INTRODUCTION AU SCHÉMA DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU

COURS 2

Schéma de d'Humières

- Rappels
- Approximation BGK
- Linéarisation de l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes
- Relaxation vers l'état d'équilibre
- Schéma de Boltzmann avec plusieurs constantes de temps
- Schéma D1Q3 pour l'acoustique linéaire

François Dubois, février 2010, 23 pages.

LBS

Cours (2)

Schéma de d'Humières

• Rappels

* on se donne un ensemble $\mathcal{V}$ de vitesses discrets, fini ($\#\mathcal{V}=J+1$), $\mathcal{V}\subset\mathbb{R}^d$; on cherche une distribution $f_j(x,t)$ ($x\in\mathbb{R}^d$, $t\geq 0$) positive de vitesse $v_j\in\mathcal{V}$ de sorte que

$$(1)\qquad \frac{\partial f_j}{\partial t}+v_j\cdot\nabla f_j=Q_j(f,f)$$

où le vecteur de collisions binaires $Q_j(f,f)$ est donné par

$$(2)\qquad Q_j(f,f)=\sum_{i,k,\ell}\left(A_{k\ell}^{ij}f_kf_\ell-A_{ij}^{k\ell}f_if_j\right).$$

* on note $\langle mc\rangle\subset\mathbb{R}^{J+1}$ l'espace des moments conservés, ie des vecteurs $\phi=(\varphi_j)_{0\leq j\leq J}$ tels que

$$(3)\qquad \langle\phi,Q(f,f)\rangle\equiv\sum_j\varphi_j\,Q_j(f,f)=0\ ,\ \forall f\in\mathbb{R}^{J+1}.$$

(def) La dimension de $\langle mc\rangle$ est notée $N+1$ dans la suite.

* Si $N=0$, il n'y a qu'un seul vecteur μ_0 de moments conservés, typiquement

$$(4)\qquad \mu_0=(1,\dots,1)^t\in\mathbb{R}^{J+1};$$

l'existence d'un tel vecteur correspond à la conservation de la masse lors des collisions binaires.

* Si $N=d$, on rajoute à μ_0 les vecteurs μ_α ($1\leq\alpha\leq d$)

$$(5)\quad \mu_\alpha = (v_0^\alpha, \dots, v_J^\alpha)^t \in \mathbb{R}^{J+1}, \quad 1\leq\alpha\leq d$$

de façon à forcer également la conservation de l'impulsion dans les collisions microscopiques.

* Enfin, si $N=d+1$, on rajoute aux deux familles précédentes le vecteur $\mu_e \equiv \mu_{d+1}$, avec

$$(6)\quad \mu_e = \left(\frac{1}{2}|v_0|^2, \dots, \frac{1}{2}|v_J|^2\right)^t \in \mathbb{R}^{J+1}.$$

Dans ce cas, les collisions microscopiques conservent la masse, l'impulsion et l'énergie.

- Si $\dim \langle mc\rangle = N+1$, on note μ_k le k^o vecteur de la base (privilégiée par la physique, voir (4), (5), (6)) et M_{kj} ($0\leq k\leq N$, $0\leq j\leq J$) la j^o composante de ce vecteur :

$$(7)\quad \mu_k = (M_{kj})_{0\leq j\leq J} \in \langle mc\rangle \subset \mathbb{R}^{J+1}$$

On introduit alors la k^o variable conservée W_k grâce à la relation

$$(8)\quad W_k \equiv \sum_j M_{kj} f_j, \quad 0\leq k\leq N.$$

- Avec les choix faits plus haut, on a

$$(9)\quad \rho \equiv \sum_j f_j = W_0,$$

(10) $\rho u^\alpha \equiv \sum_j v_j^\alpha f_j = W_\alpha, \quad 1 \leq \alpha \leq d$

(11) $\rho E \equiv \frac{1}{2} \sum_j |v_j|^2 f_j = W_{d+1}$.

Prop **Loi de conservation.**

Soit μ_k le k^e moment conservé $(0 \leq k \leq N)$ et W_k défini par (8) la k^e variable conservée on définit le flux $F_{k\beta}$ relatif à cette variable par

(12) $F_{k\beta} = \sum_j v_j^\beta M_{kj} f_j \quad , \quad 0 \leq k \leq N, \ 1 \leq \beta \leq d.$

On a alors la loi de conservation

(13) $\frac{\partial W_k}{\partial t} + \sum_{\beta=1}^{d} \partial_\beta F_{k\beta} = 0, \quad 0 \leq k \leq N.$

- La preuve consiste à multiplier l'équation (1) par M_{kj} (réel fixé qui ne dépend ni de x ni de t) et à sommer sur j. Il vient

$$\sum_j M_{kj} \frac{\partial f_j}{\partial t} + \sum_j M_{kj} \sum_\beta v_j^\beta \partial_\beta f_j = 0$$

or $\mu_k = (M_{kj})_{0 \leq j \leq J}$ est un moment conservé, donc

(14) $\sum_j M_{kj} Q_j(f, f) = 0 \quad , \forall f \in \mathbb{R}^{J+1}$.

La conclusion résulte alors d'une interversion des symboles de sommation et d'une reconnaissance (via la relation (8)) de la variable conservée W_k d'une part et (via la relation (12)) du flux associé $F_{k\beta}$ d'autre part. $\square$

- On peut transformer les expressions des flux d'impulsion $F_{\alpha\beta}$ et d'énergie $F_{d+1,\beta}$ en introduisant le <u>tenseur des pressions</u> $p^{\alpha\beta}$

(15) $\quad p^{\alpha\beta} \equiv \sum_j (v_j^\alpha - u^\alpha)(v_j^\beta - u^\beta)\, f_j\,, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq d$

et le <u>flux de chaleur</u> φ_β :

(16) $\quad \varphi_\beta \equiv \frac{1}{2} \sum_j |v_j - u|^2 (v_j^\beta - u^\beta)\, f_j\,, \quad 1 \leq \beta \leq d.$

on a alors l'expression classique suivante des flux d'impulsion et d'énergie :

Prop <u>Flux</u>

Avec les définitions (9) à (12), (15) et (16), on a

(17) $\quad F_{\alpha\beta} = \rho u^\alpha u^\beta + p^{\alpha\beta}, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq d$

(18) $\quad F_{d+1,\beta} = \rho u^\beta E + \sum_{\gamma=1}^{d} p^{\beta\gamma} u^\gamma + \varphi_\beta\,, \quad 1 \leq \beta \leq d.$

• La preuve est un simple calcul algébrique où l'on reconstruit les flux d'impulsion et d'énergie à partir des relations (15) et (16). Il vient

$$p^{\alpha\beta} = \sum_j (v_j^\alpha - u^\alpha)(v_j^\beta - u^\beta) f_j$$

$$= F_{\alpha\beta} - u^\alpha \sum_j v_j^\beta f_j - \Big(\sum_j v_j^\alpha f_j\Big) u^\beta + u^\alpha u^\beta \sum_j f_j$$

$$= F_{\alpha\beta} - u^\alpha(\rho u^\beta) - (\rho u^\alpha) u^\beta + u^\alpha u^\beta \rho$$

$$= F_{\alpha\beta} - \rho u^\alpha u^\beta \quad , \text{ ce qui établit } (17).$$

Par ailleurs,

$$\varphi_\beta = \frac{1}{2} \sum_j |v_j - u|^2 (v_j^\beta - u^\beta) f_j$$

$$= \frac{1}{2} \sum_j \sum_\gamma (v_j^\gamma - u^\gamma)(v_j^\gamma - u^\gamma)(v_j^\beta - u^\beta) f_j$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j,\gamma} v_j^\gamma (v_j^\gamma - u^\gamma)(v_j^\beta - u^\beta) f_j - \frac{1}{2} \sum_\gamma u^\gamma p^{\beta\gamma}$$

$$= F_{d+1,\beta} - \rho E u^\beta - \frac{1}{2} \sum_{j,\gamma} v_j^\gamma u^\gamma (v_j^\beta - u^\beta) f_j - \frac{1}{2} \sum_\gamma p^{\beta\gamma} u^\gamma$$

or $\sum_j u^\gamma (v_j^\beta - u^\beta) f_j = u^\gamma(\rho u^\beta) - u^\gamma u^\beta \rho = 0$

et on a aussi

$$\varphi_\beta = F_{d+1,\beta} - \rho u^\beta E - \frac{1}{2} \sum_{\gamma,j} u^\gamma (v_j^\gamma - u^\gamma)(v_j^\beta - u^\beta) f_j - \frac{1}{2} p^{\beta\gamma} u^\gamma$$

$$= F_{d+1,\beta} - \rho u^\beta E - \frac{1}{2} u^\gamma p^{\beta\gamma} - \frac{1}{2} u^\gamma p^{\beta\gamma}$$

ce qui montre la relation (18). $\square$

- L'équilibre thermodynamique f^{eq} est défini par un état $W \in \Omega \subset \mathbb{R}^{N+1}$ de variables conservées $(W_k)_{0 \leq k \leq N}$ par l'annulation de la production d'entropie

(19) $$P \equiv \frac{\partial}{\partial t}\Big(\sum_j f_j \log f_j\Big) + \partial_\alpha\Big(\sum_j f_j v_j^\alpha \log f_j\Big).$$

Prop Collision à l'équilibre.

Si f^{eq} est un état d'équilibre thermodynamique, alors on a

(20) $$Q(f^{eq}, f^{eq}) = 0$$

c'est à dire $Q_j(f^{eq}, f^{eq}) = 0$ pour tout $j = 0, \ldots, J$.

- La preuve résulte des calculs effectués au cours précédent pour démontrer le théorème H. Compte tenu de (2) et de l'hypothèse de microréversibilité

(21) $$A_{kl}^{ij} = A_{ij}^{kl}, \quad \forall i, j, k, l = 0, \ldots, J,$$

on a

(22) $$P = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \log \frac{f_i f_j}{f_k f_l} A_{kl}^{ij} (f_k f_l - f_i f_j)$$

donc tous les termes sont négatifs dès que $A_{kl}^{ij} \geq 0$. Si $P = 0$, on a vu que
$\log \frac{f_i f_j}{f_k f_l} A_{kl}^{ij} = 0$ pour tout quadruplet i, j, k, l.
Alors ou bien $A_{kl}^{ij} = 0$ et $(f_k f_l - f_i f_j) A_{kl}^{ij} = 0$;
ou bien $A_{kl}^{ij} \neq 0$ et
$f_k f_l = f_i f_j$, donc $(f_k f_l - f_i f_j) A_{kl}^{ij} = 0$.
Compte tenu de (21), le membre de droite de la relation (2) est nul, ce qui démontre la propriété. $\square$

- Si la distribution de particules f_j est à l'équilibre, alors f^{eq} est une fonction de l'état W défini par les variables conservées W_k pour $0 \leq k \leq N$ (voir les relations (8)). Alors les flux $F_{k\beta}$ sont à l'équilibre et sont eux-mêmes des fonctions (en général non linéaires) de W. Le système (13) est alors un <u>système d'équations</u> fermé relativement à l'inconnue W ; c'est le système des <u>équations d'Euler</u> :

(23) $$\frac{\partial W_k}{\partial t} + \sum_{\beta} \partial_{\beta} F_{k\beta}^{eq} = 0, \quad 0 \leq k \leq N.$$

- Dans le cas de la <u>dynamique des gaz</u>, $N = d+1$, le tenseur des pressions est <u>diagonal</u> :

(24) $$p^{\alpha\beta} = p\,\delta^{\alpha\beta} \quad , \quad 1 \le \alpha, \beta \le d$$

la <u>pression</u> est elle-même une fonction de la densité ρ et de l'<u>énergie interne</u> e définie par

(25) $$\rho e = \rho E - \frac{1}{2}\rho |u|^2$$

Prop <u>L'énergie interne est positive</u>

Si $f_j \ge 0$, avec ρ, ρu, ρE définis par les relations (9), (10) et (11).

$\Longrightarrow$

- La <u>preuve</u> consiste à écrire la convexité de la fonction $v \mapsto v^2$ avec les poids positifs de somme unité f_j/ρ :

(26) $$\Big(\sum_j v_j^\alpha \frac{f_j}{\rho} \Big)^2 \le \sum_j |v_j^\alpha|^2 \frac{f_j}{\rho} \quad , \quad 1 \le \alpha \le d .$$

on somme sur α l'inégalité précédente. Il vient après division par 2 :

(27) $$\frac{1}{2}|u|^2 \le E$$

compte tenu de (9), (10) et (11). On en déduit

(28) $$e \ge 0$$

dès que $\rho > 0$. $\square$

* Pour le gaz parfait polytropique, il existe $\gamma > 1$ de sorte que

(29) $$p = (\gamma - 1)\rho e$$

et le flux de chaleur φ défini à la relation (16) est nul.

- Pour l'acoustique non linéaire, qui est le bon cadre macroscopique pour mettre en oeuvre le schéma de Boltzmann sur réseau, on a $N = d$ (conservation de la masse et de l'impulsion), le tenseur des pressions est diagonal et il existe $c_0 > 0$ fixée (vitesse du son) de sorte que

(30) $$p = c_0^2 \rho \, .$$

Le système (23) correspondant s'écrit

(31) $$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u) = 0$$

(32) $$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u^\alpha) + \sum_\beta \partial_\beta(\rho u^\alpha u^\beta) + c_0^2 \partial_\alpha \rho = 0, \quad 1 \leq \alpha \leq d.$$

- Approximation BGK

Cette dénomination se réfère au travail de Bhatnagar, Gross et Krook (1954). Dans le cas où f ne dépend pas de l'espace pour fixer les idées on constate que l'état

$f(t) \in \mathbb{R}^{J+1}$ converge très rapidement vers f^{eq} si t tend vers l'infini. Ces trois auteurs ont donc proposé de substituer à l'équation (1) le modèle approché BGK où $Q(f,f)$ est remplacé par

$$(33) \qquad Q^{BGK}(f) \equiv \frac{1}{\tau}\left(f^{eq} - f\right)$$

avec $\tau > 0$ un <u>temps de relaxation</u> fixé par cette approximation. L'équation de Boltzmann dans l'approximation BGK s'écrit

$$(34) \qquad \frac{\partial f_j}{\partial t} + \sum_{\beta} v_j^{\beta}\, \partial_{\beta} f_j = \frac{1}{\tau}\left(f_j^{eq} - f_j\right).$$

* Rappelons que pour calculer f_j^{eq}, on calcule d'abord les variables conservées W_k (relation (8)), ce qui suppose connue la phénoménologie des collisions microscopiques, id est les M_{kj} pour $0 \leq k \leq N$ et $0 \leq j \leq J$. Puis $W \in \Omega \subset \mathbb{R}^{N+1}$ étant connu, on calcule f^{eq} par

$$(35) \qquad f_j^{eq} = G_j(W), \quad 0 \leq j \leq J$$

où G_j sont des "Gaussiennes généralisées" dont l'explicitation a été évoquée au chapitre précédent. Une fois f_j^{eq} calculé en fonction de $f \in \mathbb{R}^{J+1}$, le second membre de (34) est bien défini.

• Linéarisation de l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes.

L'approximation BGK ne décrit pas avec précision le processus de relaxation vers l'équilibre thermodynamique. Elle a l'avantage de la simplicité. Nous préférons dans le cadre de ce cours la considérer comme une curiosité et développer une approche plus naturelle d'un point de vue mathématique.

* Si f est voisin d'un état d'équilibre f^{eq} alors $f - f^{eq}$ est "petit". Il est donc naturel de supposer l'opérateur de collision <u>différentiable</u> :

$$(36) \quad Q(f,f) = Q(f^{eq}, f^{eq}) + dQ(f^{eq}) \cdot (f - f^{eq})$$
$$+ \text{ordre supérieur.}$$

Compte tenu de la relation (20) qui annule $Q(f^{eq}, f^{eq})$, on a une bonne approximation de l'équation (1) en remplaçant l'opérateur de collision $Q(f,f)$ par sa jacobienne. On forme grâce à ce processus l'équation de Boltzmann à vitesses discrètes linéarisée :

$$(37) \qquad \frac{\partial f_j}{\partial t} + v_j \cdot \nabla f_j = \left(dQ(f^{eq}) \cdot (f - f^{eq}) \right)_j \,.$$
$$0 \leq j \leq J .$$

Prop **Moments conservés et noyau de la transposée**

Si $\phi \in \langle mc \rangle$, alors on a

(38) $$d\mathcal{Q}(f^{eq})^t \bullet \phi = 0 ,$$

$\phi \in \ker(d\mathcal{Q}(f^{eq})^t)$.

- La preuve consiste à écrire (3) avec f de la forme $f = f^{eq} + \theta\psi$, où $\theta \in \mathbb{R}$ est un "petit paramètre" et $\psi \in \mathbb{R}^{J+1}$ est arbitraire. Compte tenu de la relation (20), on a

(39) $$\langle \phi, d\mathcal{Q}(f^{eq}) \bullet \theta\psi + O(\theta^2) \rangle = 0$$

soit après division par θ et prise de limite pour $\theta \to 0$:

(40) $$\langle \phi, d\mathcal{Q}(f^{eq}) \cdot \psi \rangle = 0, \quad \forall \psi \in \mathbb{R}^{J+1}.$$

Cette relation prouve (38) en passant à la transposée car ψ est arbitraire. $\square$

- On suppose dans la suite de ce cours que $d\mathcal{Q}(f^{eq})$ est diagonalisable comme opérateur de $\mathbb{R}^{J+1}$ à valeurs dans $\mathbb{R}^{J+1}$, avec des valeurs propres et des vecteurs propres réels. On suppose plus précisément

(41) $$\dim \ker(d\mathcal{Q}(f^{eq})^t) = N+1$$

et qu'il existe une base $(\mu_k(f^{eq}))_{0\leq k\leq J}$ de vecteurs propres de sorte que pour $k\leq N$, $\mu_k(f^{eq})=\mu_k$ qui forme une base de $\langle mc\rangle$. Par contre, pour $k>N$, la valeur propre correspondante est supposée strictement négative ; on la note $-1/\tau_k$, introduisant le k^o temps de relaxation τ_k (avec $\tau_k>0$) on a donc

(42) $$d\mathcal{Q}(f^{eq})^t\cdot\mu_k=0,\quad 0\leq k\leq N$$

(43) $$d\mathcal{Q}(f^{eq})^t\cdot\mu_k(f^{eq})=-\frac{1}{\tau_k(f^{eq})}\mu_k(f^{eq}),\quad k>N$$

• D'un point de vue pratique, on complète la matrice rectangulaire $(M_{kj})_{0\leq k\leq N,\,0\leq j\leq J}$ introduite à la relation (7) par les coordonnées $M_{kj}(f^{eq})$ de μ_k^{eq} pour $k>N$ et $0\leq j\leq J$:

(44) $$\mu_k(f^{eq})=M_{kj}(f^{eq}),\quad k>N,\ 0\leq j\leq J.$$

La matrice carrée $M(f^{eq})$ alors construite (d'ordre $J+1$) est bien entendu inversible puisque les $\mu_k(f^{eq})$ forment une base de vecteurs propres. Si l'on introduit la matrice $\Lambda(f^{eq})$ des valeurs propres, les relations (42)(43) montrent que

(45) $\Lambda(f^{eq}) = \mathrm{diag}\left(0, \dots, 0, \frac{-1}{\tau_{N+1}(f^{eq})}, \dots, \frac{-1}{\tau_J(f^{eq})}\right).$

* Compte tenu de (7) et (44), les relations spectrales (42)(43) s'écrivent aussi

(46) $d\mathcal{Q}(f^{eq})^t \cdot M(f^{eq})^t = \Pi(f^{eq})^t \cdot \Lambda(f^{eq})$.

après un peu d'algèbre,

(47) $d\mathcal{Q}(f^{eq}) = (M(f^{eq}))^{-1} \cdot \Lambda(f^{eq}) \cdot M(f^{eq})$

- <u>Relaxation vers l'état d'équilibre.</u>

Soit $W \in \Omega \subset \mathbb{R}^{N+1}$ un vecteur de variables conservées W_k (relation (8)) et f^{eq} donné par la relation (35). On a en particulier

(48) $\sum_j M_{kj} f_j = \sum_j M_{kj} f_j^{eq} = W_k, \quad 0 \leq k \leq N$

* Avec D. d'Humières (1992), on introduit les <u>moments</u> $(m_k)_{0 \leq k \leq J}$ définis relativement à W par les relations

(49) $m_k = \sum_j M_{kj}(f^{eq}) \cdot f_j, \quad 0 \leq k \leq J$.

Si $k \leq N$, on a $m_k = W_k$.

- On se donne, à $t=0$ une distribution de particules f_j^0 $(0 \leq j \leq J)$ qui ne dépend <u>pas</u> de $x \in \mathbb{R}^d$. On se demande quelle est la dynamique en temps induite par l'équation de Boltzmann linéarisée (37). A l'aide de f_j^0, on forme le vecteur $W \in \Omega \subset \mathbb{R}^{N+1}$ par la combinaison classique $W_k = \sum_j M_{kj} f_j^0$. Alors f^{eq} est défini par W et la relation (35). Si f_j ne dépend que de t, l'équation (37) se simplifie en

$$(50) \qquad \frac{df}{dt} = dQ(f^{eq}) \cdot (f - f^{eq})$$

on explicite $dQ(f^{eq})$ à l'aide de la relation (47) et on introduit m_k selon (49). On a donc $m = M(f^{eq}) \cdot f$ et après multiplication de la relation (50) par $M(f^{eq})$ (qui ne dépend pas du temps), on déduit de (50) :

$$(51) \qquad \frac{dm}{dt} = \Lambda(f^{eq}) \, (m - m^{eq}) ,$$

en introduisant $m^{eq} \equiv M(f^{eq}) \cdot f^{eq}$. La dynamique sous-jacente à (51) est facile à écrire :

* si $k \leq N$, $\Lambda(f^{eq})_k = 0$, donc l'équation (51) prend la forme

$$(52) \qquad \frac{dm_k}{dt} = 0, \quad 0 \leq k \leq N.$$

si $k > N$, $\Lambda(f^{eq})_k = -\frac{1}{\tau_k}$ et la k^o relation de (51) s'écrit

$$(53) \qquad \frac{dm_k}{dt} + \frac{1}{\tau_k(f^{eq})} \left(m_k - m_k^{eq} \right) = 0$$

- L'évolution du vecteur $f(t) \in \mathbb{R}^{J+1}$ telle que $f_j(0) = f_j^0$ se détermine alors sans difficulté. A $t=0$, $m_k(0) = W_k$ si $k \leq N$. La relation (52) entraîne $m_k(t)$ constant au cours du temps:

$$(54) \qquad m_k(t) \equiv W_k \,, \quad 0 \leq k \leq N, \quad t \geq 0.$$

Si $k > N$, on a à $t=0$ $m_k(0) = \sum_j M_{kj}(f^{eq}) f_j^0$ et on peut introduire $m_k^{eq} = \sum_j M_{kj}(f^{eq}) f_j^{eq}$. La relation (53) s'intègre alors sans difficulté et l'on obtient

$$(55) \qquad m_k(t) = m_k^{eq} + e^{-t/\tau_k} (m_k(0) - m_k^{eq}), \quad t \geq 0, \; k > N.$$

Si t tend vers $+\infty$, $m_k(t)$ tend vers m_k^{eq} si $k > N$ et lui est toujours égal si $k \leq N$ (relation (54)). Donc $m(t)$ tend vers m^{eq}, c'est à dire $f(t)$ vers f^{eq}.

- Schéma de Boltzmann avec plusieurs constantes de temps.

A partir de maintenant, on suppose que l'espace et le temps sont discrétisés. On introduit un <u>réseau</u> $\mathcal{L}$ (lattice en anglais) dont la maille typique est Δx et on suppose donc

$$(56) \qquad x \in \mathcal{L} \subset \mathbb{R}^d.$$

Par ailleurs, on introduit un pas de temps $\Delta t > 0$ et on suppose t de la forme $k\Delta t$ avec $k \in \mathbb{N}$. L'hypothèse fondamentale est que $\mathcal{L}$, Δt et $\mathcal{V}$ sont compatibles au sens où si on part d'un point du réseau et qu'on suit la j° vitesse durant un pas de temps, on aboutit exactement à un nouveau vertex de $\mathcal{L}$:

(57) $\quad \forall x \in \mathcal{L}, \ \forall v_j \in \mathcal{V}, \ x + v_j \, \Delta t \in \mathcal{L}.$

- Les deux exemples introduits plus haut satisfont cette condition. Pour le schéma D1Q3, on a

(58) $$\begin{cases} \mathcal{L}_{D1Q3} = \mathbb{Z}\,\Delta x \\ \mathcal{V}_{D1Q3} = \{-\lambda, 0, \lambda\} \end{cases}$$

avec

(59) $$\lambda \equiv \frac{\Delta x}{\Delta t}.$$

Pour le schéma D2Q9, on a

(60) $$\begin{cases} \mathcal{L}_{D2Q9} = (\mathbb{Z}\,\Delta x) \times (\mathbb{Z}\,\Delta x) \\ \mathcal{V}_{D2Q9} = \lambda \{0, e_1, e_2, -e_1, -e_2, \\ \qquad e_1+e_2, -e_1+e_2, -e_1-e_2, e_1-e_2\} \end{cases}$$

si (e_1, e_2) désigne la base canonique de $\mathbb{R}^2$. La vérification de la condition (57) est facile pour ces deux exemples ; elle est laissée au lecteur.

* La condition (57) est une véritable contrainte sur le choix des maillages. Si v ne dépend pas du vertex $x \in \mathcal{L}$ (c'est le cas pour les implémentations actuelles du schéma de Boltzmann), il faut utiliser une grille essentiellement cartésienne. C'est une limitation importante de l'état de l'art à ce jour !

- Afin de résoudre de façon approchée l'équation d'évolution (37), on rappelle la méthode des directions alternées pour approcher à $t = \Delta t$ la solution d'une équation d'évolution du type

$$
(61) \quad \left\{ \begin{array}{l} \dfrac{dU}{dt} = AU + BU , \quad t > 0 \\ U(0) = U_0 , \end{array} \right.
$$

où A et B sont des opérateurs constants pour fixer les idées. Cette approche est due (entre autres) à N. Yanenko (1968), G. Strang (1968) et D. Peaceman et H. Rachford (1955).

On commence par calculer une approximation U^* du problème (61) avec $B \equiv 0$, ie $U^* = \exp(\Delta t A) \cdot U_0$ si on suppose qu'on résout exactement ce problème "à un seul opérateur". Puis dans un second temps, on s'intéresse au problème (61) avec $A \equiv 0$

et U_0 remplacé par U^*. On obtient ainsi

(62) $$\tilde{U} = e^{\Delta t B} \cdot e^{\Delta t A} \cdot U_0$$

qui est une approximation d'ordre Δt de $U(\Delta t) = \exp(\Delta t (A+B)) \cdot U_0$. En effet, si A et B sont des opérateurs qui ne commutent pas, l'exponentielle de la somme est différente du produit des exponentielles.

- Dans le cas de l'équation de Boltzmann linéarisée, on résout d'abord l'étape de relaxation ou de collision

(63) $$\frac{df^*}{dt} = dQ(f^{eq}) \cdot (f - f^{eq}) .$$

Puis on s'intéresse à l'advection, ou transport libre :

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

- <u>Relaxation vers l'équilibre</u>

Rappelons qu'on doit d'abord calculer f^{eq} en (x,t) à partir de $(f_j(x,t))_{0 \leq j \leq J}$, $x \in \mathcal{L}$, $t = n\Delta t$ pour fixer les idées.
On calcule d'abord les variables conservées $W(x,t)$ grâce à la relation (8) puis le vecteur $f^{eq}(x,t)$ à l'aide des Gaussiennes généralisées (35).

L'évolution d'un pas de temps s'effectue d'abord pour les moments. Si $k \leq N$ (moments conservés), l'équation d'évolution (52) est triviale et il vient

$$(65) \quad m_k^*(x,t) = m_k(x,t) = W_k(x,t), \quad k \leq N.$$

Si $k > N$, on discrétise l'équation différentielle (53) par un schéma d'Euler explicite. Il vient

$$(66) \quad \frac{1}{\Delta t}\left(m_k^* - m_k\right) + \frac{1}{\tau_k}\left(m_k - m_k^{eq}\right) = 0, \quad x \in \mathcal{L}, \; k > N.$$

* on pose en conséquence

$$(67) \qquad s_k = \frac{\Delta t}{\tau_k}, \quad k > N$$

et le schéma (66) s'écrit aussi

$$(68) \qquad m_k^* = (1 - s_k)\, m_k + s_k\, m_k^{eq}, \quad x \in \mathcal{L}, \; k > N.$$

La condition de stabilité qui assure la monotonie est $0 < s_k \leq 1$; stricto-sensu, la stabilité L^2 est plus large. C'est cette dernière condition qui est utilisée pour l'itération (68) :

$$(69) \qquad 0 < s_k < 2, \quad k > N.$$

* Une fois $\left(m_k^*(x,t)\right)_{0 \leq k < J}$ évalué grâce à (65) et (68), la distribution de particules $f_j^*(x,t)$ s'obtient sans difficulté :

(70) $f_j^*(x,t) = \sum_k M^{-1}_{jk}\, m_k^*(x,t), \quad 0 \leq j \leq J$

• <u>Advection.</u>

La résolution de l'équation (64) est facile par la méthode des caractéristiques :

(71) $f_j(x, t+\theta) = f_j(x - v_j\,\theta,\ t), \quad x \in \mathbb{R}^d,\ \theta \geq 0$

Si $x \in \mathcal{L}$ et $\theta = \Delta t$, le vertex $x - v_j \cdot \Delta t$ appartient au réseau $\mathcal{L}$, ainsi que le propose la relation (57). A cet instant, la valeur de f_j est connue par le résultat de l'étape précédente. Cette seconde étape de l'algorithme de d'Humières est donc très simple :

(72) $f_j(x, t+\Delta t) = f_j^*(x - v_j\,\Delta t, t), \quad x \in \mathcal{L},\ v_j \in \mathcal{V}$

* On remarque que grâce à (57), on peut toujours utiliser la méthode des caractéristiques lorsqu'elle est exacte, c'est à dire avec un nombre de Courant égal à 1.

• <u>Schéma D1Q3 pour l'acoustique linéaire</u>

Avec les notations rappelées en (58) et (59), on change quelque peu la nomenclature et on remplace $f \equiv (f_+, ~~f_-~~ f_0) \in \mathbb{R}^3$ par $(f, g, h) \in \mathbb{R}^3$, avec $f \equiv f_+$, $g \equiv f_-$, $h \equiv f_0$.

On a alors deux moments conservés :

$$(73) \begin{cases} \rho = \sum_j f_j = f + g + h \\ q = \sum_j v_j f_j = \lambda(f-g) \end{cases}$$

* Le troisième moment, non conservé, est simplement l'énergie. On pose

$$(74) \qquad \varepsilon = \sum_j \frac{1}{2}|v_j|^2 f_j = \frac{\lambda^2}{2}(f+g)$$

Pour l'équilibre, on introduit $\alpha > 0$ et le plus cohérent est ne ne faire intervenir que le scalaire ρ pour définir ε^{eq} (alors que l'impulsion q est de nature vectorielle). On a donc

$$(75) \qquad \varepsilon^{eq} = \frac{\lambda^2}{2}\alpha\,\rho$$

- La relaxation vers l'équilibre demande l'introduction d'un autre paramètre s, avec

$$(76) \qquad 0 < s < 2$$

de sorte que

$$(77) \qquad \varepsilon^{*} = (1-s)\,\varepsilon + s\,\varepsilon^{eq} = (1-s)\,\varepsilon + \frac{\lambda^2}{2}\alpha\rho.$$

- La prise en compte de l'advection est simple si on remplace la dépendance ($x = j\,\Delta x$, $t = n\,\Delta t$) par j en indice et n en exposant.

Partant de f_j^n, g_j^n et h_j^n, on calcule d'abord les moments :

$$(78)\quad \begin{cases} \rho_j^n = f_j^n + g_j^n + h_j^n \\ q_j^n = \lambda(f_j^n - g_j^n) \\ \xi_j^n = \dfrac{\lambda^2}{2}(f_j^n + g_j^n) \end{cases}$$

Ces relations s'inversent sans difficulté. La relation (77) définit ε_j^{*n} par

$$(79)\qquad \varepsilon_j^{*n} = (1-s)\,\xi_j^n + \frac{\lambda^2}{2}\alpha\rho_j^n .$$

* on calcule ensuite f_j^{*n}, g_j^{*n} et h_j^{*n} par inversion de (78), avec
$\rho_j^{*n} \equiv \rho_j^n$ et $q_j^{*n} = q_j^n$. Il vient

$$(80)\quad \begin{cases} f_j^{*n} = \dfrac{1}{2\lambda} q_j^n + \dfrac{1}{\lambda^2}\varepsilon_j^{*n} \\ g_j^n = -\dfrac{1}{2\lambda} q_j^n + \dfrac{1}{\lambda^2}\varepsilon_j^{*n} \\ h_j^n = \rho_j^n - \dfrac{2}{\lambda^2}\varepsilon_j^{*n} \end{cases}$$

• L'advection n'est qu'un décalage d'indices :

$$(81)\quad \begin{cases} f_j^{n+1} = f_{j-1}^{*n} \\ g_j^{n+1} = g_{j+1}^{*n} \\ h_j^{n+1} = h_j^{*n} \quad , \; j \in \mathbb{Z} . \end{cases}$$

Dubois
Orsay, 18/2/2010.