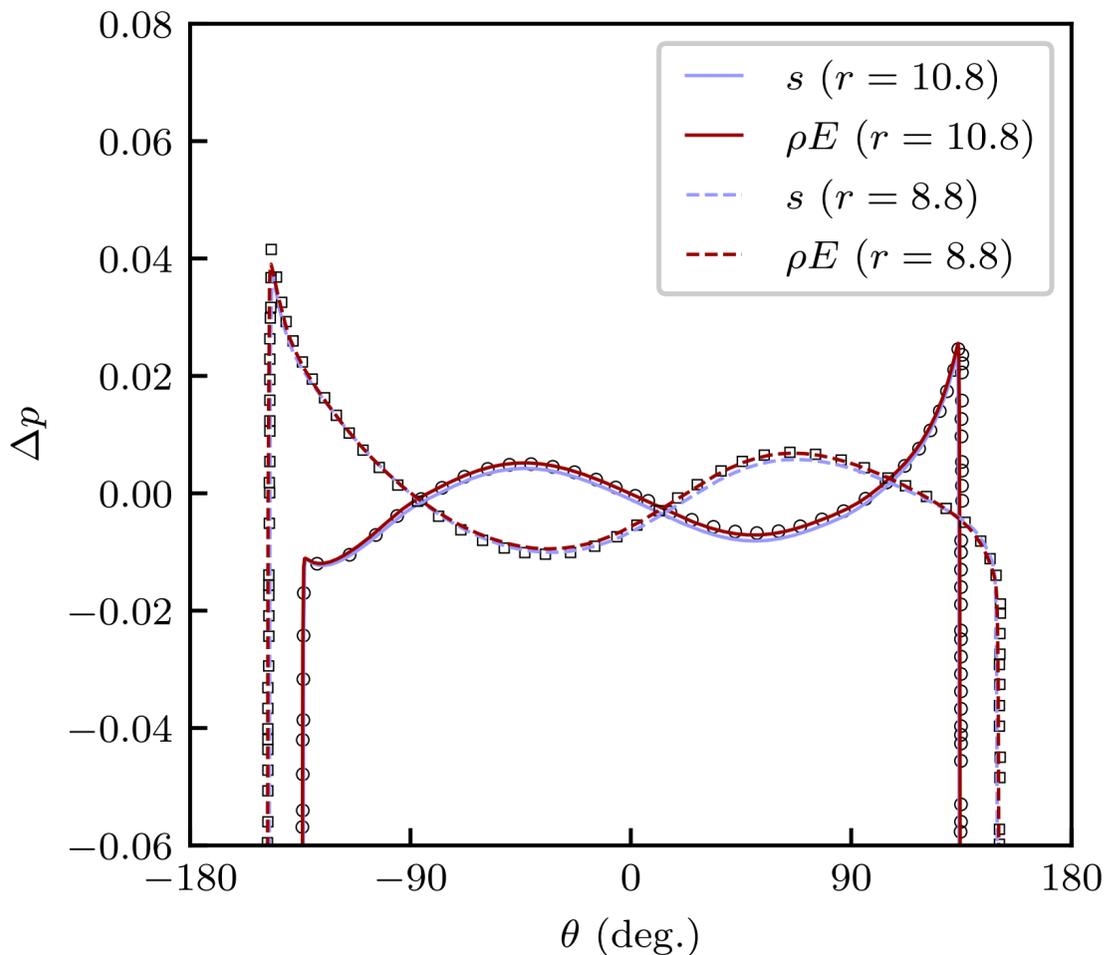


### III. Interaction choc-vortex [6]

- Cas G de Inoue & Hattori [6]  
 $Ma_s = 1.29$ ,  $Ma_v = 0.39$   
 $Re = 800$   
 Modèle utilisé : MUSCL  
 Senseur de choc activé.  
 Maillage : 1120x960  
 $CFL < 0.6$



Bonnes relations de saut avec l'énergie totale  
 Le sillage du vortex est plus fidèle à la référence [6].

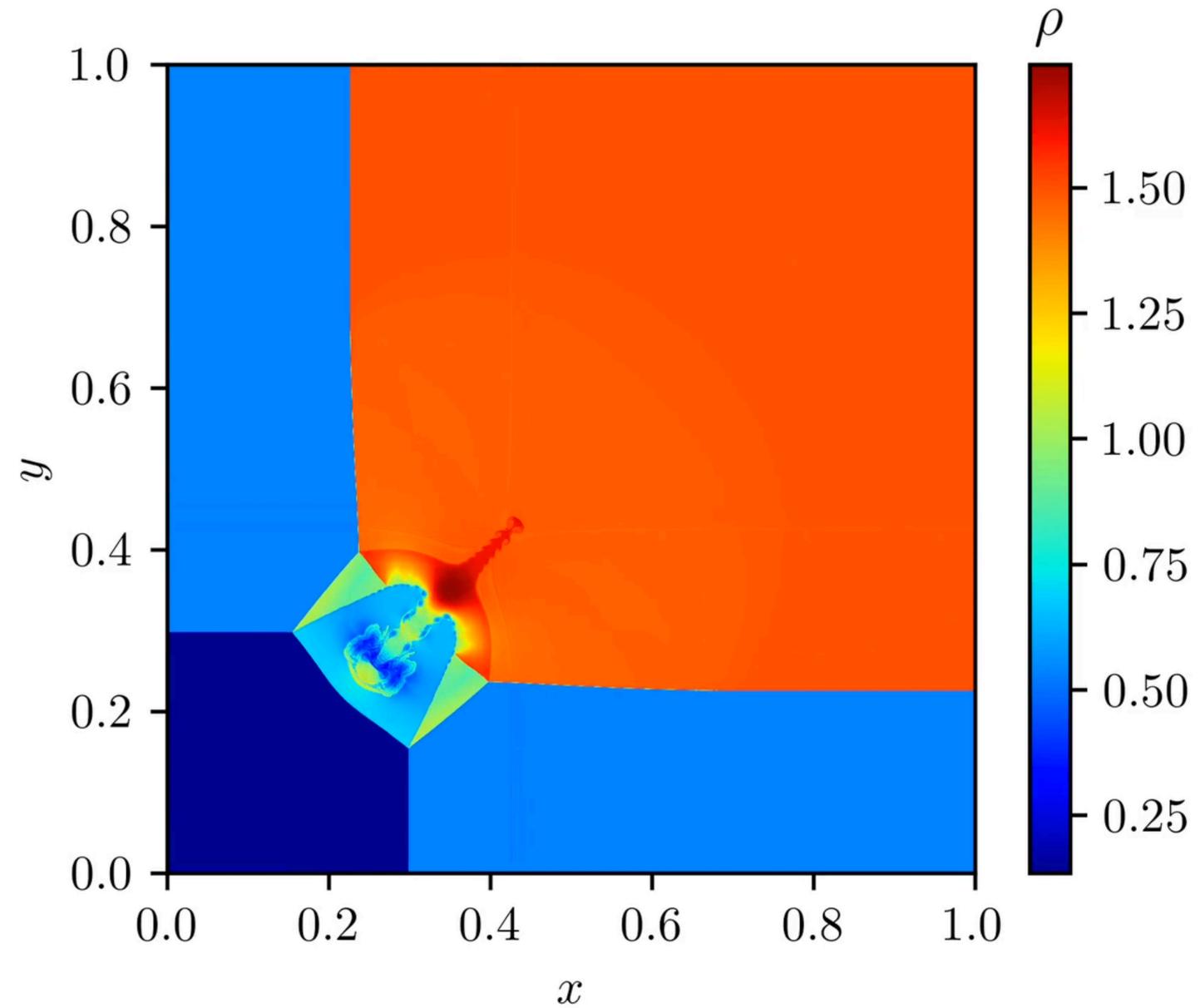


[6] O. Inoue, Y. Hattori, Y., Sound generation by shock-vortex interactions. Journal of Fluid Mechanics, 380, 81–116 (1999).

# Conclusions et perspectives

- Un schéma **LBM hybride conservatif** a été obtenu grâce à :
  - ▶ Une réécriture de la LBM sous forme **volumes finis**
  - ▶ La connaissance d'un schéma sur **l'entropie** (invariant de Riemann)
- Le modèle obtenu est **linéairement équivalent** à son homologue sur l'entropie
  - ▶ Assure la **stabilité linéaire** du schéma hybride conservatif...
  - ▶ ... sans dégrader la **très faible dissipation** de la LBM
- Calcul **implicite de l'échauffement par effet visqueux**, consistant avec le tenseur des contraintes visqueuses LBM
- Trois schémas validés sur des cas académiques compressibles avec/sans discontinuités :
  - ▶ Upwind (ordre 1)
  - ▶ Lax-Wendroff (ordre 2)
  - ▶ MUSCL (ordre 3)
- Perspectives :
  - ▶ Validation sur cas plus réalistes
  - ▶ Etude du surcoût lié au passage en conservatif

# Questions ?



# Schéma LBM unifié [2]

$$f_i^{coll}(\mathbf{x}, t) = f_i^{eq}(\mathbf{x}, t) + \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau}\right) f_i^{neq}(\mathbf{x}, t) + \frac{\Delta t}{2} F_i^E(\mathbf{x}, t)$$

$$\mu + \rho\nu_{sc} = \left(\tau - \frac{\Delta t}{2}\right) \rho c_s^2, \quad \nu_{sc} = s_c \left| \frac{\rho(x - \Delta x, t) - 2\rho(x, t) + \rho(x + \Delta x, t)}{\rho(x - \Delta x, t) + 2\rho(x, t) + \rho(x + \Delta x, t)} \right|,$$

$$\begin{aligned} f_i^{eq} = \omega_i \left\{ \rho + \frac{\omega_i - \delta_{0i}}{\omega_i} \rho(\theta - 1) + \frac{\mathcal{H}_{i,\alpha}^{(1)}}{c_s^2} \rho u_\alpha + \frac{\mathcal{H}_{i,\alpha\beta}^{(2)}}{2c_s^4} \rho u_\alpha u_\beta + \frac{1}{6c_s^6} \left[ 3(\mathcal{H}_{i,xxxy}^{(3)} + \mathcal{H}_{i,yzzz}^{(3)}) (\rho u_x u_x u_y + \rho u_y u_z u_z) \right. \right. \\ + 3(\mathcal{H}_{i,xzzz}^{(3)} + \mathcal{H}_{i,xyyy}^{(3)}) (\rho u_x u_z u_z + \rho u_x u_y u_y) + 3(\mathcal{H}_{i,yyyz}^{(3)} + \mathcal{H}_{i,xxzz}^{(3)}) (\rho u_y u_y u_z + \rho u_x u_x u_z) \\ + (\mathcal{H}_{i,xxxy}^{(3)} - \mathcal{H}_{i,yzzz}^{(3)}) (\rho u_x u_x u_y - \rho u_y u_z u_z) + (\mathcal{H}_{i,xzzz}^{(3)} - \mathcal{H}_{i,xyyy}^{(3)}) (\rho u_x u_z u_z - \rho u_x u_y u_y) \\ \left. \left. + (\mathcal{H}_{i,yyyz}^{(3)} - \mathcal{H}_{i,xxzz}^{(3)}) (\rho u_y u_y u_z - \rho u_x u_x u_z) \right] \right\}, \end{aligned}$$

## Schéma LBM unifié [2]

$$F_i^E = \frac{\omega_i}{2c_s^4} \mathcal{H}_{i,\alpha\beta}^{(2)} a_{\alpha\beta}^{F,(2)},$$

$$a_{\alpha\beta}^{F,(2)} = \frac{2}{D} \delta_{\alpha\beta} \rho c_s^2 \partial_\gamma u_\gamma - \delta_{\alpha\beta} c_s^2 \partial_t (\rho(1-\theta)) + a_{\alpha\beta}^C,$$

$$a_{\alpha\beta}^C = c_s^2 [u_\alpha \partial_\beta (\rho(1-\theta)) + u_\beta \partial_\alpha (\rho(1-\theta))] - \partial_\gamma D_{\alpha\beta\gamma}^{f^{eq,(3)}},$$

$$\partial_\gamma D_{\alpha\beta\gamma}^{f^{eq,(3)}} = \delta_{\alpha\beta} \partial_\alpha (\rho u_\alpha^3) + (1 - \delta_{\alpha\beta}) \partial_\psi (\rho u_x u_y u_z).$$

# Schéma LBM unifié [2]

$$f_i^{neq} = \omega_i \left\{ \frac{\mathcal{H}_{i,\alpha\beta}^{(2)}}{2c_s^4} a_{\alpha\beta}^{neq,(2)} + \frac{1}{6c_s^6} \left[ 3(\mathcal{H}_{i,xxxy}^{(3)} + \mathcal{H}_{i,yzzz}^{(3)})(a_{xxxy}^{neq,(3)} + a_{yzzz}^{neq,(3)}) \right. \right. \\ \left. \left. + (\mathcal{H}_{i,xxxy}^{(3)} - \mathcal{H}_{i,yzzz}^{(3)})(a_{xxxy}^{neq,(3)} - a_{yzzz}^{neq,(3)}) + 3(\mathcal{H}_{i,xzzz}^{(3)} + \mathcal{H}_{i,xyyy}^{(3)})(a_{xzzz}^{neq,(3)} + a_{xyyy}^{neq,(3)}) \right. \right. \\ \left. \left. + (\mathcal{H}_{i,xzzz}^{(3)} - \mathcal{H}_{i,xyyy}^{(3)})(a_{xzzz}^{neq,(3)} - a_{xyyy}^{neq,(3)}) + 3(\mathcal{H}_{i,yyz}^{(3)} + \mathcal{H}_{i,xxz}^{(3)})(a_{yyz}^{neq,(3)} + a_{xxz}^{neq,(3)}) \right. \right. \\ \left. \left. + (\mathcal{H}_{i,yyz}^{(3)} - \mathcal{H}_{i,xxz}^{(3)})(a_{yyz}^{neq,(3)} - a_{xxz}^{neq,(3)}) \right] \right\},$$

$$a_{\alpha\beta}^{neq,(2)} = \tilde{a}_{\alpha\beta}^{neq,(2)} - \frac{\delta_{\alpha\beta}}{D} \tilde{a}_{\gamma\gamma}^{neq,(2)}, \quad \tilde{a}_{\alpha\beta}^{neq,(2)} = \sum_i \mathcal{H}_{i,\alpha\beta}^{(2)} \left( f_i - f_i^{eq} + \frac{\Delta t}{2} F_i^E \right).$$

$$a_{\alpha\beta\gamma}^{neq,(3)} = u_\alpha a_{\beta\gamma}^{neq,(2)} + u_\beta a_{\alpha\gamma}^{neq,(2)} + u_\gamma a_{\alpha\beta}^{neq,(2)}.$$