



Identification de modèles et de paramètres pour la méthode de Boltzmann sur réseau.

Mohamed Mahdi Tekitek

► To cite this version:

Mohamed Mahdi Tekitek. Identification de modèles et de paramètres pour la méthode de Boltzmann sur réseau.. Mathématiques [math]. Université Paris Sud - Paris XI, 2007. Français. NNT: . tel-00207541

HAL Id: tel-00207541

<https://theses.hal.science/tel-00207541>

Submitted on 17 Jan 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

ORSAY

N° d'ordre : 8774

UNIVERSITÉ DE PARIS SUD

U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THÈSE

en vue d'obtenir le grade de

DOCTEUR EN SCIENCES
DE L'UNIVERSITÉ PARIS XI ORSAY

SPÉCIALITÉ : MATHÉMATIQUES

par

Mohamed Mahdi TEKITEK

Sujet : **Identification de modèles et de paramètres pour la
méthode de Boltzmann sur réseau.**

Soutenue le **24 septembre 2007**, devant le jury composé de :

Mr	Rémi	Abgrall	Rapporteur
Mr	François	Alouges	Président du jury
Mr	François	Dubois	Directeur de thèse
Mme	Laurence	Halpern	Rapporteur
Mr	Pierre	Lallemant	Directeur de thèse
Mr	Dominique	d'Humières	Examineur
Mr	Bertrand	Maury	Examineur

... à mon père Ali qui nous a quitté en juin dernier.
... à ma mère Najet.
... à ma sœur Amina.

Remerciements

Ces pages sont dédiées à tous ceux qui m'ont permis de mener à bien mes travaux de recherche durant ces années de thèse.

Je voudrais exprimer mes sincères remerciements à mes directeurs François Dubois et Pierre Lallemand pour m'avoir encadré et initié à la recherche.

Je voudrais remercier vivement François qui, avec beaucoup de disponibilité et de gentillesse a dirigé mes travaux de recherche. Je lui suis reconnaissant pour son soutien et la confiance qu'il m'a accordée depuis mon stage de DEA. Sa rigueur et son esprit critique m'ont éclairci la voie de la recherche et ont été pour moi une excellente assurance. Que ces quelques mots puissent lui exprimer la gratitude et la profonde admiration que j'éprouve à son égard.

J'exprime mes vifs remerciements à Pierre, pour son attention et son aide précieuses pendant ma thèse. Je le remercie aussi de m'avoir appris la méthode de Boltzmann sur réseau. Il représente pour moi une des personnalités phares de cette méthode. Que Pierre trouve ici ma profonde gratitude tant pour sa vision de l'analyse numérique qui m'a beaucoup apportée que pour son expérience en calcul scientifique qui m'a été d'un grand secours quand "ça buggait".

Je suis très reconnaissant envers Laurence Halpern et Rémi Abgrall de s'être intéressés à mon travail et d'avoir accepté de rapporter sur ma thèse.

Les Professeurs François Alouges, Dominique d'Humières et Bertrand Maury m'ont fait l'honneur d'accepter de faire partie de mon jury. Je les en remercie chaleureusement.

Je suis très reconnaissant envers M'hamed Bouzidi qui m'a toujours offert ses conseils et sa disponibilité. Son soutien sur le plan scientifique et humain a permis à ce travail de voir le jour.

Je souhaiterais remercier vivement tous les membres de l'équipe d'Analyse Numérique & EDP que j'ai eu le plaisir de rencontrer et plus particulièrement François Alouges, Jean-Paul Chehab, Laurent Di Menza, Sylvain Faure, Benjamin Graille, Stéphane Labbe, Jacques Laminie, Hervé Le Meur, Bertrand Maury et tous mes professeurs de DEA "EDP et Calcul scientifique" de l'année universitaire 2002/2003 de l'université Paris-Sud.

Je remercie tous les membres du département de mathématique à Orsay. Je suis reconnaissant envers les secrétaires, notamment Valérie Lavigne, Marie-Christine Myoupo et Catherine Poupon pour leur gentillesse et efficacité. Je suis aussi reconnaissant envers Elisabeth Kneller d'avoir répondu avec gentillesse à toutes mes demandes bibliographiques.

Je remercie le gouvernement français et l'Institut Français de Coopération en Tunisie d'avoir financé ma thèse.

Je tiens à remercier mes amis et mes collègues du bâtiment 425 et du bâtiment 430 qui m'ont toujours aidé et soutenu, même dans les moments difficiles.

Un grand merci à Andy, Anis, Assia, Benjamin, Benoit, Dominique, Camille, Charlotte, Deborah, Dominique, Fatima, Laszlo, Makram, Malik, Mohamed et Nejib pour leur amitié dévouée, leur complicité et les moments partagés. Ils m'ont donné tout l'espoir et le soutien nécessaires pendant mon séjour en France.

Mes derniers remerciements vont à mes parents et ma sœur qui m'ont soutenu, m'ont encouragé sans cesse tout au long de mes études, et plus spécialement pendant ma thèse. Je pense tout particulièrement à mon père, qui est parti vite, trop tôt, au mois de juin de cette année, et à qui je veux rendre hommage. Il m'a tout appris, encouragé à étudier les mathématiques et m'a donné envie de poursuivre dans la recherche. Il me laisse l'envie irresistible de continuer mon travail, que j'ai commencé grâce à lui. Merci papa.

Résumé

Cette thèse comporte trois parties : étude du schéma de Boltzmann sur réseau, schéma adjoint de Boltzmann sur réseau pour l'identification de paramètres et construction d'une couche parfaitement absorbante pour ce schéma. La première partie introduit et analyse la méthode. La deuxième partie décrit une approche variationnelle pour l'assimilation de paramètres relatifs à la méthode du gaz de Boltzmann sur réseau. Une méthode adjointe discrète en temps est développée. L'algorithme est d'abord testé sur un écoulement de type Poiseuille linéaire (problème de Stokes), puis il est appliqué à un problème non linéaire. Des résultats encourageants sont obtenus pour un et deux paramètres inconnus. Finalement la troisième partie décrit une adaptation des couches absorbantes de Bérenger. Il en résulte un modèle d'automate de Boltzmann à neuf vitesses discrètes. Une analyse des ondes réfléchies est ensuite réalisée entre deux milieux de Boltzmann à une dimension, ce qui permet d'obtenir un équivalent des formules de Fresnel pour les schémas de Boltzmann et de proposer des modifications du schéma à l'interface pour annuler les ondes réfléchies. En deux dimensions, la même analyse d'ondes réfléchies met en évidence l'apparition de modes de Knudsen et des ondes transverses qui rendent l'analyse complexe.

Mots-clef : Boltzmann sur réseau, LBE, stabilité de schéma numérique, problème inverse, couche parfaitement adaptée de Bérenger, PML, mode de Knudsen, dioptré acoustique, formule de Fresnel, Fresnel discret.

Abstract

This thesis is composed of three parts. Firstly a study of Lattice Boltzmann scheme (LBE) is performed. Then Adjoint Lattice Boltzmann scheme (ALBE) is introduced for parameters identification. Finally a new Lattice Boltzmann scheme (BRB) is proposed to modelise Bérenger's Perfectly Matched Layer (PML) method. The first part introduces and analyzes the LBE method. The second part describes a variational approach for parameters identification adapted to LBE. A time discrete adjoint method is developed. At first the ALBE method is applied to Stokes' problem and then to a nonlinear problem. Good results have been obtained in the cases of one or tow unknown parameters. Finally the third part

describes an adaptation of PML for LBE. The LB scheme is obtained with 9 discrete velocities. An analysis of reflected waves between two one dimensional LB media is performed. It provides us an equivalent for the Fresnel formula for LBE interface. That gives us same ideas to modify the LB scheme at the interface to vanish reflected waves. In the two dimensional case, the same analysis of reflected waves shows the existence of Knudsen modes and transverse waves, which make the analysis more difficult.

Keywords : Lattice Boltzmann equation, LBE, CFD, stability analysis of LBE, inverse problem, parameters identification, perfectly matched layer, Béranger, PML, acoustic interface, Knudsen mode, Fresnel equation, discrete Fresnel equation.

Introduction

Cette thèse se place dans le cadre de l’analyse et du développement de la méthode numérique dite équation de Boltzmann sur réseau. Cette méthode repose sur un algorithme qui simule l’équation de Boltzmann de façon simple dont nous établissons formellement que le comportement à grande échelle est celui d’un fluide visqueux satisfaisant les équations aux dérivées partielles de Navier-Stokes. Cette approche qui décrit le comportement microscopique du fluide se caractérise par un nombre important de degrés de liberté, dont la dynamique modélise un certain nombre de termes de l’équation macroscopique aux dérivées partielles. Nous notons que cette méthode se caractérise par une grande simplicité de mise en œuvre et un très large domaine d’applications comme l’aérodynamique (avec par exemple le logiciel commercial PowerFlow [LLM02] de la société Exa), la thermique [ELR90], les écoulements dans les milieux poreux [PLM06], les écoulements diphasiques [HCZ99], ... De plus, s’il est relativement facile de prédire les propriétés d’un modèle de Boltzmann sur réseau donné, il est en revanche plus difficile de proposer un modèle ayant des propriétés macroscopiques données.

Dans ce travail, nous avons cherché à enrichir la méthode de Boltzmann sur réseau dans deux directions voisines mais distinctes. D’une part, nous avons utilisé la méthode du contrôle optimal (pas encore utilisée par cette communauté) afin d’assimiler des paramètres du schéma, en l’occurrence ceux auxquels est liée la viscosité du fluide. D’autre part nous avons cherché à adapter au cadre du schéma de Boltzmann sur réseau les algorithmes de type “milieu absorbant” qui permettent de limiter les domaines non bornés.

Dans le **chapitre 1** après une brève introduction historique de la méthode de l’équation de Boltzmann sur réseau, nous analysons les cas mono et bidimensionnel. Nous traitons en détail les équations équivalentes macroscopiques et nous discutons la stabilité numérique de la méthode.

Nous exposons dans le **chapitre 2**, une approche variationnelle pour l’assimilation de paramètres relatifs à la méthode du gaz de Boltzmann sur réseau. Nous y développons une méthode adjointe discrète (dite “**Adjoint Lattice Boltzmann Equation**” ALBE) en temps qui utilise explicitement la double étape algorithmique du schéma de Boltzmann sur réseau : l’étape d’advection et l’étape de collision. Pour cela nous testons d’abord l’algorithme ALBE sur un écoulement de type Poiseuille linéaire (problème de Stokes), puis nous l’appliquons à un problème non linéaire.

Après un bref rappel au **chapitre 3** sur les méthodes de couche parfaitement absorbante, nous rappelons la définition de la méthode de Bérenger qui consiste à entourer le domaine physique (d'intérêt) par une couche absorbante (PML). Dans cette couche absorbante, les équations sont modifiées afin d'assurer d'une part une transmission totale des ondes incidentes et d'autre part leur totale absorption.

Dans le **chapitre 4** nous nous sommes appliqués à adapter les couches absorbantes de Bérenger pour les méthodes de Boltzmann sur réseau. Il en résulte un modèle d'automate de Boltzmann à neuf vitesses discrètes dit “schéma de **Boltzmann sur Réseau** pour une couche de **Bérenger**” (BRB). Nous analysons en détail quelques difficultés rencontrées.

Le **chapitre 5** présente une analyse des ondes réfléchies entre deux milieux de Boltzmann à une dimension puis à deux dimensions. En une dimension cette analyse nous a permis d'obtenir un équivalent des formules de Fresnel pour le schéma de Boltzmann sur réseau et de proposer des modifications du schéma à l'interface permettant d'annuler les ondes réfléchies. En deux dimensions, nous avons fait l'analyse des ondes réfléchies en se limitant à une incidence normale. Nous avons pu mettre en évidence l'apparition des modes de Knudsen qui complexifient l'analyse.

Nous proposons en conclusion quelques pistes pour des travaux futurs.

Table des matières

Introduction	i
1 Schéma de Boltzmann sur réseau	3
1 Introduction	3
Automates cellulaires	4
2 Schéma de Boltzmann sur réseau	5
Développement général	6
3 Equation équivalente	12
Un modèle monodimensionnel à trois vitesses D1Q3	14
Un modèle bidimensionnel à neuf vitesses D2Q9	17
4 Développement asymptotique de Chapman–Enskog	26
5 Equation de dispersion et stabilité du schéma	29
Equation de dispersion	29
Etude numérique de la stabilité	34
Conclusion	43
6 Conditions aux limites	43
7 Exemple de l’écoulement de Poiseuille en D2Q9	47
2 Adjoint Lattice Boltzmann Equation for Parameter Identification	51
1 Introduction	51
2 Direct model for Lattice Boltzmann Equation	52
Advection step	53
Collision step	54
Direct model	55
3 Adjoint method for identifying parameters	56
General discrete theory for adjoint method	56
Adjoint Lattice Boltzmann Equation for linear case	59
ALBE algorithm for the nonlinear case	60
4 First numerical experiments for a Poiseuille flow	60
Case of a one scalar parameter problem	60
Case of two parameters	62
5 ALBE method for a Navier-Stokes flow	64
6 Conclusion	65

3	Rappel sur les couches parfaitement absorbantes	67
1	Introduction	67
2	Conditions limites absorbantes	67
3	Couches absorbantes	69
4	Modèle de Béranger en acoustique	70
5	Perte d'hyperbolicité	76
4	Schéma de Boltzmann sur réseau pour une couche de Béranger	79
1	Construction du schéma au premier ordre	79
2	Propriétés de dissipation du milieu non absorbant	88
3	Etude expérimentale de stabilité	94
4	Absorption à l'ordre zéro	96
5	Analyse d'une simulation d'interface	102
	Introduction	102
	Interface entre un milieu D2Q9 et un milieu BRB	102
	Interface entre un milieu D2Q9 et un milieu D2Q9 de viscosité croissante	107
	Interface entre un milieu D2Q9 et un milieu D2Q9 avec un terme d'absorption d'ordre zéro	109
6	Conclusion	115
5	Onde réfléchie à l'interface entre deux milieux acoustiques	117
1	Introduction	117
2	Etude monodimensionnelle continue	117
3	Résolution exacte dans le cas du modèle D1Q3	119
4	Vers l'annulation de l'onde réfléchie	126
	Conclusion	127
5	Interface numérique entre deux milieux D2Q9	128
	Introduction	128
	Interface entre deux domaines D2Q9	128
	Analyse du problème de l'interface	132
	Comparaison entre les résultats théoriques et les résultats numériques	133
6	Conclusion	137
	Conclusion générale et perspectives	139
	Bibliographie	140
	Résumé	147

Chapitre 1

Schéma de Boltzmann sur réseau

1 Introduction

Les problèmes en mécanique des fluides et plus généralement la résolution des équations aux dérivées partielles, nous amènent à utiliser des méthodes directes de résolution (différences finies [RM67], éléments finis [Pi88], ...). Cela consiste à faire une discrétisation spatiale et temporelle des équations macroscopiques (Euler, Navier-Stokes, ...). Une approche différente repose sur la simulation directe, au niveau “microscopique” de l’évolution des “particules” dont est constitué le fluide. Cette méthode s’est développée depuis les années 60 surtout dans l’esprit d’obtenir des informations très détaillées sur la dynamique locale des fluides et de contribuer à la compréhension des équations d’état et des coefficients de transport. Des versions simplifiées de cette approche microscopique ont été développées pour étudier les écoulements dans les gaz raréfiés (*i. e.* hypersonique des corps de rentrée). D’autres types de simplifications ont été proposés pour permettre la simulation d’écoulements de fluides visqueux, en particulier la méthode dite de l’équation de Boltzmann sur réseau à laquelle nous nous sommes intéressé.

L’étude statistique des fluides a conduit Boltzmann en 1872 à proposer une équation intégral-différentielle de la théorie cinétique qui décrit l’évolution d’un gaz peu dense hors équilibre. La déduction des équations macroscopiques (comportement à grande échelle du modèle) à partir de l’équation de Boltzmann a commencé en 1912 par les travaux de Hilbert [Ce88]. Ensuite Chapman et Enskog ont trouvé une méthode dite de “Chapman-Enskog” [CC70] pour obtenir les équations d’Euler et Navier-Stokes.

Vu la complexité de l’équation de Boltzmann, Broadwell a proposé en 1964 [Br64] de la simplifier en prenant un espace de vitesse discret et fini (modèle à six vitesses et modèle à huit vitesses). Ensuite Gatignol en 1970 [Ga75] a étudié les équations générales qui concernent les modèles à vitesses discrètes. Au cours des années 80, une forte activité s’est développée autour de ces modèles à vitesses discrètes et de l’existence de solutions globales de l’équation de Boltzmann discrète. En effet Cabannes [Ca77, Ca78] a obtenu des solutions globales en théorie cinétique discrète. Ensuite Cornille [Co87] a obtenu des solutions analytiques pour

le modèle de Broadwell à six vitesses [Br64]. Cabannes et *al.* [CT94] ont obtenu des solutions exactes pour des modèles à vitesses discrètes de modules différents. On cite aussi les travaux de Bony [Bo87, Bo87] sur l'existence de solutions en une dimension des modèles de Broadwell et de Tartar [Ta76, Ta80] sur l'existence de solution globale pour ces mêmes modèles avec une donnée initiale bornée. Ensuite Cabannes [Ca80, Ca91] a développé ces résultats pour des modèles plus généraux. Pour une étude plus complète de ces méthodes à vitesses discrètes on peut consulter le cours de Cabannes et *al.* [CGL03]

On cite aussi la classe des méthodes DSMC (Direct Simulation Monte Carlo), dues à Bird [Bi76] et Nanbu [Na83]. Ces méthodes ont pour but la résolution de l'équation de Boltzmann. Vu le grand nombre de variables dans cette équation, les méthodes DSMC reposent sur les procédures de Monte Carlo pour calculer le terme de collision dans l'équation de Boltzmann. Les méthodes DSMC sont donc des méthodes particulières aléatoires [Pe94] pour la résolution des équations de Boltzmann.

En 1973, apparaissent les automates cellulaires, les gaz booléens sur réseau proposés par Hardy, de Pazzis et Pomeau [HPP73]. En effet dans cette méthode l'espace, le temps, les vitesses et le nombre de particules présentes à un instant donné en un point donné sont discrets. Cela dans le but de disposer d'un simulateur le plus simple possible à programmer sur ordinateur, pour modéliser les écoulements fluides.

Automates cellulaires

Le modèle Hardy, de Pazzis et Pomeau [HPP73] est un automate bidimensionnel. Il consiste à discrétiser l'espace par un réseau carré de pas $\Delta x = 1$. On associe à chaque lien (*i.e.* arête) du réseau une quantité qui prend la valeur 1 s'il y a une particule ou 0 sinon. L'évolution en un pas de temps unité (*i.e.* $\Delta t = 1$) se décompose de la manière suivante :

- Collision : Cette étape est locale et implique uniquement les liens qui arrivent au même nœud. Parmi les configurations possibles se trouve la collision frontale de deux particules qui peuvent subir une variation de $\pi/2$ de la direction de leur vitesse.
- Advection : Les particules présentes en chaque lien sont transportées vers les quatre plus proches voisins selon leurs vitesses respectives, qui sont données par $c_j = \{c_1 = (1, 0), c_2 = (0, 1), c_3 = (-1, 0), c_4 = (0, -1)\}$. On note que les mouvements sont synchronisés de sorte qu'après advection toutes les particules sont exactement sur les sites (nœuds) du réseau.

L'équation d'évolution du schéma s'écrit alors :

$$n_j(x_i + c_j, t + 1) = n_j(x_i, t) + C_j(n_k), \quad (1.1)$$

où $n_j(x_i, t)$ est le nombre de particules de vitesse c_j au nœud x_i au temps t et $n_j \in \{0, 1\}$. Les indices j, k désignent le numéro de la vitesse discrète, $j, k \in \{1, 2, 3, 4\}$. Le terme C_j modélise l'opérateur de collision.

Cet automate n'est pas adapté pour simuler des écoulements de fluide, en effet la discrétisation spatiale n'autorise pas une isotropie hydrodynamique à grande échelle. De plus il y a des quantités non physiques qui sont conservées à l'échelle macroscopique lors de l'évolution de cet automate.

En 1985 Frisch, Hasslacher et Pomeau [FHP86] ont proposé un nouveau maillage de l'espace utilisant un réseau hexagonal pour obtenir l'isotropie du modèle. A l'aide du développement asymptotique de Chapman-Enskog [CC70] sur l'équation (1.1) on obtient les équations macroscopiques de Navier-Stokes. En particulier on a avec le modèle FHP [FHP86, Wo86, FdH87] à basse vitesse :

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot [g(\rho) \rho u u] = -\nabla P + \nu \Delta(\rho u) + \eta \nabla \nabla \cdot (\rho u). \quad (1.2)$$

Dans ce modèle on note la richesse des cas possibles de l'étape de collision, et le fait de choisir de manière aléatoire la configuration après collision pour la même configuration avant collision.

Les automates sur réseau sont limités par les défauts suivants :

- Bruit intrinsèque dû à la large fluctuation relative des nombres de particules n_j (prendre des moyennes d'ensemble à partir de différentes configurations initiales n'est pas possible pour les situations où les effets non linéaires jouent un rôle)
- Le non respect de l'invariance Galiléenne, qui se traduit par $g(\rho) \neq 1$ dans l'équation macroscopique (1.2).
- La présence dans la pression P d'une contribution non-physique en u^2 .
- Il existe des quantités parasites non-physiques qui sont conservées : celles-ci peuvent affecter le comportement à grande échelle du modèle.

2 Schéma de Boltzmann sur réseau

Historiquement le schéma de Boltzmann sur réseau est obtenu à partir des automates cellulaires. En effet Mac Namara et Zanetti [MZ88] ont proposé de remplacer dans l'équation (1.1) les variables booléennes n_j par leur moyenne f_j et d'obtenir une formulation fondée sur l'équation de Boltzmann avec comme équation d'évolution :

$$f_j(x_i + c_j, t + 1) = f_j(x_i, t) + C_j(f)(x, t), \quad \text{avec } 0 \leq j \leq b,$$

La variable de base est f_j qui est la moyenne spatiale de l'ancienne variable discrète n_j effectuée sur un nombre de nœuds donné. Cette grandeur f_j est continue, prend ses valeurs dans le segment $[0, 1]$ et peut s'interpréter comme une distribution, ou probabilité de présence de particules. On note ici la difficulté d'exprimer l'opérateur de collision C_j surtout lorsque le nombre de vitesses discrètes est important (espace de dimension trois). Pour simplifier le schéma on peut introduire l'opérateur de collision linéarisé autour d'un état d'équilibre f_j^{eq} [HJ89, HSB89]. Ainsi le schéma de Boltzmann est simplifié et l'opérateur de collision s'écrit sous la forme matricielle suivante :

$$C_j(f) = \sum_{k=0}^b S_{j,k} (f_k - f_k^{eq}).$$

Modèle à un seul temps de relaxation : On peut encore simplifier le schéma de Boltzmann sur réseau en utilisant l'approximation de Bhatnagar-Gross-Krook [BGK54] notée souvent ("BGK"), qui consiste à avoir un seul temps de relaxation τ . Ainsi l'opérateur de collision dans les modèles BGK [CCM92, QdHL92] s'écrit sous la forme :

$$C_j(f) = -\frac{1}{\tau} (f_j - f_j^{eq}).$$

On remarque ici que le schéma de Boltzmann sur réseau est entièrement déterminé à partir des f_j^{eq} , de l'opérateur de collision et de l'ensemble des vitesses c_j .

Modèle à plusieurs temps de relaxation ou le modèle d'Humières : Qian, d'Humières et Lallemand [QdHL92] et par ailleurs Succi et *al.* [BSV92] proposent une loi de distribution polynomiale en vitesse pour la distribution d'équilibre f_j^{eq} et un opérateur de relaxation $S_{j,k}$ diagonal. Pour décrire l'opérateur de collision d'Humières [dH92] propose de construire un espace de moments qui sont des combinaisons linéaires des f_j . Le choix naturel des moments est de prendre les moyennes des puissances successives des composantes de la vitesse, comme il est pratiqué en mécanique statistique [HCB54]. Ainsi la collision n'est autre que la relaxation des différents moments. Grâce à l'interprétation physique des moments, leur paramètre de relaxation sera directement lié aux différents coefficients de transport hydrodynamique. Ce mécanisme permet alors de contrôler indépendamment chaque moment à travers son paramètre de relaxation. De plus l'opérateur de collision sera diagonal. On remarque que si on prend le même paramètre de relaxation pour tous les moments on retrouve le modèle BGK. On note que les méthodes de relaxation ont également été développées dans un autre contexte par Coquel-Perthame [CP98], Coquel et *al.* [CGP01] et Berthon [Be05].

Après cette brève introduction de l'origine du schéma Boltzmann sur réseau, on note que cette méthode a des liens directs ou indirects avec d'autres théories :

- L'équation classique de Boltzmann [HL97].
- Les modèles de Broadwell [Br64, Ga75].
- Récemment la méthode des volumes finis [DL08]

Développement général

On va définir ici le schéma de Boltzmann sur réseau [Du07] (à plusieurs temps de relaxation) de la façon la plus générale. En particulier en gardant un pas de discrétisation d'espace Δx et de temps Δt quelconque. Alors qu'ils sont figés à la valeur unité (*i.e.* $\Delta x = \Delta t = 1$) dans les traitements usuels des physiciens.

Notations

Soit Ω un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ (*i.e.* d dimension de l'espace) et $\mathcal{L}$ un maillage régulier de pas $\Delta x > 0$. On note $\mathcal{L}^0 = \{x_i \in (\Delta x \mathbb{Z})^d, 1 \leq i \leq K\}$ l'ensemble des K sommets ou sites (éléments géométriques de dimension zéro) et $\mathcal{L}^1$ l'ensemble des arêtes (éléments géométriques de dimension un) qui joignent les éléments de $\mathcal{L}^0$.

Soit $x \in \mathcal{L}^0$ on définit l'ensemble V_x des voisins du sommet x . On a alors :

$V_x = \{y_j \in \mathcal{L}^0; y_j = x + e_j \Delta x; 0 \leq j \leq J\}$, où J est le nombre de sommets voisins directs de x , e_j sont des vecteurs donnés de $\mathbb{R}^d$.

On suppose que le nombre de voisins J est fini et indépendant du sommet x . Ainsi pour tout sommet $x \in \mathcal{L}^0$, on a pour tout $j \in \{1, 2, \dots, J\}$, $x + e_j \Delta x = y_j \in \mathcal{L}^0$. On suppose aussi qu'on a des propriétés de symétrie centrale par rapport au sommet x :

$$e_0 = 0$$

$$\forall j \in \{1, 2, \dots, J\}, \exists \sigma(j) \in \{1, 2, \dots, J\}; e_{\sigma(j)} = -e_j.$$

On cite ici quelques exemples de réseau régulier :

- Le modèle D1Q3 modèle monodimensionnel à 3 vitesses discrètes (*i.e.* $J=2$). Les vecteurs e_j sont donnés par : $e_0 = (0, 0)$, $e_1 = (1, 0)$, $e_2 = (-1, 0)$, (voir Fig. 1).

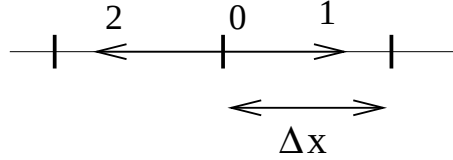


FIG. 1.1 – Réseau du modèle D1Q3

- Le modèle D2Q9 modèle bidimensionnel à 9 vitesses discrètes (*i.e.* $J = 8$). Les vecteurs e_j sont donnés par (voir Fig. 1.2) :

$$\begin{aligned} e_0 &= (0, 0), \\ e_{1,3}, e_{2,4} &= (\pm 1, 0), (0, \pm 1), \\ e_{5,6,7,8} &= (\pm 1, \pm 1). \end{aligned} \tag{1.3}$$

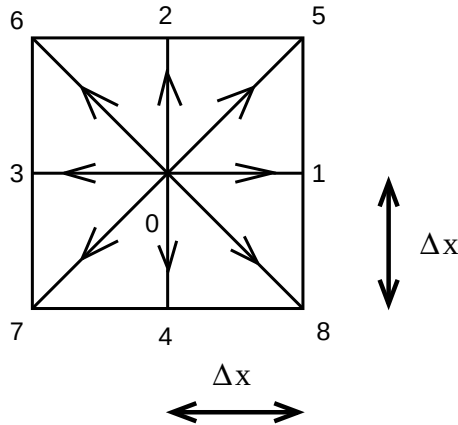


FIG. 1.2 – Réseau du modèle D2Q9

- Le modèle D3Q19 [dHGM02] tridimensionnel à 19 vitesses discrètes (*i.e.* $J =$

18). Les vecteurs c_j sont donnés par (voir Fig. 1.3) :

$$\begin{aligned} c_0 &= (0, 0, 0), \\ c_{1,2}, c_{3,4}, c_{5,6} &= (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1), \\ c_{7,\dots,10}, c_{11,\dots,14}, c_{15,\dots,18} &= (\pm 1, \pm 1, 0), (0, \pm 1, \pm 1), (\pm 1, 0, \pm 1). \end{aligned}$$

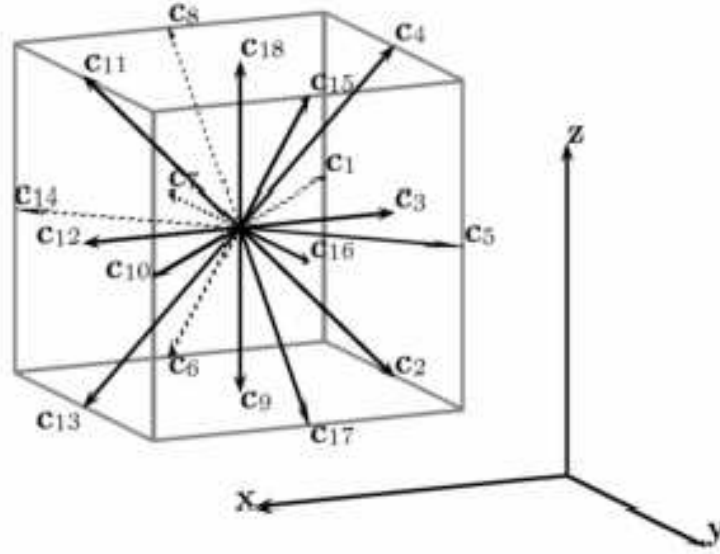


FIG. 1.3 – Réseau du modèle D3Q19

Soit $\Delta t > 0$ un pas de temps fixe. On définit une échelle de vitesse :

$$\lambda \equiv \frac{\Delta x}{\Delta t}. \quad (1.4)$$

On introduit alors les vitesses discrètes définies par :

$$v_j = \lambda e_j, \quad 0 \leq j \leq J.$$

Ainsi si x est un nœud du réseau, alors le point $x + \Delta t v_j$ est un nœud du réseau :

$$x \in \mathcal{L}^0 \implies x + \Delta t v_j \in \mathcal{L}^0, \quad \forall j = 1, 2, \dots, J.$$

On note que l'ensemble V_x des voisins du nœud x contient $J + 1$ voisins : Les J voisins directs associés aux vitesses v_j , $1 \leq j \leq J$ et le nœud x lui même associé à la vitesse discrète nulle v_0 .

Le schéma de Boltzmann sur réseau

Le schéma de Boltzmann sur réseau décrit la distribution de particules $f_j(x_i, t)$ en x_i de vitesse v_j à l'instant t . En chaque nœud du réseau on dispose de $J + 1$ distributions f_j . L'évolution du milieu en un pas de temps Δt , se compose de

deux étapes fondamentales : (1) Advection : transport des particules vers les $J + 1$ voisins, (2) Collision : redistribution des f_j dans chaque nœud. Ces deux étapes sont décrites par l'équation suivante :

$$f_j(x_i + v_j \Delta t, t + \Delta t) = f_j(x_i, t) + \Omega_j(f)(x_i, t). \quad (1.5)$$

Soit $x_i \in \mathcal{L}^0$ un nœud du réseau, on a alors la définition naturelle de la masse ρ , l'impulsion q et l'énergie cinétique e :

$$\rho(x_i, t) = \sum_{j=0}^J f_j(x_i, t) \quad (1.6)$$

$$q^\alpha(x_i, t) \equiv \rho(x_i, t) u^\alpha(x_i, t) = \sum_{j=0}^J v_j^\alpha f_j(x_i, t), \quad 1 \leq \alpha \leq d, \quad (1.7)$$

$$e(x_i, t) = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^J |v_j|^2 f_j(x_i, t), \quad (1.8)$$

où v_j^α sont les composantes cartésiennes des vitesses discrètes du réseau. On introduit l'espace vectoriel $\mathbb{V} \equiv \mathbb{R}^{J+1}$ engendré par les vecteurs $e_j, 0 \leq j \leq J$.

Etape de collision

Cette étape modélise le terme $Id + \Omega$ dans l'équation (1.5), elle est locale en espace. Il est commode de décrire cette étape dans l'espace des moments [dH92]. On introduit les moments m_k comme étant des combinaisons linéaires des f_j , soit :

$$m_k = \sum_{j=0}^J M_{k,j} f_j, \quad 0 \leq k \leq J, \quad (1.9)$$

où $(M_{k,j})_{0 \leq k, j \leq J}$ est une matrice dans $\mathcal{M}_J(\mathbb{R})$. On distingue alors deux types de moments :

- Les moments **conservés** : Le choix du nombre des moments conservés va déterminer le nombre d'équations hydrodynamiques. Pour modéliser les écoulements fluides où on a $d + 1$ équations scalaires macroscopiques (l'équation scalaire de conservation de masse et l'équation vectorielle de conservation de vitesse), on a besoin de $d + 1$ moments conservés. On introduit les variables conservés la masse ρ et l'impulsion q . Ainsi on a

$$\begin{aligned} \rho_*(x_i, t) &= \rho(x_i, t) \\ q_*^\alpha(x_i, t) &= q^\alpha(x_i, t), \quad \forall \alpha = 1, 2, \dots, d, \end{aligned}$$

où l'indice $*$ désigne les quantités après collision.

Remarque 1 Avec $d + 1$ moments conservés, on n'a pas d'équation macroscopique pour l'énergie, qui n'est pas conservée. On parle alors de modèle athermique. Si on ajoute la conservation de l'énergie, on devra utiliser $d + 2$ moments conservés et on obtiendra $d + 2$ équations macroscopiques (e. g. modèle avec effets

thermiques [dH92]). Dans le cas du problème d'advection-diffusion d'une quantité scalaire (e.g. équation de la chaleur), où on a une seule équation macroscopique, on a seulement un scalaire ρ qui est conservé au cours de l'étape de collision.

On définit le vecteur W composé par les moments conservés :

$$W(x, t) = (\rho(x, t), q^1(x, t), \dots, q^d(x, t)). \quad (1.10)$$

Pour $0 \leq k \leq d$, on prend les m_k identiques aux moments conservés :

$$m_0 \equiv \rho, \quad m_\alpha \equiv q^\alpha, \quad 1 \leq \alpha \leq d.$$

Ainsi les $d + 1$ lignes de la matrice $M = (M_{k,j})_{0 \leq k, j \leq J}$ sont fixées :

$$M_{0,j} = 1, \quad M_{\alpha,j} = v_j^\alpha, \quad 0 \leq j \leq J, \quad 1 \leq \alpha \leq d. \quad (1.11)$$

• Les moments **non-conservés** : On suppose que les moments non-conservés relaxent linéairement vers leur valeur d'équilibre :

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

où τ_k et m_k^{eq} sont respectivement le temps de relaxation et la valeur d'équilibre du moment m_k . Les moments à l'équilibre m_k^{eq} , $d + 1 \leq k \leq J$ sont fonctions des moments conservés :

$$m_k^{eq} \equiv \Psi_k(W), \quad d + 1 \leq k \leq J. \quad (1.12)$$

Pour les moments conservés (i.e. $k \leq d$), on a :

$$m_k^{eq} \equiv m_k, \quad 0 \leq k \leq d. \quad (1.13)$$

En utilisant le schéma d'Euler explicite pour l'évolution des m_k par collision, on trouve :

$$m_k^*(x, t) = (1 - s_k)m_k(x, t) + s_k m_k^{eq}, \quad d + 1 \leq k \leq J, \quad (1.14)$$

où $s_k \equiv \frac{\Delta t}{\tau_k}$ est le rapport entre le pas de temps Δt et le temps de relaxation τ_k . On remarque ici qu'on a la condition naturelle de stabilité du schéma d'Euler explicite [St86] :

$$0 \leq \Delta t \leq 2\tau_k.$$

On suppose alors que les taux de relaxation vérifient :

$$0 < s_k \leq 2, \quad d + 1 \leq k \leq J.$$

On choisit les moments m_k , sous la contrainte que la matrice $M = (M_{k,j})_{0 \leq k, j \leq J}$ est inversible. Ainsi on définit l'espace des moments $\mathbb{M}$ en bijection avec l'espace $\mathbb{V}$.

$$\mathcal{M} : \quad \mathbb{V} \quad \rightarrow \quad \mathbb{M}$$

$$f = (f_0, f_1, \dots, f_J) \quad \mapsto \quad \mathcal{M}(f) = M.f = m = (m_0, m_1, \dots, m_J), \quad (1.15)$$

Pour une valeur donnée des moments m_k , on peut calculer la distribution f correspondante :

$$f_j = \sum_{k=0}^J (M^{-1})_{j,k} m^k, \quad 0 \leq j \leq J,$$

où $(M_{j,k}^{-1})_{0 \leq j,k \leq J} \equiv M^{-1}$ est la matrice inverse de la matrice M .

Pour une distribution donnée f , on calcule les f^* après collision de la manière suivante : On passe à l'espace des moments $\mathbb{M}$:

$$m^k = \sum_{j=0}^J (M)_{k,j} f_j,$$

ensuite on applique (1.14), et finalement on revient à l'espace des $\mathbb{V}$:

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

On définit l'opérateur de collision par :

$$\mathcal{C} : \quad \mathbb{V} \quad \rightarrow \quad \mathbb{V}$$

$$f = (f_0, f_1, \dots, f_J) \quad \mapsto \quad \mathcal{C}(f) = M^{-1}.C(M.f),$$

où l'opérateur C est défini dans l'espace $\mathbb{M}$ à valeur dans $\mathbb{M}$ par les expressions (1.14), (1.12) et (1.13).

Etape d'advection

Cette étape décrit le déplacement des particules de vitesse v_j du nœud $x_i \in \mathcal{L}^0$ vers le $j^{\text{ème}}$ voisin $x_i + v_j \Delta t \in \mathcal{L}^0$. La densité $f_j(x_i + v_j \Delta t, t + \Delta t)$ est égale à la densité collisionnée $f_j^*(x_i, t)$ du nœud x_i au temps t :

$$f_j(x_i + v_j \Delta t, t + \Delta t) = f_j^*(x_i, t), \quad 0 \leq j \leq J. \quad (1.16)$$

On peut interpréter le schéma de transport (1.16) comme un schéma décentré amont pour l'équation d'advection :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_j f = 0, \quad 0 \leq j \leq J,$$

avec un nombre de Courant-Friedrichs-Lewy égal à l'unité. Il est classique[St86] de voir que cette étape est exacte.

Soit $\mathcal{V}_f \equiv \mathbb{V}^K$ l'espace vectoriel $\mathbb{R}^{(J+1) \times K}$, on définit alors l'opérateur $\mathcal{A}$ d'advection :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} : \quad \mathcal{V}_f &\rightarrow \mathcal{V}_f \\ \mathcal{F} &\mapsto \mathcal{A}(\mathcal{F}), \end{aligned} \quad (1.17)$$

avec $\mathcal{F} = (f_j(x_i, t))_{(0 \leq j \leq J, 1 \leq i \leq K)}^T$ qui est un vecteur de $\mathcal{V}_f$ et $\mathcal{A}(\mathcal{F}) = (f_j(x_i + v_j \Delta t, t))_{(0 \leq j \leq J, 1 \leq i \leq K)}^T$.

Remarque 2 *On ne précise pas pour l'instant les conditions limites au bord du maillage.*

Nous allons utiliser l'écriture suivante du schéma :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq J, \quad (1.18)$$

qui découle de (1.16) et du changement de variable $\tilde{x}_i = x_i + v_j \Delta t$.

3 Equation équivalente

Les résultats de cette partie sont essentiellement dans les contributions [Du07, Du08]. Le schéma de Boltzmann sur réseau est entièrement défini par les relations (1.18) (1.14), (1.12), (1.9) et le vecteur des moments conservés W . On dispose alors d'un grand nombre de paramètres : la géométrie du maillage régulier $\mathcal{L}^0$ de pas d'espace Δx , le pas de temps Δt , la matrice des moments M , le nombre des moments conservés, les taux s_k et les fonctions d'équilibre Ψ_k .

On suppose pour la suite que le fluide est en évolution isotherme et qu'on a une loi de pression linéaire en ρ , c'est-à-dire une linéarisation de la pression autour d'une densité de référence :

$$p - p_0 = c_0^2(\rho - \rho_0) + O((\rho - \rho_0)^2),$$

où c_0 est la vitesse du son. De plus on prend dans ce qui suit une densité de référence égale à l'unité i. e. $\rho_0 \equiv 1$.

Pour la suite on fixe le maillage $\mathcal{L}^0$ (en particulier les vecteurs e_j), la matrice des moments M , les paramètres s_k et les fonctions Ψ_k . On suppose que le rapport λ défini par (1.4) est constant. Ainsi le schéma de Boltzmann (1.18) dépend seulement du pas du temps Δt .

On dérive alors formellement les équations aux dérivées partielles associées au schéma de Boltzmann sur réseau, en utilisant la méthode de l'équation équivalente [LP74, WH74]. Cette approche est basée sur le développement de Taylor en fonction de la variable réelle Δt en supposant que les fonctions f_j sont assez régulières. On a alors les développements asymptotiques suivants :

Proposition 1 Développement à l'ordre zéro.

Pour un schéma de Boltzmann sur réseau défini par (1.18) et Δt petit on a :

$$\begin{aligned} f_j &= f_j^{eq} + O(\Delta t), \quad 0 \leq j \leq J, \\ f_j^* &= f_j^{eq} + O(\Delta t), \quad 0 \leq j \leq J, \end{aligned}$$

avec $f_j^{eq} = \sum_{k=0}^J (M^{-1})_{j,k} m_k^{eq}$ et $m_k^{eq} = \Psi_k(W)$.

On introduit le tenseur d'ordre deux :

$$F^{\alpha\beta} \equiv \sum_{j=0}^J v_j^\alpha v_j^\beta f_j^{eq}, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq d. \quad (1.19)$$

Pour alléger la notation, on pose $\partial_t \equiv \frac{\partial}{\partial t}$, $\partial_\beta \equiv \frac{\partial}{\partial x_\beta}$ et $\partial_{\alpha\beta} \equiv \frac{\partial}{\partial x_\alpha \partial x_\beta}$. On fait le développement jusqu'à l'ordre un en Δt , on obtient :

Proposition 2 Equations d'Euler.

Dans le schéma de Boltzmann (1.18), les moments conservés vérifient à l'ordre un en Δt , les équations de la conservation de la masse et de l'impulsion :

$$\partial_t \rho + \sum_{\beta=1}^{\beta=d} \partial_\beta q^\beta = O(\Delta t), \quad (1.20)$$

$$\partial_t q^\alpha + \sum_{\beta=1}^{\beta=d} \partial_\beta F^{\alpha\beta} = O(\Delta t), \quad 1 \leq \alpha \leq d. \quad (1.21)$$

Le développement à l'ordre un en Δt pour les moments non-conservés nous donne le lemme suivant :

Lemme 3.1 Développement des moments non-conservés.

On introduit le défaut de conservation θ^k :

$$\theta^k = \partial_t m_k^{eq} + \sum_{j=0}^{j=J} M_{k,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} = \sum_{j=0}^{j=J} M_{k,j} (\partial_t f_j^{eq} + v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq}) \quad (1.22)$$

On a alors les propriétés suivantes :

$$m_k = m_k^{eq} - \frac{\Delta t}{s_k} \theta^k + O(\Delta t^2), \quad k \geq d+1, \quad (1.23)$$

$$m_k^* = m_k^{eq} - \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \Delta t \theta^k + O(\Delta t^2), \quad k \geq d+1. \quad (1.24)$$

On introduit le tenseur :

$$\Lambda_k^{\alpha\beta} \equiv \sum_{j=0}^{j=J} v_j^\alpha v_j^\beta (M^{-1})_k^j, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq d, 0 \leq k \leq J, \quad (1.25)$$

On développe maintenant à l'ordre deux en Δt le schéma (1.18). En utilisant le lemme précédent 3.1, on a :

Proposition 3 Equation de Navier-Stokes.

Le schéma de Boltzmann (1.18) vérifie à l'ordre deux en Δt les équations suivantes :

$$\partial_t \rho + \sum_{\beta=1}^{\beta=d} \partial_\beta q^\beta = O(\Delta t^2), \quad (1.26)$$

$$\partial_t q^\alpha + \sum_{\beta=1}^{\beta=d} \partial_\beta \left(F^{\alpha\beta} - \Delta t \sum_{d \geq d+1} \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{\alpha\beta} \theta^k \right) = O(\Delta t^2), \quad (1.27)$$

où les θ^k sont les défauts de conservation (1.22).

Conclusions

La proposition 3 montre que le schéma de Boltzmann sur réseau résout les équations de type Navier-Stokes et que cette méthode est d'ordre deux. Dans l'équation (1.27) on a des coefficients de transport μ_k proportionnels à $\Delta t \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right)$. A l'aide de la méthode de l'équation équivalente on retrouve les mêmes équations macroscopiques qu'en utilisant la méthode asymptotique de Chapman-Enskog [CC70, dH92].

Un modèle monodimensionnel à trois vitesses D1Q3

On va détailler le cas particulier du schéma de Boltzmann sur réseau où $d = 1$ et $J = 2$.

Géométrie

Le réseau du modèle monodimensionnel (*i.e* $d = 1$) à trois vitesses, appelé D1Q3 dans la communauté du Boltzmann sur réseau, est la discrétisation d'une droite par un pas régulier $\Delta x > 0$:

$$\mathcal{L}^0 = (\Delta x \mathbb{Z}).$$

Les sites voisins d'un nœud donné $x \in \mathcal{L}^0$ sont d'une part x lui-même et d'autre part les deux sites voisins directs à droite et à gauche de x :

$$y_0(x) = x, \quad y_1(x) = x + \Delta x e_1, \quad \text{et} \quad y_2(x) = x + \Delta x e_2.$$

avec $e_0 = 0$, $e_1 = 1$ et $e_2 = -1$ (voir Fig.1.1).

La donnée d'un pas de temps Δt permet de définir une échelle de vitesse :

$$\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}.$$

Au point $x_i \in \mathcal{L}^0$ et à l'instant $t = n\Delta t$ ($n \in \mathbb{N}$), on a trois densités $f_0(x_i, t)$, $f_1(x_i, t)$ et $f_2(x_i, t)$ associées respectivement aux vitesses $v_0 = 0$, $v_1 = \frac{\Delta x}{\Delta t} e_1 = \lambda$ et $v_2 = \frac{\Delta x}{\Delta t} e_2 = -\lambda$. L'algorithme consiste à calculer les $f_j(x, t + \Delta t)$, $\forall x \in \mathcal{L}^0$, $0 \leq j \leq 2$, en fonction des $f_j(x, t)$. Au cours du pas du temps Δt , l'algorithme se compose des deux étapes : la collision et l'advection.

- Etape de collision : cette étape locale en espace est décrite dans l'espace des moments par (1.14). On a deux moments conservés : la masse $m_0 = \rho$ définie par (1.6) et l'impulsion $m_1 = q$ définie par (1.7) :

$$\rho = f_0 + f_1 + f_2, \tag{1.28}$$

$$q = \lambda f_1 - \lambda f_2, \tag{1.29}$$

d'où $W = (\rho, q)$. On a besoin de définir un troisième moment m_2 non-conservé (hors équilibre). Il est naturel d'introduire l'énergie cinétique $m_2 = e$ définie par 1.8 :

$$e = \frac{\lambda^2}{2} f_1 + \frac{\lambda^2}{2} f_2. \tag{1.30}$$

L'évolution de l'énergie est donnée par (1.14) :

$$e^* = e + s_e(e^{eq} - e)$$

avec $e^{eq} = \Psi_2(W)$ et $s_e \equiv s_2$.

On remarque que les expressions des moments (1.28), (1.29) et (1.30), déterminent la matrice M :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & -\lambda \\ 0 & \frac{\lambda^2}{2} & \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

Ainsi on a une transformation de l'espace $\mathbb{V} = \mathbb{R}^3$ des f vers l'espace des moments $\mathbb{M}$:

$$m = M.f, \quad \text{avec} \quad m = (\rho, q, e)^t \quad \text{et} \quad f = (f_0, f_1, f_2)^t.$$

Dans le cas particulier où la fonction $\Psi_2(W) = \Psi_2(\rho, q) = \frac{\alpha\lambda^2}{2}\rho$ [Du07], avec un scalaire α (i.e. $e^{eq} = \frac{\alpha\lambda^2}{2}\rho$), l'opérateur de collision C est linéaire :

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : \quad \mathbb{V} &\rightarrow \mathbb{V} \\ f &\mapsto f^* = M^{-1}CMf, \end{aligned} \quad (1.32)$$

où M^{-1} est la matrice inverse de M donnée par :

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{2}{\lambda^2} \\ 0 & \frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{\lambda^2} \\ 0 & -\frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{\lambda^2} \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

et la matrice C est donnée par :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{\alpha\lambda^2}{2}s_e & 0 & 1 - s_e \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

• Etape d'advection :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 2.$$

C'est une étape de transport avec les trois vitesses discrètes $v_i \in \{0, \lambda, -\lambda\}$. L'algorithme D1Q3 qui est la composée de ces deux étapes s'écrit :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 2. \quad (1.35)$$

Equations macroscopiques

On considère dans cette partie le cas particulier linéaire où $\Psi_2(W) = \frac{\alpha\lambda^2}{2}\rho$.

Proposition 4 Equations à l'ordre 1 (D1Q3).

Au premier ordre, la densité et l'impulsion sont solutions du système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta t), \\ \frac{\partial q}{\partial t} + \lambda^2 \alpha \frac{\partial \rho}{\partial x} = O(\Delta t). \end{cases}$$

On définit la vitesse du son $c_s^2 = \lambda^2 \alpha$.

Preuve: Résultats directs du développement général (1.20) et (1.21). $\square$

Proposition 5 Equations de l'acoustique à l'ordre 2 (D1Q3).

A l'ordre 2, la densité et l'impulsion sont solutions des équations de l'acoustique diffusive :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta t^2), \\ \frac{\partial q}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} - \lambda \Delta x (1 - \alpha) \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = O(\Delta t^2). \end{cases}$$

On introduit la viscosité de volume $\zeta = \lambda \Delta x (1 - \alpha) \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right)$.

Preuve: Le développement (1.26) nous donne l'équation de la conservation de la masse. D'après la formule (1.27) avec $d = 1$ et $J = 2$ on a :

$$\partial_t q^x + c_s^2 \partial_x \rho = \Delta t \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_2^{xx} \partial_x \theta^2 + O(\Delta t^2). \quad (1.36)$$

Or

$$\Lambda_2^{xx} = \sum_{j=0}^2 v_j^x v_j^x (M^{-1})_2^j = \lambda^2 \frac{1}{\lambda^2} + (-\lambda)^2 \frac{1}{\lambda^2} = 2$$

et

$$\theta^2 = \partial_t e^{eq} + \sum_{j=0}^2 M_j^2 v_j^x \partial_x f_{eq}^j = \partial_t e^{eq} + \frac{\lambda^2}{2} \lambda \partial_x f_1^{eq} + \frac{\lambda^2}{2} (-\lambda) \partial_x f_2^{eq} = \partial_t e^{eq} + \frac{\lambda^2}{2} \partial_x q.$$

On remplace alors θ^2 et Λ_2^{xx} dans (1.36) par leurs valeurs, on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_t q^x + c_s^2 \partial_x \rho &= \Delta t \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) 2 \left(\partial_{xt} e^{eq} + \frac{\lambda^2}{2} \partial_{xx} q \right) + O(\Delta t^2) \\ &= \Delta t \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) 2 \left(\frac{\lambda^2}{2} \alpha \partial_{xt} \rho + \frac{\lambda^2}{2} \partial_{xx} q \right) + O(\Delta t^2) \\ &= \Delta t \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) \lambda^2 (-\alpha \partial_{xx} q + \partial_{xx} q) + O(\Delta t^2) \\ &= \Delta t \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) (1 - \alpha) \partial_{xx} q + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

□

Un modèle bidimensionnel à neuf vitesses D2Q9

On va considérer le cas particulier du schéma de Boltzmann sur réseau où $d = 2$ et $J = 8$ (*i.e.* modèle à 9 discrètes), appelé D2Q9 [dH92].

Géométrie

L'espace est discrétisé par un maillage carré de pas régulier $\Delta x > 0$ (voir Fig. 1.4) :

$$\mathcal{L}^0 = \{(\Delta x \mathbb{Z}) \times (\Delta x \mathbb{Z})\}.$$

Dans le modèle D2Q9, les vecteurs e_j , $0 \leq j \leq 8$ sont donnés par (voir Fig. 1.2) :

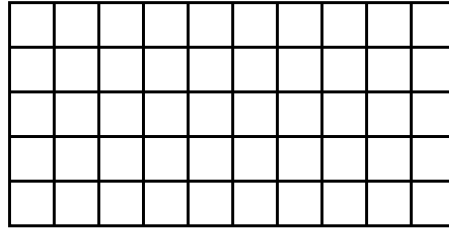


FIG. 1.4 – Maillage du modèle D2Q9

$$\begin{aligned} e_0 &= (0, 0), \\ e_{1,3}, e_{2,4} &= (\pm 1, 0), (0, \pm 1), \\ e_{5,6,7,8} &= (\pm 1, \pm 1). \end{aligned} \tag{1.37}$$

Les sites voisins d'un nœud donné $x \in \mathcal{L}^0$, sont les nœuds $y_j = x + \Delta x e_j$, $0 \leq j \leq 8$, (*i.e.* le nœud $x = y_0$ lui-même ou les 8 voisins directs y_j , $0 < j \leq 8$ du nœud x).

Soit $\Delta t > 0$ le pas de temps fixe, on définit alors l'échelle de vitesse :

$$\lambda \equiv \frac{\Delta x}{\Delta t},$$

on a ainsi les 9 vitesses discrètes $v_j \equiv \lambda e_j$, $0 \leq j \leq 8$.

Les moments **conservés** (*i.e.* à l'équilibre) :

On a trois moments conservés $\rho \equiv m_0$ (la masse), $q^x \equiv m_1$ (l'impulsion suivant x) et $q^y \equiv m_2$ (l'impulsion suivant y), *i.e.* $W = (\rho, q^x, q^y)$. En utilisant les expressions (1.9) et (1.11), on a :

$$\begin{aligned} m_0 &= \sum_{j=0}^J f_j, \\ m_\alpha &= \sum_{j=0}^J \lambda e_j^\alpha f_j, \quad 1 \leq j \leq 2, \end{aligned}$$

où les e_j^α sont les composantes cartésiennes des vecteurs e_j . On a donc :

$$\begin{aligned} q^x &\equiv m_1 = \lambda(f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8), \\ q^y &\equiv m_2 = \lambda(f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8). \end{aligned}$$

Les moments **non-conservés** :

Le choix naturel des moments est de prendre les moyennes des puissances successives des composantes de la vitesse :

$$\begin{aligned} \text{L'énergie cinétique : } \epsilon &= \frac{1}{2} \sum_{j=0}^8 |v_j|^2 f_j, \\ \text{Le carré de l'énergie cinétique : } \chi &= \sum_{j=0}^8 \frac{1}{2} (|v_j|^2)^2 f_j, \\ \text{Flux d'énergie cinétique : } \varphi &= \sum_{j=0}^8 \frac{1}{2} |v_j|^2 v_j f_j, \\ \text{Moments tensoriels d'ordre deux : } &F^{11} - F^{22} \text{ et } F^{12}, \end{aligned}$$

où $F^{\alpha\beta} = \sum_{j=0}^8 v_j^\alpha v_j^\beta f_j$, $1 \leq \alpha, \beta \leq 2$.

Pour que la matrice M de passage de l'espace $\mathbb{V}$ vers l'espace $\mathbb{M}$ des moments, soit orthogonale, on va construire les moments suivants [LL00, Du07] qui seront liés à la liste précédente de moments, par le procédé de Gram-Schmidt. On note ici qu'on choisit les moments m_k , $k \geq 3$ homogènes à f_j pour avoir des quantités faciles à manipuler algébriquement.

Moment associé à l'énergie cinétique :

$$\begin{aligned} m_3 &= \frac{6}{\lambda^2} \epsilon - 4\rho \\ &= -4f_0 - (f_1 + f_2 + f_3 + f_4) + 2(f_5 + f_6 + f_7 + f_8) \end{aligned} \quad (1.38)$$

Moment associé au carré de l'énergie cinétique :

$$\begin{aligned} m_4 &= \frac{18}{\lambda^4} \chi - 10\rho - \frac{7}{2} m_3 \\ &= 4f_0 - 2(f_1 + f_2 + f_3 + f_4) + (f_5 + f_6 + f_7 + f_8) \end{aligned} \quad (1.39)$$

Moments d'ordre trois associés aux flux d'énergie cinétique φ :

$$\begin{aligned} m_5 &= \frac{6}{\lambda^3} \varphi^1 - 5 \frac{q^1}{\lambda} \\ &= -2f_1 + 2f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 \end{aligned} \quad (1.40)$$

$$\begin{aligned} m_6 &= \frac{6}{\lambda^3} \varphi^2 - 5 \frac{q^2}{\lambda} \\ &= -2f_2 + 2f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8, \end{aligned} \quad (1.41)$$

où φ^α , $1 \leq \alpha \leq 2$ sont les composantes cartésiennes du flux d'énergie cinétique φ . Moments tensoriels d'ordre deux :

$$\begin{aligned} m_7 &= \frac{1}{\lambda^2} (F^{11} - F^{22}) \\ &= f_1 - f_2 + f_3 - f_4 \end{aligned} \quad (1.42)$$

$$\begin{aligned}
m_8 &= \frac{1}{\lambda^2} F^{12} \\
&= f_5 - f_6 + f_7 - f_8
\end{aligned} \tag{1.43}$$

Ainsi la matrice M est entièrement déterminée à partir des relations (1.38), (1.39), (1.40), (1.41), (1.42) et (1.43). On définit alors la transformation :

$$\begin{aligned}
\mathcal{M} : \quad \mathbb{V} &\rightarrow \mathbb{M} \\
f = (f_0, f_1, \dots, f_8) &\mapsto \mathcal{M}(f) = M.f = m = (m_0, m_1, \dots, m_8),
\end{aligned} \tag{1.44}$$

avec M donnée par :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1.45}$$

L'inverse de la matrice M (1.45), s'écrit :

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & 0 & 0 & \frac{-4}{36} & \frac{4}{36} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{6\lambda} & 0 & \frac{-1}{36} & \frac{-2}{36} & \frac{-2}{12} & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & 0 & \frac{1}{6\lambda} & \frac{-1}{36} & \frac{-2}{36} & 0 & \frac{-2}{12} & \frac{-1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{6\lambda} & 0 & \frac{-1}{36} & \frac{-2}{36} & \frac{2}{12} & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & 0 & \frac{-1}{6\lambda} & \frac{-1}{36} & \frac{-2}{36} & 0 & \frac{2}{12} & \frac{-1}{4} & 0 \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{6\lambda} & \frac{1}{6\lambda} & \frac{2}{36} & \frac{1}{36} & \frac{1}{12} & \frac{1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{6\lambda} & \frac{1}{6\lambda} & \frac{2}{36} & \frac{1}{36} & \frac{-1}{12} & \frac{1}{12} & 0 & \frac{-1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{-1}{6\lambda} & \frac{-1}{6\lambda} & \frac{2}{36} & \frac{1}{36} & \frac{-1}{12} & \frac{-1}{12} & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{9} & \frac{1}{6\lambda} & \frac{-1}{6\lambda} & \frac{2}{36} & \frac{1}{36} & \frac{1}{12} & \frac{-1}{12} & 0 & \frac{-1}{4} \end{pmatrix}. \tag{1.46}$$

Remarque 3 On peut construire les moments m_k tels que la matrice M soit orthonormée [dH92].

On sait que l'étape de collision se traduit par une relaxation des moments non-conservés :

$$m_k^* = (1 - s_k)m_k + s_k m_k^{eq}, \quad 3 \leq k \leq 8,$$

avec $s_k = \frac{\Delta t}{\tau_k}$ et $m_k^{eq} = \Psi_k(W)$. Le choix des fonctions Ψ_k va déterminer les équations macroscopiques équivalentes et celui des s_k va régler les termes diffusifs du schéma.

On choisit alors les Ψ_k , tels que le modèle soit invariant par rapport au groupe de symétrie de l'ensemble des vitesses v_j et on se restreint au cas où ces fonctions Ψ_k , $3 \leq k \leq 8$ sont des fonctions polynômiales :

$$\Psi_3(W) \equiv m_3^{eq} = \alpha_3 \rho + \frac{\gamma_3}{\lambda^2} (q_x^2 + q_y^2), \quad (1.47)$$

$$\Psi_4(W) \equiv m_4^{eq} = \alpha_4 \rho + \frac{\gamma_4}{\lambda^2} (q_x^2 + q_y^2), \quad (1.48)$$

$$\Psi_5(W) \equiv m_5^{eq} = \frac{c_1}{\lambda} q_x, \quad (1.49)$$

$$\Psi_6(W) \equiv m_6^{eq} = \frac{c_2}{\lambda} q_y, \quad (1.50)$$

$$\Psi_7(W) \equiv m_7^{eq} = \frac{\gamma_7}{\lambda^2} (q_x^2 - q_y^2), \quad (1.51)$$

$$\Psi_8(W) \equiv m_8^{eq} = \frac{\gamma_8}{\lambda^2} q_x q_y. \quad (1.52)$$

Remarque 4 Pour que le choix des Ψ_3 soit symétrique, il faudrait prendre $c_1 = c_2$ dans (1.49) et (1.50). On a gardé une écriture plus générale car on fera plus loin un modèle anisotrope.

Remarque 5 Le choix des Ψ_k , $k \geq 3$ découle de l'approximation polynômiale des différentes moyennes continues des puissances successives de la vitesse lorsque la distribution continue $f(v)$ est une gaussienne. D'où le choix de m_k^{eq} qui est l'approximation polynômiale de la Gaussienne discrète.

Distribution d'équilibre

Soit f_j^{eq} , $0 \leq j \leq 8$ la distribution d'équilibre thermodynamique. On introduit les fonctions G_j , $0 \leq j \leq 8$ telles que :

$$G_j(W) = f_j^{eq},$$

où W est le vecteur des variables conservées introduit en (1.10).

Proposition 6 Distribution d'équilibre.

Le choix des moments d'équilibre m_k^{eq} , $3 \leq k \leq 8$ donnés par les expressions (1.47), (1.48), (1.49), (1.50), (1.51) et (1.52) détermine la distribution d'équilibre G_j :

$$G_0(W) = \frac{1 + \alpha_4 - \alpha_3}{9} \rho - \frac{\gamma_3 - \gamma_4}{9\lambda^2} (q_x^2 + q_y^2)$$

$$G_1(W) = \frac{4 - \alpha_3 - 2\alpha_4}{36} \rho + \frac{1 - c_1}{6\lambda} q_x - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 - 9\gamma_7}{36\lambda^2} q_x^2 - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 + 9\gamma_7}{36\lambda^2} q_y^2$$

$$\begin{aligned}
G_2(W) &= \frac{4 - \alpha_3 - 2\alpha_4}{36}\rho + \frac{1 - c_2}{6\lambda}q_y - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 + 9\gamma_7}{36\lambda^2}q_x^2 - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 - 9\gamma_7}{36\lambda^2}q_y^2 \\
G_3(W) &= \frac{4 - \alpha_3 - 2\alpha_4}{36}\rho - \frac{1 - c_1}{6\lambda}q_x - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 - 9\gamma_7}{36\lambda^2}q_x^2 - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 + 9\gamma_7}{36\lambda^2}q_y^2 \\
G_4(W) &= \frac{4 - \alpha_3 - 2\alpha_4}{36}\rho - \frac{1 - c_2}{6\lambda}q_y - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 + 9\gamma_7}{36\lambda^2}q_x^2 - \frac{2\gamma_4 + \gamma_3 - 9\gamma_7}{36\lambda^2}q_y^2 \\
G_5(W) &= \frac{4 + 2\alpha_3 + \alpha_4}{36}\rho + \frac{2 + c_1}{12\lambda}q_x + \frac{2 + c_2}{12\lambda}q_y + \frac{2\gamma_3 + \gamma_4}{36\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2) + \frac{\gamma_8}{4\lambda^2}q_xq_y \\
G_6(W) &= \frac{4 + 2\alpha_3 + \alpha_4}{36}\rho - \frac{2 + c_1}{12\lambda}q_x + \frac{2 + c_2}{12\lambda}q_y + \frac{2\gamma_3 + \gamma_4}{36\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2) - \frac{\gamma_8}{4\lambda^2}q_xq_y \\
G_7(W) &= \frac{4 + 2\alpha_3 + \alpha_4}{36}\rho - \frac{2 + c_1}{12\lambda}q_x - \frac{2 + c_2}{12\lambda}q_y + \frac{2\gamma_3 + \gamma_4}{36\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2) + \frac{\gamma_8}{4\lambda^2}q_xq_y \\
G_8(W) &= \frac{4 + 2\alpha_3 + \alpha_4}{36}\rho + \frac{2 + c_1}{12\lambda}q_x - \frac{2 + c_2}{12\lambda}q_y + \frac{2\gamma_3 + \gamma_4}{36\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2) - \frac{\gamma_8}{4\lambda^2}q_xq_y
\end{aligned}$$

Preuve: Pour retrouver les distributions d'équilibre il suffit de calculer $G_j(W) = \sum_{k=0}^8 M_{j,k} m_k^{eq}$, avec les m_k^{eq} donnés par les expressions (1.47), (1.48), (1.49), (1.50), (1.51) et (1.52). $\square$

Remarque 6 Tous les termes non linéaires dans les $G_k(W)$ sont divisés par la densité de référence $\rho_0 = 1$.

Equation macroscopique

La technique de l'équation équivalente (voir paragraphe 3) nous donne les équations macroscopiques à l'ordre un et deux en Δt .

Proposition 7 Equations équivalentes du modèle D2Q9 à l'ordre un.

La densité ρ et l'impulsion q vérifient les équations suivantes à l'ordre un en Δt :

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y &= O(\Delta t), \\
\partial_t q_x + \lambda^2 \left(\frac{4 + \alpha_3}{6} \right) \partial_x \rho + \\
&+ \frac{\gamma_3 + 3\gamma_7}{6} \partial_x q_x^2 + \frac{\gamma_3 - 3\gamma_7}{6} \partial_x q_y^2 + \gamma_8 \partial_y (q_x q_y) = O(\Delta t), \\
\partial_t q_y + \lambda^2 \left(\frac{4 + \alpha_3}{6} \right) \partial_y \rho + \\
&+ \gamma_8 \partial_x (q_x q_y) + \frac{\gamma_3 - 3\gamma_7}{6} \partial_y q_x^2 + \frac{\gamma_3 + 3\gamma_7}{6} \partial_y q_y^2 = O(\Delta t),
\end{aligned}$$

où α_3 , γ_3 , γ_7 et γ_8 sont définis en (1.47), (1.51) et (1.52).

Preuve: L'équation de la conservation de la masse découle de l'équation (1.20). L'équation (1.21) nous donne :

$$\partial_t q_\alpha + \sum_{\beta=1}^{\beta=d} \partial_\beta F^{\alpha\beta} = O(\Delta t), \quad 1 \leq \alpha \leq 2,$$

or $F^{\alpha\beta} = \sum_{j=0}^{j=8} v_j^\alpha v_j^\beta f_j^{eq}$. Il suffit alors de calculer F^{xx} , F^{xy} , F^{yx} et F^{yy} . On utilise la relation de l'énergie cinétique $\epsilon = \frac{1}{2}(F^{xx} + F^{yy})$ ainsi que les relations (1.38), (1.42) et (1.43) des moments m_3 , m_7 et m_8 , on trouve :

$$\begin{aligned} F^{xx} &= \frac{\lambda^2}{6} (4\rho + m_3^{eq} + 3m_7^{eq}), \\ F^{xy} = F^{yx} &= m_8^{eq}, \\ F^{yy} &= \frac{\lambda^2}{6} (4\rho + m_3^{eq} - 3m_7^{eq}). \end{aligned}$$

Finalement on remplace m_3^{eq} , m_7^{eq} et m_8^{eq} par leur valeur donnée respectivement par (1.47), (1.51) et (1.52). $\square$

Proposition 8 Equations équivalentes du modèle D2Q9 à l'ordre deux.

La densité ρ et l'impulsion q vérifient les équations suivantes à l'ordre deux en Δt :

$$\partial_t \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y = O(\Delta t^2), \quad (1.53)$$

$$\begin{aligned} \partial_t q_x &+ \lambda^2 \left(\frac{4 + \alpha_3}{6} \right) \partial_x \rho + \frac{\gamma_3 + 3\gamma_7}{6} \partial_x q_x^2 + \frac{\gamma_3 - 3\gamma_7}{6} \partial_x q_y^2 + \gamma_8 \partial_y (q_x q_y) = \\ &= \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{6} [(1 + c_1 - \alpha_3) \partial_x^2 q_x + (1 + c_2 - \alpha_3) \partial_{xy} q_y] + \\ &+ \Delta t \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{1 - c_1}{3} \partial_x^2 q_x - \frac{1 - c_2}{3} \partial_{xy} q_y \right) + \\ &+ \Delta t \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \lambda^2 \left(\frac{2 + c_1}{3} \partial_{yx} q_y + \frac{2 + c_2}{3} \partial_y^2 q_x \right) + O(\Delta t^2), \end{aligned} \quad (1.54)$$

$$\begin{aligned} \partial_t q_y &+ \lambda^2 \left(\frac{4 + \alpha_3}{6} \right) \partial_y \rho + \gamma_8 \partial_x (q_x q_y) + \frac{\gamma_3 - 3\gamma_7}{6} \partial_y q_x^2 + \frac{\gamma_3 + 3\gamma_7}{6} \partial_y q_y^2 = \\ &= \Delta t \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{6} [(1 + c_1 - \alpha_3) \partial_{yx} q_x + (1 + c_2 - \alpha_3) \partial_y^2 q_y] + \\ &+ \Delta t \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{2} \left(-\frac{1 - c_1}{3} \partial_{yx} q_x + \frac{1 - c_2}{3} \partial_y^2 q_y \right) + \\ &+ \Delta t \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \lambda^2 \left(\frac{2 + c_1}{3} \partial_x^2 q_y + \frac{2 + c_2}{3} \partial_{xy} q_x \right) + O(\Delta t^2), \end{aligned} \quad (1.55)$$

où α_3 , γ_3 , c_1 , c_2 , γ_7 et γ_8 sont définis en (1.47), (1.49), (1.50), (1.51) et (1.52).

Preuve: L'équation de la conservation de la masse est le résultat direct de (1.26). Pour retrouver les deux équations de conservation d'impulsions, on utilise l'équation (1.27), les résultats du développement à l'ordre un et on calcule les différents coefficients $\Lambda_k^{\alpha\beta}$ définis par (1.25) et les défauts de conservation θ_k donnés par (1.22). Avec la matrice M^{-1} donnée par l'expression (1.46), on a $\Lambda_k^{\alpha\beta} = 0$ pour $k = 4, 5, 6$ et

$$\Lambda_3^{\alpha\beta} = \frac{\lambda^2}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\Lambda_7^{\alpha\beta} = \frac{\lambda^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\Lambda_8^{\alpha\beta} = \lambda^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

On calcule alors les défauts de conservation θ_k donnés par l'expression (1.22) pour $k = 3$, $k = 7$ et $k = 8$:

$$\theta_3 = \partial_t m_3^{eq} + \partial_x (q_x + \lambda m_5^{eq}) + \partial_y (q_y + \lambda m_6^{eq}),$$

on remplace alors m_5^{eq} , m_6^{eq} par leur valeur (1.49), (1.50) et en ne gardant que la partie linéaire de m_3^{eq} , on obtient :

$$\theta_3 = \alpha_3 \partial_t \rho + (1 + c_1) \partial_x q_x + (1 + c_2) \partial_y q_y + O(|q^2|),$$

or d'après l'équation de conservation de la masse on sait que :

$$\partial_t \rho = -\partial_x q_x - \partial_y q_y + O(\Delta t),$$

on conclut alors :

$$\theta_3 = (1 + c_1 - \alpha_3) \partial_x q_x + (1 + c_2 - \alpha_3) \partial_y q_y + O(|q^2|).$$

Pour θ_7 défini par (1.22), on a :

$$\theta_7 = \partial_t m_7^{eq} + \partial_x (\lambda(f_1^{eq} - f_3^{eq})) + \partial_y (\lambda(-f_2^{eq} + f_4^{eq})),$$

or $(\lambda(f_1^{eq} - f_3^{eq})) = \frac{1-c_1}{3} q_x$ d'après l'expression de G_1 et G_2 , de même on a $(\lambda(-f_2^{eq} + f_4^{eq})) = -\frac{1-c_2}{3} q_y$ d'après l'expression de G_2 et G_4 . On a alors par linéarisation :

$$\theta_7 = \frac{1-c_1}{3} \partial_x q_x - \frac{1-c_2}{3} \partial_y q_y + O(|q^2|).$$

Finalement pour le défaut de conservation θ_8 donné par (1.22), on a

$$\theta_8 = \partial_t m_8^{eq} + \partial_x \left(\frac{2}{3} q_y + \frac{\lambda}{3} m_6^{eq} \right) + \partial_y \left(\frac{2}{3} q_x + \frac{\lambda}{3} m_5^{eq} \right),$$

on obtient alors en utilisant les valeurs de m_5^{eq} , m_6^{eq} données par les expressions (1.51), (1.52) et par linéarisation :

$$\theta_8 = \frac{2+c_2}{3} \partial_x q_y + \frac{2+c_1}{3} \partial_y q_x + O(|q^2|).$$

□

• L'équation (1.53) montre qu'on a la conservation de la masse au moins à l'ordre deux. Dans les équations (1.54), (1.55) on distingue trois types de termes : le terme en $\partial_x \rho$ dans l'équation (1.54) et le terme en $\partial_y \rho$ dans l'équation (1.55) ont le même coefficient $\lambda^2 \left(\frac{4+\alpha_3}{6} \right)$ qui détermine la vitesse du son. Ainsi le choix

du paramètre α_3 fixe la vitesse du son $c_s \equiv \lambda \sqrt{\frac{4+\alpha_3}{6}}$. Les termes de convection qui sont en $\partial_x q_x^2$, $\partial_x q_y^2$ et $\partial_y (q_x q_y)$ dans l'équation (1.54) et en $\partial_y q_x^2$, $\partial_y q_y^2$ et $\partial_x (q_x q_y)$ dans l'équation (1.55). Les termes diffusifs qui sont en $\Delta t \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \lambda^2$ dans les équations (1.54) et (1.55).

Equations de l'acoustique linéaire

Soit le problème acoustique avec diffusion suivant :

$$\begin{cases} \partial_t p + c_0^2 \operatorname{div} u &= 0, \\ \partial_t u_x + \partial_x p - \zeta \partial_x \operatorname{div} u - \nu \Delta u_x &= 0, \\ \partial_t u_y + \partial_y p - \zeta \partial_y \operatorname{div} u - \nu \Delta u_y &= 0, \end{cases} \quad (1.56)$$

qui consiste à chercher l'évolution des inconnues : p la pression du fluide, $u = (u_x, u_y)$ la vitesse du fluide. On suppose que le fluide est en évolution isotherme, c'est-à-dire on a la loi de pression suivante :

$$p = c_0^2 \rho, \quad (1.57)$$

avec c_0^2 le carré de la célérité des ondes sonores et ρ la densité du fluide.

Dans les équations (1.56) on a deux termes visqueux : ζ la viscosité de volume et ν la viscosité de cisaillement. On peut définir la viscosité longitudinale $\xi \equiv \frac{1}{2}\nu + \zeta$, (en deux dimensions) qui est plus pertinente pour les ondes acoustiques.

Pour modéliser le problème (1.56) avec le schéma de Boltzmann D2Q9 on le récrit d'abord en fonction de la masse ρ et de l'impulsion q en utilisant (1.57) et $q = \rho u$:

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y &= 0, \\ \partial_t q_x + c_0^2 \partial_x \rho - \zeta (\partial_x^2 q_x + \partial_{xy} q_y) - \nu (\partial_x^2 q_x + \partial_y^2 q_x) &= 0, \\ \partial_t q_y + c_0^2 \partial_y \rho - \zeta (\partial_{yx} q_x + \partial_y^2 q_y) - \nu (\partial_x^2 q_y + \partial_y^2 q_y) &= 0. \end{cases} \quad (1.58)$$

Proposition 9 Schéma de Boltzmann pour l'acoustique.

Le schéma de Boltzmann D2Q9 avec $m_3^{eq} = \alpha_3 \rho$, où $\alpha_3 = \frac{6c_0^2}{\lambda^2} - 4$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = 0$, $m_8^{eq} = 0$, $s_3 = \left(\frac{1}{2} - \frac{6\zeta}{\alpha_3 \lambda^2 \Delta t}\right)^{-1}$ et $s_7 = s_8 = \left(\frac{1}{2} + \frac{3\nu}{\lambda^2 \Delta t}\right)^{-1}$, admet comme équation équivalente à l'ordre deux en Δt le problème (1.58).

Preuve: Pour modéliser le problème d'acoustique (1.58) avec le schéma de Boltzmann sur réseau D2Q9 on choisit les différents paramètres (*i.e.* les valeurs des moments d'équilibre et les taux de relaxation) pour que les équations équivalentes d'ordre deux données par (1.53), (1.54) et (1.55) coïncident avec le problème (1.58). En effet on choisit $\gamma_3 = \gamma_7 = \gamma_8 = 0$ pour annuler les termes non linéaires des équations (1.54) et (1.55). Pour avoir la vitesse du son c_0 , on cherche α_3 , tel que :

$$c_0^2 = \lambda^2 \frac{4 + \alpha_3}{6},$$

on choisit alors $\alpha_3 = \frac{6c_0^2}{\lambda^2} - 4$.

Pour que la viscosité du modèle soit isotrope on prend $c_1 = c_2 = -1$ et $s_7 = s_8$. On obtient alors avec ce choix une viscosité de volume $-\alpha_3 \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2}\right)$ et une viscosité de cisaillement $\frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}\right)$. Le paramètre α_3 étant fixé par la vitesse du son c_0 , il nous reste à fixer s_3 et s_8 pour avoir :

$$\begin{aligned} \zeta &= -\alpha_3 \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2}\right), \\ \nu &= \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}\right). \end{aligned}$$

□

• On note ici qu'on n'a pas précisé les valeurs de m_4^{eq} , s_4 , s_5 et s_6 car ils n'apparaissent pas dans l'équation équivalente d'ordre deux en Δt . Donc ces paramètres ne jouent pas de rôle au moins à l'ordre deux, par contre il faut les prendre de telle manière que le schéma soit stable (voir paragraphe 5).

Equations de Navier-Stokes

Dans cette partie on va trouver un schéma de Boltzmann sur réseau D2Q9 qui modélise le problème fluide de Navier-Stokes suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y &= 0, \\ \partial_t q_x + \partial_x q_x^2 + \partial_y (q_x q_y) + c_0^2 \partial_x \rho &= \zeta (\partial_x^2 q_x + \partial_{xy} q_y) + \nu (\partial_x^2 q_x + \partial_y^2 q_x), \\ \partial_t q_y + \partial_x (q_x q_y) + \partial_y q_y^2 + c_0^2 \partial_y \rho &= \zeta (\partial_{yx} q_x + \partial_y^2 q_y) + \nu (\partial_x^2 q_y + \partial_y^2 q_y). \end{cases} \quad (1.59)$$

Proposition 10 Schéma de Boltzmann pour Navier-Stokes.

Le schéma de Boltzmann D2Q9 avec $m_3^{eq} = \alpha_3 \rho + \frac{3}{\lambda^2} (q_x^2 + q_y^2)$, où $\alpha_3 = \frac{6c_0^2}{\lambda^2} - 4$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = \frac{q_x^2 - q_y^2}{\lambda^2}$, $m_8^{eq} = \frac{q_x q_y}{\lambda^2}$, $s_3 = \left(\frac{1}{2} - \frac{6\zeta}{\alpha_3 \lambda^2 \Delta t} \right)^{-1}$ et $s_7 = s_8 = \left(\frac{1}{2} + \frac{3\nu}{\lambda^2 \Delta t} \right)^{-1}$, admet comme équation équivalente à l'ordre deux en Δt le problème (1.59).

Preuve: On va procéder par identification comme dans la preuve de la proposition 9. Les équations de Navier-Stokes (1.59) présentent des termes non linéaires (*i.e* de convection) en plus par rapport au problème de l'acoustique (1.58). Donc on garde les mêmes valeurs du problème (1.58) pour α_3 , c_1 , c_2 , s_3 , s_7 et s_8 . Pour les termes non linéaires, il faut avoir les mêmes coefficients dans les équations (1.54), (1.55) et les deux équations de conservation d'impulsion du problème (1.59). On déduit alors :

$$\begin{aligned} \gamma_3 + 3\gamma_7 &= 6, \\ \gamma_3 - 3\gamma_7 &= 0, \\ \gamma_8 &= 1. \end{aligned}$$

On résout le système en γ_3 et γ_7 , on trouve $\gamma_3 = 3$, $\gamma_7 = 1$. □

Remarque 7 Dans ce cas, la distribution d'équilibre définie dans la proposition 6, est donnée par :

$$G_j = f_j^{eq} = w_j \left[\rho + \frac{3}{\lambda} (e_j \cdot q) + \frac{9}{2\lambda^2} (e_j \cdot q) - \frac{3}{2\lambda^2} |q|^2 \right],$$

où $w_0 = \frac{4}{9}$, $w_1 = w_2 = w_3 = w_4 = \frac{1}{9}$ et $w_5 = w_6 = w_7 = w_8 = \frac{1}{36}$. Cette distribution correspond à une distribution classique dans les modèles de type BGK. qui est une approximation de la Gaussienne dans le cas BGK.

Remarque 8 On note ici que le système d'équations équivalentes (1.59) modélise un fluide qui n'est pas incompressible, car les ondes acoustiques sont toujours présentes. De plus les termes non linéaires des équations (1.59) : $\partial_x (q_x q_y) + \partial_y q_y^2$ et $\partial_x (q_x q_y) + \partial_y q_y^2$ diffèrent d'un facteur ρ des termes d'advection de Navier-Stokes.

4 Développement asymptotique de Chapman–Enskog

Pour obtenir les équations macroscopiques on peut utiliser aussi le développement standard de Chapman-Enskog [FdH87] pour une perturbation d'ordre ϵ , ϵ étant le nombre de Knudsen [Ce88] $Kn \equiv \frac{l}{L}$, le rapport entre le libre parcours moyen l (la longueur moyenne parcourue par la particule entre deux collisions successives) et la longueur caractéristique L de l'écoulement du fluide. La méthode de Chapman-Enskog consiste à faire un développement asymptotique formel des f_j en ϵ autour d'un état d'équilibre f_j^{eq} . Ensuite on fait une analyse multiéchelle pour retrouver les équations macroscopiques. On traite ici le cas simple du Chapman-Enskog discret pour le modèle D2Q9 (1.5), décrit par l'équation suivante :

$$f_j(x_k + v_j \Delta t, t + \Delta t) = f_j(x_k, t) - \sum_{i=0}^8 \Omega_{j,i} [(f_i(x_k, t) - f_i^{eq}(x_k, t))], \quad 0 \leq j \leq 8. \quad (1.60)$$

La matrice $(\Omega_{ij})_{0 \leq i,j \leq 8}$ décrit l'étape de collision dans l'espace $\mathbb{V}$ des f_j . En utilisant le développement de Taylor on a :

$$\begin{aligned} f_j(x_k + v_j \Delta t, t + \Delta t) &= f_j(x_k, t) + \\ &+ \Delta t (\partial_t f_j(x_k, t) + v_j^x \partial_x f_j(x_k, t) + v_j^y \partial_y f_j(x_k, t)) + \\ &+ \frac{(\Delta t)^2}{2} [\partial_t^2 f_j(x_k, t) + 2(v_j^x \partial_{tx} f_j(x_k, t) + v_j^y \partial_{ty} f_j(x_k, t)) + \\ &+ (v_j^x)^2 \partial_{xx} f_j(x_k, t) + (v_j^y)^2 \partial_{yy} f_j(x_k, t) + 2v_j^x v_j^y \partial_{xy} f_j(x_k, t)] + O(\Delta t)^3 \end{aligned}$$

On remplace le membre de gauche de l'égalité (1.60) par son développement de Taylor et on obtient :

$$\begin{aligned} &\Delta t (\partial_t f_j(x_k, t) + v_j^x \partial_x f_j(x_k, t) + v_j^y \partial_y f_j(x_k, t)) + \\ &+ \frac{(\Delta t)^2}{2} [\partial_t^2 f_j(x_k, t) + 2(v_j^x \partial_{tx} f_j(x_k, t) + v_j^y \partial_{ty} f_j(x_k, t)) + \\ &+ (v_j^x)^2 \partial_{xx} f_j(x_k, t) + (v_j^y)^2 \partial_{yy} f_j(x_k, t) + 2v_j^x v_j^y \partial_{xy} f_j(x_k, t)] = \\ &= - \sum_{i=0}^8 \Omega_{j,i} [(f_i(x_k, t) - f_i^{eq}(x_k, t))]. \end{aligned} \quad (1.61)$$

On cherche alors f_j sous la forme d'un développement asymptotique en ϵ :

$$f_j = f_j^{(0)} + \epsilon f_j^{(1)} + \epsilon^2 f_j^{(2)} + \dots, \quad (1.62)$$

où les $f_j^{(n)}$ sont les fonctions de Chapman et $f_j^{(0)} \equiv f_j^{eq}$ (*i.e.* on fait un développement autour d'un état d'équilibre). On pose $f \equiv (f_0, f_1, \dots, f_8)$ un vecteur de l'espace $\mathbb{V}$. L'équation (1.61) s'écrit :

$$\begin{aligned} &\Delta t (\partial_t f + V_x \partial_x f + V_y \partial_y f) + \frac{(\Delta t)^2}{2} [\partial_t^2 f + 2(V_x \partial_{tx} f + V_y \partial_{ty} f) + \\ &+ (V_x)^2 \partial_{xx} f + (V_y)^2 \partial_{yy} f + 2V_x V_y \partial_{xy} f] = -\Omega [f - f^{eq}], \end{aligned} \quad (1.63)$$

où $V_x = \text{diag}(v_0^x, \dots, v_8^x)$ et $V_y = \text{diag}(v_0^y, \dots, v_8^y)$ sont des matrices de $M_9(\mathbb{R})$. On réécrit l'équation précédente dans l'espace des moments $\mathbb{M}$ à l'aide de la matrice M (i. e. $m = M.f$), on obtient :

$$\begin{cases} \Delta t \left(\partial_t m + S_x \partial_x m + S_y \partial_y m \right) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left[\partial_t^2 m + 2(S_x \partial_{tx} m + S_y \partial_{ty} m) + \right. \\ \left. + (S_x)^2 \partial_{xx} m + (S_y)^2 \partial_{yy} m + 2S_x S_y \partial_{xy} m \right] = \\ = -M\Omega M^{-1} [m - m^{eq}], \end{cases} \quad (1.64)$$

où $S_\alpha = MV_\alpha M^{-1}$. On fait alors le développement défini par (1.62) dans l'équation (1.64), et on introduit les deux échelles de temps et l'échelle en espace suivant :

$$\begin{aligned} \partial_t &= \epsilon \partial_{t_1} + \epsilon^2 \partial_{t_2}, \\ \partial_{x_\alpha} &= \epsilon \partial_{x'_\alpha}. \end{aligned} \quad (1.65)$$

On a alors à l'ordre un en ϵ :

$$\Delta t \left(\partial_{t_1} m^{(0)} + S_x \partial_{x'} m^{(0)} + S_y \partial_{y'} m^{(0)} \right) = -M\Omega M^{-1} m^{(1)}, \quad (1.66)$$

et à l'ordre deux en ϵ on a :

$$\begin{aligned} \Delta t \left(\partial_{t_2} m^{(0)} + \partial_{t_1} m^{(1)} + S_x \partial_{x'} m^{(1)} + S_y \partial_{y'} m^{(1)} \right) + \\ + \frac{(\Delta t)^2}{2} \left[\partial_{t_1}^2 m^{(0)} + 2(S_x \partial_{t_1 x'} m^{(0)} + S_y \partial_{t_1 y'} m^{(0)}) + \right. \\ \left. + (S_x)^2 \partial_{x'}^2 m^{(0)} + (S_y)^2 \partial_{y'}^2 m^{(0)} + 2S_x S_y \partial_{x' y'} m^{(0)} \right] = \\ = -M\Omega M^{-1} m^{(2)}, \end{aligned} \quad (1.67)$$

or en utilisant (1.66), l'équation (1.67) devient :

$$\begin{aligned} \Delta t \partial_{t_2} m^{(0)} + \Delta t \left(Id - \frac{M\Omega M^{-1}}{2} \right) \left(\partial_{t_1} m^{(1)} + S_x \partial_{x'} m^{(1)} + S_y \partial_{y'} m^{(1)} \right) = \\ = -M\Omega M^{-1} m^{(2)}, \end{aligned} \quad (1.68)$$

On écrit alors les équations qui découlent de l'ordre un de Chapman-Enskog (1.66) (i. e. écrire les 9 équations scalaires revient à calculer $S_x m^{(0)}$ et $S_y m^{(0)}$) :

$$\partial_{t_1} \rho + \partial_{x'} q_x + \partial_{y'} q_y = 0, \quad (1.69)$$

$$\partial_{t_1} q_x + \lambda^2 \partial_{x'} \left(\frac{2}{3} \rho + \frac{1}{6} m_3^{(0)} + \frac{1}{2} m_7^{(0)} \right) + \lambda^2 \partial_{y'} m_8^{(0)} = 0, \quad (1.70)$$

$$\partial_{t_1} q_y + \lambda^2 \partial_{x'} m_8^{(0)} + \lambda^2 \partial_{y'} \left(\frac{2}{3} \rho + \frac{1}{6} m_3^{(0)} - \frac{1}{2} m_7^{(0)} \right) = 0, \quad (1.71)$$

$$\Delta t \left(\partial_{t_1} m_3^{(0)} + \partial_{x'} (q_x + \lambda m_5^{(0)}) + \partial_{y'} (q_y + \lambda m_6^{(0)}) \right) = -s_3 m_3^{(1)}, \quad (1.72)$$

$$\Delta t \left(\partial_{t_1} m_4^{(0)} + \lambda \partial_{x'} m_5^{(0)} + \lambda \partial_{y'} m_6^{(0)} \right) = -s_4 m_4^{(1)}, \quad (1.73)$$

$$\Delta t \left(\partial_{t_1} m_5^{(0)} + \lambda \partial_{x'} \left(\frac{1}{3} (m_3^{(0)} + m_4^{(0)}) - m_7^{(0)} \right) + \lambda \partial_{y'} m_8^{(0)} \right) = -s_5 m_5^{(1)}, \quad (1.74)$$

$$\Delta t \left(\partial_{t_1} m_6^{(0)} + \lambda \partial_{x'} m_8^{(0)} + \lambda \partial_{y'} \left(\frac{1}{3} (m_3^{(0)} + m_4^{(0)}) + m_7^{(0)} \right) \right) = -s_6 m_6^{(1)}, \quad (1.75)$$

$$\Delta t \left(\partial_{t_1} m_7^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_{x'} (q_x - \lambda m_5^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_{y'} (-q_y + \lambda m_6^{(0)}) \right) = -s_7 m_7^{(1)}, \quad (1.76)$$

$$\Delta t \left(\partial_{t_1} m_8^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_{x'} (2q_y + \lambda m_6^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_{y'} (2q_x + \lambda m_5^{(0)}) \right) = -s_8 m_8^{(1)}. \quad (1.77)$$

Remarque 9 *Lien entre les fonctions de Chapman et les défauts de conservations : On note ici qu'on a la relation suivante entre les $m_k^{(1)}$, $3 \leq k \leq 8$ et les défauts de conservation définis par (1.22) :*

$$\begin{aligned}\partial_{t_2} m_k^{(0)} &= \frac{s_k}{\epsilon \Delta t} m_k^{(1)} + \frac{1}{\epsilon^2} \theta_k \\ &= \frac{1}{\epsilon \tau_k} m_k^{(1)} + \frac{1}{\epsilon^2} \theta_k.\end{aligned}$$

De même on écrit les trois premières équations qui découlent de l'équation d'ordre deux en ϵ (1.68) de Chapman-Enskog, on obtient :

$$\begin{aligned}\partial_{t_2} \rho &= 0, \\ \partial_{t_2} q_x + \frac{\lambda^2}{6} \left(1 - \frac{s_3}{2}\right) \partial_{x'} m_3^{(1)} + \frac{\lambda^2}{2} \left(1 - \frac{s_7}{2}\right) \partial_{x'} m_7^{(1)} + \lambda^2 \left(1 - \frac{s_8}{2}\right) \partial_{y'} m_8^{(1)} &= 0, \\ \partial_{t_2} q_y + \lambda^2 \left(1 - \frac{s_8}{2}\right) \partial_{x'} m_8^{(1)} + \frac{\lambda^2}{6} \left(1 - \frac{s_3}{2}\right) \partial_{y'} m_3^{(1)} - \frac{\lambda^2}{2} \left(1 - \frac{s_7}{2}\right) \partial_{y'} m_7^{(1)} &= 0.\end{aligned}$$

On remplace alors $m_3^{(1)}$, $m_7^{(1)}$ et $m_8^{(1)}$ par leur expression déduite des équations (1.72), (1.76) et (1.77) dans les équations précédentes et on obtient :

$$\begin{aligned}\partial_{t_2} q_x - \frac{\Delta t \lambda^2}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2}\right) \partial_{x'} \left(\partial_{t_1} m_3^{(0)} + \partial_{x'} (q_x + \lambda m_5^{(0)}) + \partial_{y'} (q_y + \lambda m_6^{(0)})\right) \\ - \frac{\Delta t \lambda^2}{2} \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2}\right) \partial_{x'} \left(\partial_{t_1} m_7^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_{x'} (q_x - \lambda m_5^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_{y'} (-q_y + \lambda m_6^{(0)})\right) \\ - \Delta t \lambda^2 \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}\right) \partial_{y'} \left(\partial_{t_1} m_8^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_{x'} (2q_y + \lambda m_6^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_{y'} (2q_x + \lambda m_5^{(0)})\right) &= 0, \\ \partial_{t_2} q_y - \Delta t \lambda^2 \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}\right) \partial_{x'} \left(\partial_{t_1} m_8^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_{x'} (2q_y + \lambda m_6^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_{y'} (2q_x + \lambda m_5^{(0)})\right) \\ - \frac{\Delta t \lambda^2}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2}\right) \partial_{y'} \left(\partial_{t_1} m_3^{(0)} + \partial_{x'} (q_x + \lambda m_5^{(0)}) + \partial_{y'} (q_y + \lambda m_6^{(0)})\right) \\ + \frac{\Delta t \lambda^2}{2} \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2}\right) \partial_{y'} \left(\partial_{t_1} m_7^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_{x'} (q_x - \lambda m_5^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_{y'} (-q_y + \lambda m_6^{(0)})\right) &= 0.\end{aligned}$$

On multiplie par ϵ les équations (1.69), (1.70) et (1.71), et par ϵ^2 les équations précédentes. On somme alors les équations une à une et en utilisant le changement d'échelle donné par (1.65), on obtient les équations macroscopiques suivantes :

$$\begin{aligned}\epsilon \partial_{t_1} \rho + \epsilon^2 \partial_{t_2} \rho + \epsilon \partial_{x'} q_x + \epsilon \partial_{y'} q_y &= \partial_t \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y = 0, \\ \partial_{t_2} q_x + \lambda^2 \partial_x \left(\frac{2}{3} \rho + \frac{1}{6} m_3^{(0)} + \frac{1}{2} m_7^{(0)}\right) + \lambda^2 \partial_{y'} m_8^{(0)} &= \\ &= \frac{\Delta t \lambda^2}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2}\right) \partial_x \left(\epsilon \partial_{t_1} m_3^{(0)} + \partial_x (q_x + \lambda m_5^{(0)}) + \partial_y (q_y + \lambda m_6^{(0)})\right) \\ &+ \frac{\Delta t \lambda^2}{2} \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2}\right) \partial_x \left(\epsilon \partial_{t_1} m_7^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_x (q_x - \lambda m_5^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_y (-q_y + \lambda m_6^{(0)})\right) \\ &+ \Delta t \lambda^2 \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}\right) \partial_y \left(\epsilon \partial_{t_1} m_8^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_x (2q_y + \lambda m_6^{(0)}) + \frac{1}{3} \partial_y (2q_x + \lambda m_5^{(0)})\right),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_t q_y &+ \lambda^2 \partial_x m_8^{(0)} + \lambda^2 \partial_y \left(\frac{2}{3} \rho + \frac{1}{6} m_3^{(0)} - \frac{1}{2} m_7^{(0)} \right) = \\
&= \Delta t \lambda^2 \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \partial_x \left(\epsilon \partial_{t_1} m_8^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_x \left(2q_y + \lambda m_6^{(0)} \right) + \frac{1}{3} \partial_y \left(2q_x + \lambda m_5^{(0)} \right) \right) \\
&+ \frac{\Delta t \lambda^2}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \partial_y \left(\epsilon \partial_{t_1} m_3^{(0)} + \partial_x \left(q_x + \lambda m_5^{(0)} \right) + \partial_y \left(q_y + \lambda m_6^{(0)} \right) \right) \\
&- \frac{\Delta t \lambda^2}{2} \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) \partial_y \left(\epsilon \partial_{t_1} m_7^{(0)} + \frac{1}{3} \partial_x \left(q_x - \lambda m_5^{(0)} \right) + \frac{1}{3} \partial_y \left(-q_y + \lambda m_6^{(0)} \right) \right).
\end{aligned}$$

Sachant que les $m_k^{(0)} = m_k^{eq}$, on prend alors les mêmes valeurs d'équilibre et les mêmes coefficients s_k que dans la proposition 10 (*i. e.* $m_3^{eq} = \alpha_3 \rho + \frac{3}{\lambda^2} (q_x^2 + q_y^2)$, où $\alpha_3 = \frac{6c_0^2}{\lambda^2} - 4$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = \frac{q_x^2 - q_y^2}{\lambda^2}$, $m_8^{eq} = \frac{q_x q_y}{\lambda^2}$, $s_3 = \left(\frac{1}{2} - \frac{6\zeta}{\alpha_3 \lambda^2 \Delta t} \right)^{-1}$ et $s_7 = s_8 = \left(\frac{1}{2} + \frac{3\nu}{\lambda^2 \Delta t} \right)^{-1}$), on retrouve alors les équations de Navier-Stokes (1.59).

On note que $\epsilon \partial_{t_1} m_3^{(0)} = \alpha_3 \partial_t \rho$ car $\partial_{t_2} \rho = 0$ et qu'il faut négliger les termes non linéaires en ϵq_α^2 .

- Dans la communauté Boltzmann sur réseau, les pas de temps Δt et d'espace Δx sont fixés à l'unité (*i. e.* $\Delta t = 1$, $\Delta x = 1$). Ici on a fait le développement dans le cas général pour avoir les bonnes unités des coefficients de transport et de diffusion et voir leur dépendance *via* le maillage.
- En utilisant la méthode de l'équation équivalente et le développement de Chapman-Enskog discret on retrouve les mêmes équations macroscopiques à l'ordre deux en Δt .

5 Equation de dispersion et stabilité du schéma

Dans cette partie on considère les solutions de type onde plane de fréquence ω et de vecteur d'onde k sous la forme : $f_j(x, t) = \phi_j e^{i(\omega t - k \cdot x)}$, $0 \leq j \leq J$. Dans un premier temps on va étudier le schéma de Boltzmann D1Q3 linéaire (*i.e* le cas de l'acoustique). Ensuite on étudie le schéma D2Q9 linéaire et non linéaire.

Equation de dispersion

• Le cas du schéma D1Q3 linéaire :

On considère le schéma D1Q3 introduit dans la section 2 et dont l'équation d'évolution est donnée par (1.35) :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 2. \quad (1.78)$$

où f_j^* est donné par l'opérateur de collision $\mathcal{C}$ défini par (1.32). En utilisant alors la transformée de Fourier, on peut écrire localement le schéma de Boltzmann. En particulier l'étape d'advection.

Proposition 11 Etape d'advection.

On se donne une solution f du schéma sous la forme $f_i(x, t) = \phi_i e^{i(\omega t - kx)}$, (i. e. onde plane). L'opérateur d'advection (2.6) s'écrit sous la forme matricielle :

$$A \equiv \text{diag}(1, p, 1/p), \quad \text{avec} \quad p \equiv e^{(ik\Delta x)},$$

de plus on a

$$\begin{aligned} f(x, t + \Delta t) &= Af^*(x, t), \\ (f_0(x, t + \Delta t), f_1(x, t + \Delta t), f_2(x, t + \Delta t))^t &= \left(f_0^*(x, t), pf_1^*(x, t), \frac{1}{p}f_2^*(x, t) \right)^t. \end{aligned}$$

Preuve: Soit $x_i = m\Delta x$ et $t = n\Delta t$, on a :

$$f_j(x_i, t) = f_j(m\Delta x, n\Delta t) = \phi_j e^{i(\omega n\Delta t - km\Delta x)}$$

De même on a :

$$f_j^*(x_i - v_j\Delta t, t) = f_j^*(m\Delta x - v_j\Delta t, n\Delta t) = e^{ike_j\Delta x} e^{i(\omega n\Delta t - km\Delta x)} \phi_j^*. \quad (1.79)$$

On écrit alors l'étape d'advection $f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j\Delta t, t)$, on remplace $f_i^*(x_j - v_i\Delta t, t)$ en utilisant (1.79), on trouve alors :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = e^{ike_j\Delta x} f_j^*(x_i, t), \quad 0 \leq j \leq 2.$$

□

Comme on est dans le cas linéaire l'opérateur de collision s'écrit sous la forme matricielle (1.32), alors on dispose de l'écriture suivante du schéma :

Proposition 12 Matrice globale du schéma.

Pour les solutions de type onde plane $f_j(x_i, t) = \phi_j e^{i(\omega t - kx)}$, l'équation d'évolution de l'algorithme (1.35), s'écrit sous la forme :

$$f(x_i, t + \Delta t) = Gf(x_i, t), \quad (1.80)$$

avec

$$G = A(M^{-1}CM) = \begin{pmatrix} 1 - \alpha s & s(1 - \alpha) & s(1 - \alpha) \\ \frac{\alpha s}{2}p & \left(1 - \frac{s(1 - \alpha)}{2}\right)p & \frac{-s(1 - \alpha)}{2}p \\ \frac{\alpha s}{2}\frac{1}{p} & \frac{-s(1 - \alpha)}{2}\frac{1}{p} & \left(1 - \frac{s(1 - \alpha)}{2}\right)\frac{1}{p} \end{pmatrix},$$

la matrice d'évolution globale de l'algorithme D1Q3 où M , M^{-1} et C sont données par (1.31), (1.33) et (1.34).

Preuve: En utilisant (1.32) et la proposition 11 on a :

$$f(x_i, t + \Delta t) = A(M^{-1}CM)f(x_i, t).$$

□

La matrice G dépendant du facteur de phase $p = e^{ik\Delta x}$, on la note alors $G \equiv G(p)$. On introduit ensuite le facteur de temps

$$z \equiv e^{i\omega\Delta t}, \quad (1.81)$$

ceci conduit à :

Proposition 13 Equation de dispersion.

Soit f une solution non triviale du schéma D1Q3 de la forme :

$$f(m\Delta x, n\Delta t) = \phi e^{i(\omega n\Delta t - km\Delta x)}, \quad (1.82)$$

avec m et n les numéros respectifs d'espace et de temps, ω et k la fréquence et le vecteur d'onde. On a alors l'équation dispersion suivante :

$$\det [G(p) - z Id] = 0, \quad \text{avec } z = e^{i\omega\Delta t}. \quad (1.83)$$

Preuve: En remplaçant la solution f dans l'équation (1.95) par (1.82), on obtient :

$$zf(x_i, t) = Gf(x_i, t),$$

où z est défini par (1.81).

Pour que le schéma D1Q3 admette une solution non triviale f , il faut que :

$$\det [G(p) - z Id] = 0,$$

qui est l'équation de dispersion. □

Remarque 10 *L'équation de dispersion nous donne une relation entre ω et k via la relation entre z et p . Pour k fixé (i. e. p fixé) on a un problème aux valeurs propres. Les valeurs propres solutions de ce problème vont nous donner l'expression des coefficients de transport en fonction du vecteur d'onde k , (voir [LL00]).*

• **Le cas du schéma D2Q9 linéaire :**

On considère le schéma D2Q9 linéaire défini dans la section 2 et dont l'équation d'évolution est donnée par (1.18) :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j\Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8, \quad (1.84)$$

qui modélise à l'ordre deux en Δt , le problème de l'acoustique (1.58) où les moments d'équilibre sont donnés par : $m_3^{eq} = \alpha_3\rho$, $m_4^{eq} = \alpha_4\rho$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = q_y\lambda$, $m_7^{eq} = m_8^{eq} = 0$ et $s_7 = s_8$. Ainsi l'étape de collision est linéaire et s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : \quad \mathbb{V} &\rightarrow \mathbb{V} \\ f &\mapsto f^* = M^{-1}CMf, \end{aligned} \quad (1.85)$$

où la matrice C est donnée par :

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_3\alpha_3 & 0 & 0 & 1-s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_4\alpha_4 & 0 & 0 & 0 & 1-s_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{s_5}{\lambda} & 0 & 0 & 1-s_5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{s_6}{\lambda} & 0 & 0 & 1-s_6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1-s_8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1-s_8 \end{pmatrix}, \quad (1.86)$$

avec les matrices M , M^{-1} données respectivement par (1.45), (1.46).

On cherche les solutions de la forme $f_j(x, t) = \phi_j e^{i(\omega t - k \cdot x)}$, $0 \leq j \leq 8$, où $k = (k_x, k_y)$. Pour l'étape d'advection, on a :

Proposition 14 Etape d'advection.

On se donne une solution f sous la forme $f_i(x, t) = \phi_i e^{i(\omega t - k \cdot x)}$, où ω est la fréquence et $k \equiv (k_x, k_y)$ est le vecteur d'onde. On peut alors écrire l'opérateur d'advection sous la forme matricielle :

$$A \equiv \text{diag}(1, p, q, \frac{1}{p}, \frac{1}{q}, pq, \frac{q}{p}, \frac{1}{pq}, \frac{p}{q}), \text{ avec } p \equiv e^{(ik_x \Delta x)}, \text{ et } q \equiv e^{(ik_y \Delta x)}, \quad (1.87)$$

de plus on a

$$f(x, t + \Delta t) = Af^*(x, t).$$

Preuve: Il suffit de reprendre la démonstration de la proposition 11, on a alors $A = (A_{i,j})_{0 \leq i,j \leq 8}$ avec :

$$A_{i,j} = e^{ik \cdot v_i \Delta t} \delta_{ij} = e^{ik_x e_i^x \Delta x} e^{ik_y e_i^y \Delta x} \delta_{ij}, \quad 0 \leq i, j \leq 8,$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker et les e_i sont données par (1.37). $\square$

On écrit alors l'équation du schéma (1.84) dans l'espace de Fourier, en vue d'écrire le schéma sous forme matricielle :

Proposition 15 Matrice globale du schéma.

Pour les solutions de type onde plane $f_j(x_i, t) = \phi_j e^{i(\omega t - k \cdot x)}$, l'équation d'évolution de l'algorithme (1.84), s'écrit sous la forme :

$$f(x_i, t + \Delta t) = Gf(x_i, t), \quad (1.88)$$

avec

$$G \equiv A(M^{-1}CM),$$

la matrice d'évolution globale de l'algorithme D2Q9 où A , M , M^{-1} et C sont données respectivement par (1.87), (1.45), (1.46) et (1.86).

Preuve: Il suffit de reprendre la démonstration de la proposition 12. $\square$

La matrice G dépendant des facteurs de phase $p = e^{ik_x \Delta x}$ et $q = e^{ik_y \Delta x}$, on la note alors $G \equiv G(p, q)$. On introduit ensuite le facteur de temps

$$z \equiv e^{i\omega \Delta t}, \quad (1.89)$$

on a alors :

Proposition 16 Equation de dispersion.

Soit f une solution non triviale du schéma D2Q9 de la forme :

$$f(m\Delta x, n\Delta x, l\Delta t) = \phi e^{i(\omega l\Delta t - mk_x \Delta x - nk_y \Delta x)}, \quad (1.90)$$

avec m, n les numéros d'espace et l le numéro du temps, ω la fréquence et $k = (k_x, k_y)$ le vecteur d'onde. On a alors l'équation de dispersion suivante :

$$\det [G(p, q) - z Id] = 0, \quad \text{avec } z = e^{i\omega \Delta t}. \quad (1.91)$$

• **Le cas du schéma D2Q9 non linéaire :**

La difficulté pour les schémas non linéaires réside dans l'écriture de l'étape de collision. On prend par exemple le cas du schéma D2Q9 défini par la proposition 10, dont les équations macroscopiques sont celles de Navier-Stokes (1.59). On a des moments d'équilibre qui sont des fonctions non linéaires en q . En effet on a d'après la proposition 10 : $m_3^{eq} = \alpha_3 \rho + \frac{3}{\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2)$, $m_4^{eq} = \alpha_4 \rho + \frac{\gamma_4}{\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2)$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = \frac{q_x^2 - q_y^2}{\lambda^2}$, $m_8^{eq} = \frac{q_x q_y}{\lambda^2}$ et $s_7 = s_8$. Pour étudier le cas non linéaire on propose de considérer le cas particulier où le fluide est dans une configuration f proche d'un état d'équilibre $f^{(0)}$ de densité ρ et de vitesse $V = (V_x, V_y)$. Ensuite on linéarise le schéma autour de l'état $f^{(0)}$. En effet on a

$$f = f^{(0)} + \delta f,$$

où δf est l'écart du fluide par rapport à l'état d'équilibre $f^{(0)}$. Ainsi δf est solution du schéma de Boltzmann linéarisé :

$$\delta f_j(x_i, t + \Delta t) = (\delta f)_j^{*d}(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8, \quad (1.92)$$

où $(\delta f)^{*d}(x_i, t)$ est l'image de $(\delta f)(x_i, t)$ par l'opérateur $\tilde{\mathcal{C}}$ défini par :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{C}} : \quad \mathbb{V} &\rightarrow \mathbb{V} \\ f &\mapsto f^{d*} = M^{-1} \tilde{\mathcal{C}} M f, \end{aligned} \quad (1.93)$$

où la matrice $\tilde{C}$ est la dérivée de l'opérateur de collision non linéaire C en $f = f^{(0)}$, (i.e. $\tilde{C} = \left(\frac{\partial C_i}{\partial f_j} \Big|_{f=f^{(0)}} \right)_{0 \leq i,j \leq 8}$). On a alors $\tilde{C}$ donnée par :

$$\tilde{C} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_3 \alpha_3 & \frac{s_3 \gamma_3 V_x}{\lambda^2} & \frac{s_3 \gamma_3 V_y}{\lambda^2} & 1 - s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_4 \alpha_4 & \frac{s_4 \gamma_4 V_x}{\lambda^2} & \frac{s_4 \gamma_4 V_y}{\lambda^2} & 0 & 1 - s_4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{s_5}{\lambda} & 0 & 0 & 1 - s_5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{s_6}{\lambda} & 0 & 0 & 1 - s_6 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_8 \gamma_7 V_x}{\lambda^2} & \frac{-s_8 \gamma_7 V_y}{\lambda^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 & 0 \\ 0 & \frac{s_8 \gamma_8 V_x}{\lambda^2} & \frac{s_8 \gamma_8 V_y}{\lambda^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 \end{pmatrix}. \quad (1.94)$$

Les matrices M , M^{-1} sont données respectivement par (1.45), (1.46).

Proposition 17 Matrice globale et équation de dispersion du schéma linéarisé.

Pour les solutions de type onde plane $f_j(x_i, t) = \phi_j e^{i(\omega t - k \cdot x)}$, l'équation d'évolution de l'algorithme (1.84) linéarisé, s'écrit sous la forme :

$$f(x_i, t + \Delta t) = G f(x_i, t), \quad (1.95)$$

avec $G \equiv A(M^{-1} \tilde{C} M)$, la matrice d'évolution globale de l'algorithme D2Q9 et M , M^{-1} et $\tilde{C}$ données respectivement par (1.45), (1.46) et (1.94). On a alors l'équation de dispersion suivante :

$$\det [G(p, q) - z Id] = 0, \quad \text{avec } z = e^{i\omega \Delta t}, \quad p = e^{ik_x \Delta x} \text{ et } q = e^{ik_y \Delta x}.$$

Preuve: Il suffit de reprendre le cas D2Q9 linéaire en remplaçant la matrice C par la matrice $\tilde{C}$. $\square$

Etude numérique de la stabilité

• On définit une norme pour la solution numérique $f^n = (f(x_i, n\Delta t))_{0 \leq j \leq J, 1 \leq i \leq N}$ où N est le nombre de site du réseau et $f = (f_0, f_1, \dots, f_J)$. On reprend la norme classique sur $\mathbb{R}^N$ pondérée par le pas d'espace Δx par :

$$\|f^n\|_2 \equiv \left(\sum_{i=1}^N \Delta x |f(x_i, n\Delta t)|^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.96)$$

Grâce à la pondération par Δx , la norme $\|f^n\|_2$ est identique à la norme L^2 .

Définition 1 Un schéma de Boltzmann sur réseau est dit L^2 **stable**, s'il existe une constante $K > 0$ indépendante de Δt et Δx telle que :

$$\|f^n\|_2 \leq K \|f^0\|_2 \quad \text{pour tout } n \geq 0,$$

quelle que soit la donnée initiale f^0 .

• On considère dans un premier temps le schéma de Boltzmann D1Q3. Pour étudier la stabilité L^2 du schéma numérique on utilise la méthode de Von Neumann qui repose sur l'analyse de Fourier. On cherche les solutions de type onde plane $f_j = \phi_j e^{i(\omega t - k \cdot x)}$ et on suppose que les conditions aux limites sont des conditions périodiques. D'après la proposition 12, le schéma s'écrit dans l'espace de Fourier :

$$f(x_i, t + \Delta t) = G(p)f(x_i, t),$$

où $p = e^{ik\Delta x}$.

Autrement dit :

$$f^{n+1} = G(p)f^n = G(p)^{n+1}f^0.$$

Pour $p \in \mathbb{C}$, le coefficient de Fourier f^n est borné lorsque n tend vers l'infini si et seulement si les coefficients de la matrice d'amplification puissance n (*i.e.* G^n) sont bornés indépendamment de n .

Proposition 18 Stabilité L^2 [RM67].

Pour que le schéma Boltzmann sur réseau soit L^2 stable, il suffit que la matrice d'amplification G soit diagonalisable et que toutes ses valeurs propres λ_i soient toutes strictement majorées en module par 1 selon :

$$|\lambda_i| < 1 \quad \forall i = 1, \dots, J.$$

Preuve: Si les coefficients de Fourier sont bornés, alors par la formule de Plancherel on en déduit la stabilité L^2 du schéma :

$$\|f^{n+1}\|_2 \leq \|G^{n+1}\| \|f^0\|_2 \leq K \|f^0\|_2.$$

Si G est diagonalisable et que toutes ses valeurs propres λ_i sont toutes strictement majorées en module par 1, alors il existe $K > 0$, tel que $\|G^{n+1}\| \leq K \quad \forall n \in \mathbb{N}$. $\square$

Donc pour étudier la stabilité du schéma de Boltzmann sur réseau il faut trouver les valeurs propres de la matrice $G(p)$, montrer qu'ils sont de module plus petit que 1 et montrer que la matrice est diagonalisable. On résout analytiquement le problème aux valeurs propres. On étudie ensuite les valeurs propres numériquement pour une vitesse de son donnée et pour un s fixé. En effet pour un vecteur d'onde k donné (*i.e.* pour p), on calcule les valeurs propres $z(k)$ qui sont les solutions :

$$Q(z) \equiv \det[G(p) - zId] = 0,$$

où Q est un polynôme de degré 3 en z . On fait alors varier le vecteur d'onde k et on étudie le comportement des valeurs propres $z_\alpha(k)$.

• On a alors les valeurs propres suivantes :

- $z_{0,1} = 1 \pm i \frac{k}{c_s} + o(k)$, qui correspondent aux deux modes hydrodynamiques (conservés) : deux modes longitudinaux (sonores). Notés vp0 et vp1 sur la figure 1.5.
- $z_2 = (1 - s) + o(k)$, qui correspond au mode rapide (non conservés). Noté vp2 sur la figure 1.5.

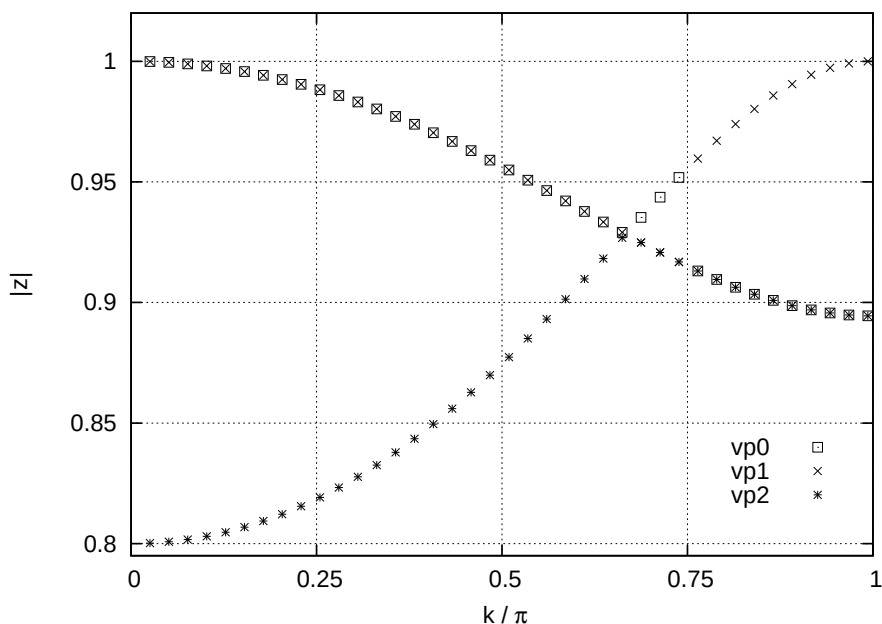


FIG. 1.5 – Module des valeurs propres du modèle D1Q3 en fonction de $|k|$. La valeur du paramètre $\alpha = \frac{1}{3}$, le coefficient de relaxation : $s = 1.8$.

- On fait varier le module du vecteur d'onde k entre 0 et π (pour des raisons de périodicité), et on calcule numériquement les valeurs propres de la matrice $G(p, q)$, (*i. e.* racines z_α du polynôme Q), pour un jeu de paramètres (α, s) donné. L'algorithme est alors stable (proposition 18) pour cette configuration si le module de (z_α) est strictement plus petit que 1 pour tout k . Pour calculer les valeurs propres de la matrice $G(p,)$, on a utilisé Maple. La figure 1.5 montre que le module des 3 modes est inférieur à 1 pour une configuration des paramètres. La figure 1.6 montre que le module de la différence des valeurs propres (*i. e.* $|z_0 - z_1|$, $|z_0 - z_2|$ et $|z_1 - z_2|$) est non nul pour tout k . Cela prouve que les trois valeurs propres sont différents et que la matrice $G(p)$ est diagonalisable. Ainsi le schéma D1Q3 est stable pour cette configuration de paramètres.

- On considère dans un deuxième temps le schéma de Boltzmann D2Q9 **linéaire** (1.84) (*i. e.* le cas de l'acoustique), pour le cas général voir [LL00]. Pour étudier la stabilité L^2 du schéma de Boltzmann sur réseau on utilise la méthode d'analyse de Von Neumann. On cherche les solutions de type onde plane $f_j = \phi_j e^{i(\omega t - k \cdot x)}$ au moyen de la transformée de Fourier du schéma. Celle-ci est donnée par la proposition 15 :

$$f(x_i, t + \Delta t) = G(p, q)f(x_i, t),$$

où $p = e^{ik_x \Delta x}$, $q = e^{ik_y \Delta x}$ et

$$G(p, q) = A(p, q)M^{-1}CM,$$

les matrices $A(p, q)$, M , M^{-1} et C sont données respectivement par (1.87), (1.45), (1.46) et (1.86).

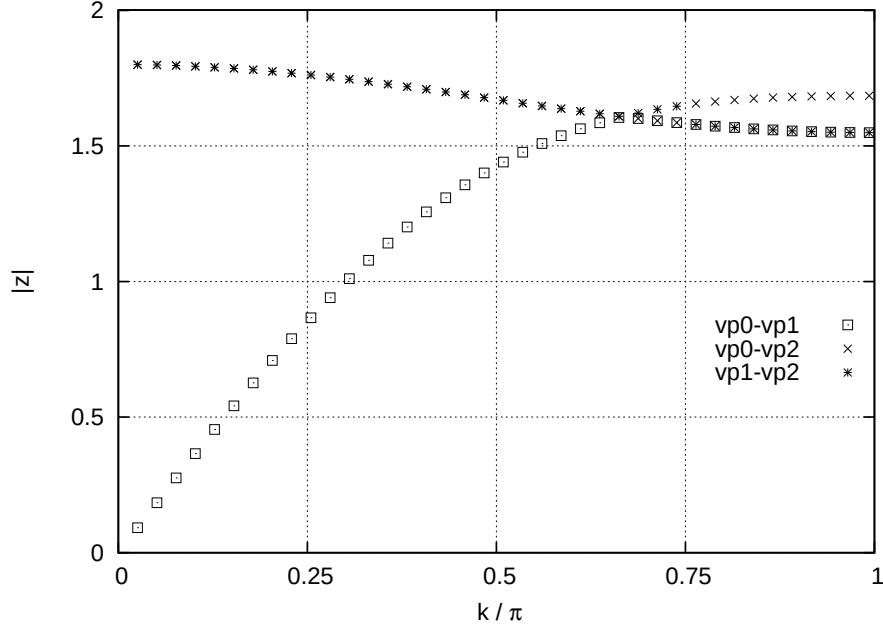


FIG. 1.6 – Module de la différence des valeurs propres du modèle D1Q3 en fonction de $|k|$. La valeur du paramètre : $\alpha = \frac{1}{3}$, le coefficient de relaxation : $s = 1.8$.

Pour étudier la stabilité du schéma de Boltzmann sur réseau il faut trouver les valeurs propres de la matrice $G(p, q)$. De manière générale, on ne peut pas résoudre analytiquement le problème aux valeurs propres, sauf pour quelques cas particuliers. Par contre on peut calculer facilement les valeurs propres numériquement. En effet pour un vecteur d'onde k donné (*i.e.* pour p et q fixés), on calcule les valeurs propres $z(k)$ qui sont les solutions :

$$Q(z) \equiv \det [G(p, q) - zId] = 0,$$

où Q est un polynôme de degré 9 en z . On fait alors varier le vecteur d'onde k et on étudie le comportement des valeurs propres $z_\alpha(k)$.

- Pour le cas particulier où le vecteur d'onde k est nul, (*i.e.* $k = (0, 0)$), on peut calculer facilement les valeurs propres de la matrice $G(1, 1)$. En effet on a l'expression suivante du polynôme caractéristique $Q(z)$:

$$Q(z) = [z - 1]^3 [z - (1 - s_3)] [z - (1 - s_4)] [z - (1 - s_5)]^2 [z - (1 - s_8)]^2.$$

On a alors les valeurs propres suivantes :

- $z_{0,1,2} = 1$ de multiplicité trois qui correspondent aux trois modes hydrodynamiques (conservés) : un mode transverse et deux modes longitudinaux (sonores).
- $z_3 = (1 - s_3)$, $z_4 = (1 - s_4)$, $z_{5,6} = (1 - s_5)$ de multiplicité deux (car $s_6 = s_5$) et $z_{7,8} = (1 - s_8)$ de multiplicité deux (car $s_7 = s_8$) qui correspondent aux modes rapides (non conservés).
- Pour les cas particuliers où le vecteur d'onde $k = (\pm\pi, 0)$ et $k = (0, \pm\pi)$ on a un mode parasite de damier. En effet les matrices globale $G(-1, 1)$ et $G(1, -1)$

ont -1 comme valeur propre car leur polynôme caractéristique $Q(z)$ dans le cas particulier où $s_5 = s_6$ et $s_7 = s_8$ s'écrit :

$$Q(z) = [z + 1][z + (1 - s_5)][z + (1 - s_8)][z^2 - \frac{s_5}{3}z - (s_5 - 1)]P(z),$$

où $P(z)$ est polynôme en z de degré 4. A cette valeur propre -1 correspond alors un mode de damier Φ_d qui sera conservé par la composée de deux étapes de Boltzmann (*i. e.* $\Phi_d = G^2\Phi_d$).

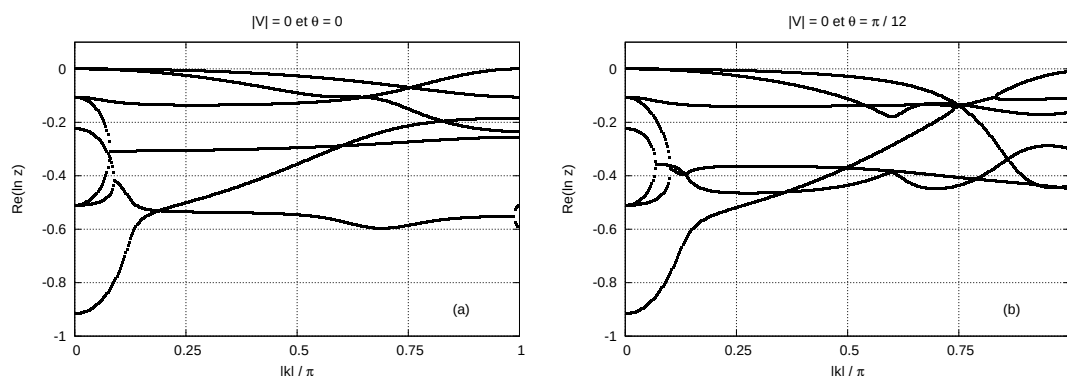


FIG. 1.7 – Partie réelle du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 linéaire en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\alpha_3 = -2$, $\alpha_4 = 1$, et $c_1 = c_2 = -1$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 1.4$, $s_4 = 1.8$, $s_5 = s_6 = 1.6$ et $s_7 = s_8 = 1.9$. (a) Pour $\theta = 0$ argument du vecteur d'onde k (*i. e.* k parallèle à l'axe Ox). (b) Pour $\theta = \frac{\pi}{12}$.

- On fait varier le module du vecteur d'onde k entre 0 et π et son argument entre 0 et π , et on calcule numériquement les valeurs propres de la matrice $G(p, q)$, (*i. e.* racines z_α du polynôme Q), pour un jeu de paramètres ($s_k, \alpha_3, \alpha_4, c_1, c_2$) donné. L'algorithme est alors stable (proposition 18) pour cette configuration si la partie réelle de $\ln(z_\alpha)$ est négatif pour tout α et tout k (*i. e.* $\text{Re}(\ln z_\alpha) < 0$). Pour calculer les valeurs propres de la matrice $G(p, q)$, on a utilisé les bibliothèques numériques standard d'algèbre linéaire comme LAPACK*. Les figures 1.7 (a, b) et 1.8 (a, b) montrent que le schéma est stable pour une configuration des paramètres. En effet les valeurs propres ont un module strictement inférieur à 1 et la matrice $G(p, q)$ est diagonalisable car elle a 9 valeurs propres différentes (dans le cas où deux valeurs propres ont le même module ils ont deux parties complexes différentes, voir figure 1.11 (a)).

La figure 1.7 (a), est le cas particulier où on prend k parallèle à l'axe des x (*i. e.* l'argument θ du vecteur d'onde est nul). Elle montre qu'on a 9 modes dont trois (il y en a deux confondus) modes hydrodynamiques sont proches de 0 pour k petit. Les cinq autres modes valent $\ln(1 - s_i)$ pour $k = 0$, ce sont les modes rapides.

*<http://www.netlib.org/lapack/>

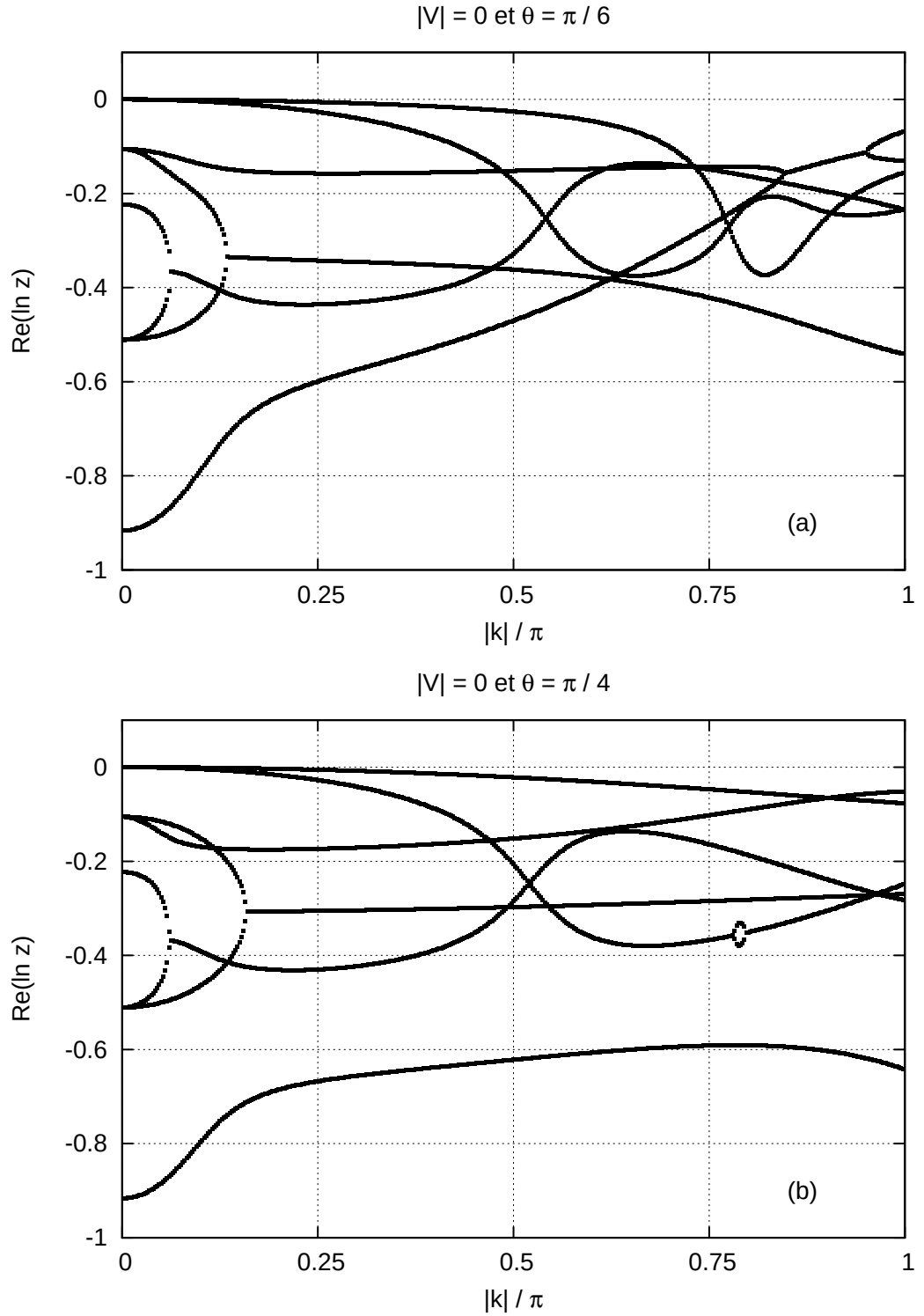


FIG. 1.8 – Partie réelle du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 linéaire en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\alpha_3 = -2$, $\alpha_4 = 1$, et $c_1 = c_2 = -1$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 1.4$, $s_4 = 1.8$, $s_5 = s_6 = 1.6$ et $s_7 = s_8 = 1.9$. (a) Pour $\theta = \frac{\pi}{6}$ argument du vecteur d'onde k . (b) Pour $|V| = 0$ et $\theta = \frac{\pi}{4}$.

Remarque 11 Pour le schéma de Boltzmann linéaire (acoustique), on peut approcher de petites viscosités de volume et de cisaillement, ce qui revient en terme de paramètres à faire tendre $\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2}$ et $\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}$ vers zéro. En effet la figure 1.9 montre que le schéma reste stable pour $s_2 = 1.99$ et $s_8 = 1.99$.

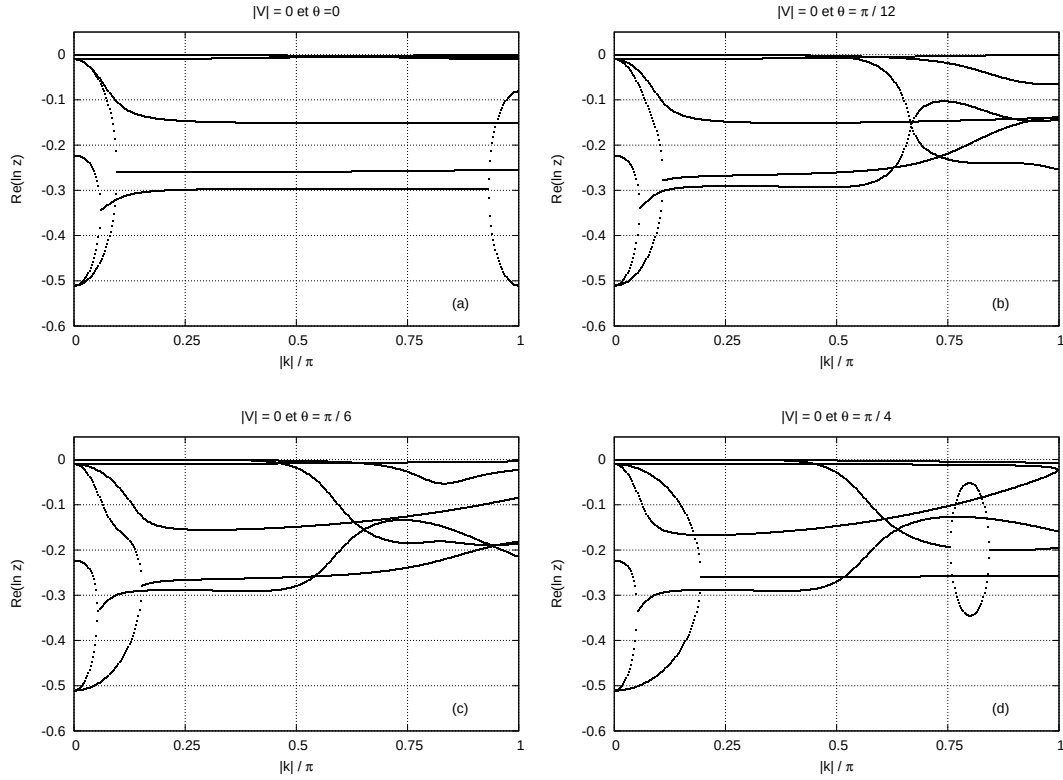


FIG. 1.9 – Partie réelle du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 linéaire en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\alpha_3 = -2$, $\alpha_4 = 1$, et $c_1 = c_2 = -1$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 1.99$, $s_4 = 1.8$, $s_5 = s_6 = 1.6$ et $s_7 = s_8 = 1.99$. (a) Pour $\theta = 0$ argument du vecteur d'onde k (i. e. k parallèle à l'axe Ox). (b) Pour $\theta = \frac{\pi}{12}$. (c) Pour $\theta = \frac{\pi}{6}$. (d) Pour $\theta = \frac{\pi}{4}$.

- Pour étudier la stabilité du schéma de Boltzmann **non linéaire**, il faut linéariser l'étape de collision (voir (1.93)) autour d'un écoulement de densité ρ et de vitesse $V = (V_x, V_y)$. Ainsi on va étudier la stabilité du schéma linéarisé dont la matrice globale $G(p, q)$ est donnée par la proposition 17. La figure 1.10 (a) montre que le schéma est stable pour V parallèle au vecteur d'onde k . On note ici que la stabilité du schéma dépend du module de la vitesse V . En effet pour $|V| = 0.2$, $s_2 = 1.6$ et $s_8 = 1.99$, le schéma n'est pas stable (voir figure 1.10 (b)). Par contre pour $|V| = 0.1$, $s_2 = 1.6$ et $s_8 = 1.9$ le schéma est stable. Donc dans le cas non linéaire on ne peut pas avoir des petites viscosités.

- Les figures 1.11 (a) et (b) montrent la partie complexe des valeurs propres (i. e. $\text{Im}(\text{Ln } z_\alpha)$) en fonction du module du vecteur d'onde k parallèle à l'axe des x (i. e. $k = (k_x, 0)$). La figure 1.11 (a) montre qu'on a 9 modes :

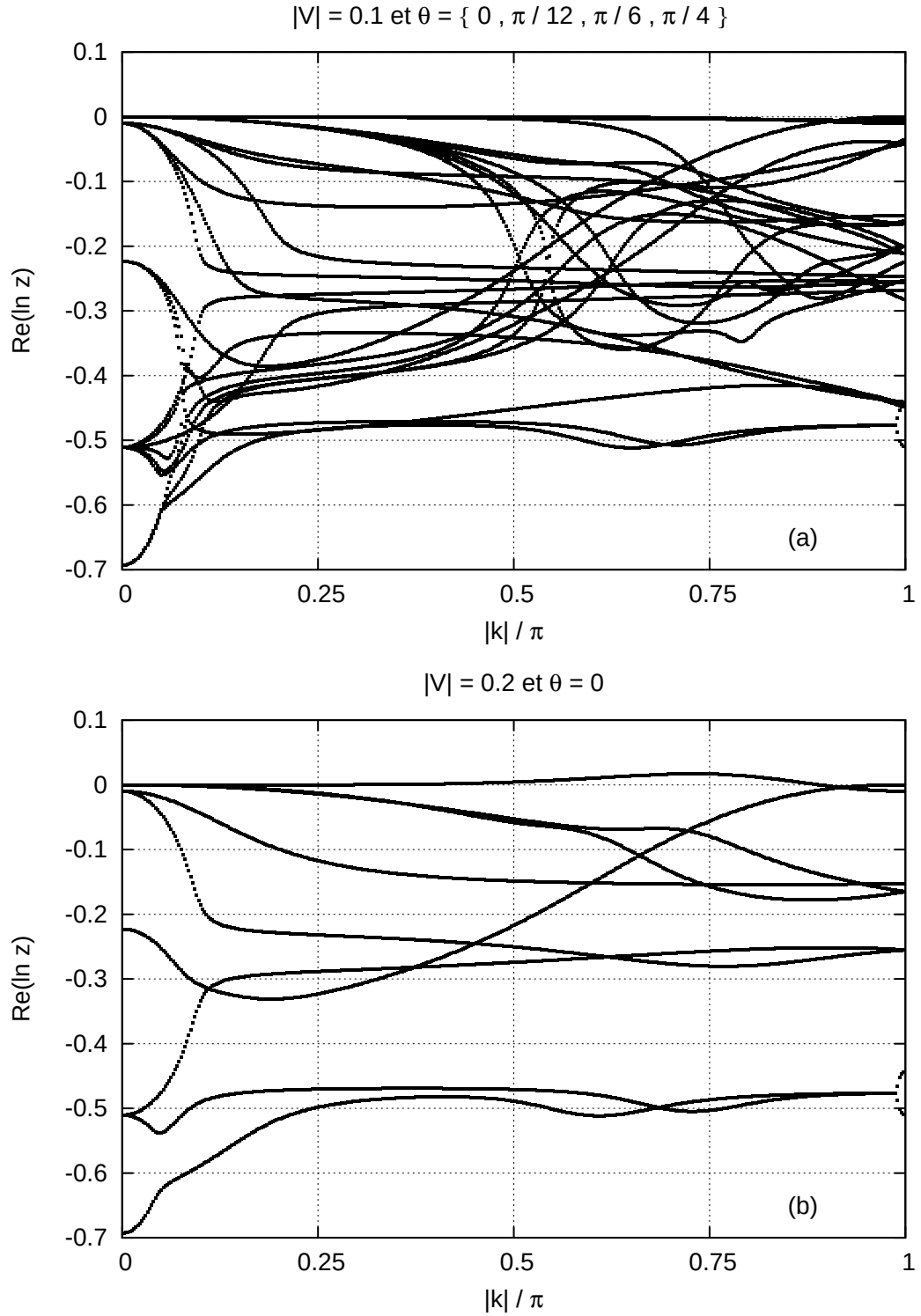


FIG. 1.10 – Partie réelle du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 linéarisé en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\alpha_3 = -2$, $\alpha_4 = 1$, et $c_1 = c_2 = -1$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 1.4$, $s_4 = 1.8$, $s_5 = s_6 = 1.6$ et $s_7 = s_8 = 1.99$. Pour plusieurs arguments du vecteur d'onde k avec V parallèle à k . (a) pour $|V| = 0.1$. (b) pour $|V| = 0.2$

- trois modes qui ont une partie complexe nulle pour $k = 0$, dont un qui a une partie complexe nulle pour tout $|k|$ c'est le mode transverse. Les deux autres modes ont une partie complexe qui varie en $\pm c_s |k|$, ce sont les deux modes longitudinaux acoustiques progressif et regressif.
- six modes rapides.

Dans la figure 1.11 (b) on applique une vitesse uniforme d'advection du fluide $V \neq 0$ dans la même direction que le vecteur d'onde k (*i. e.* parallèle à l'axe des x). Dans ce cas on a un caractère non-symétrique qui est dû à la vitesse V . Cela met en évidence le caractère galiléen [LL00] du schéma. On remarque que dans les deux cas avec $|V| = 0$ et $|V| = 0.2$ on a des difficultés pour k grand. En effet si on regarde, les deux modes longitudinaux ne sont pas parfaitement linéaires en k en particulier pour $|k|$ grand. Cela est dû à l'écart entre l'équation de dispersion discrète du schéma D2Q9 et l'équation de dispersion continue. On note qu'on retrouve ce phénomène dans les schémas numériques tels que les différences finies et les éléments finis.

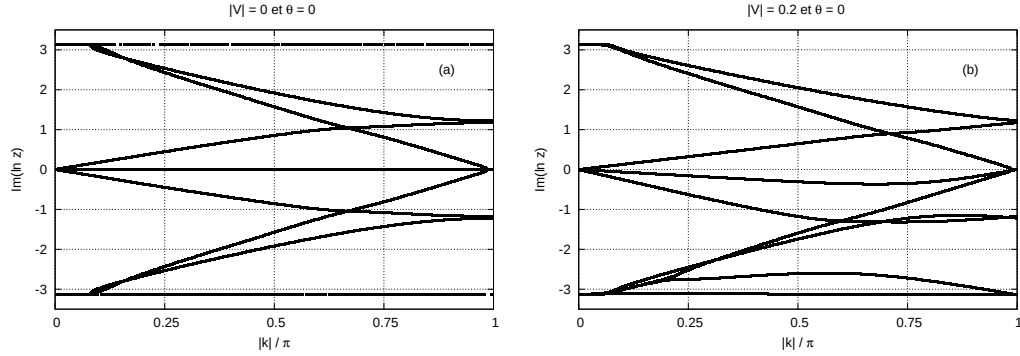


FIG. 1.11 – Partie complexe du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 linéaire en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\alpha_3 = -2$, $\alpha_4 = 1$, et $c_1 = c_2 = -1$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 1.4$, $s_4 = 1.8$, $s_5 = s_6 = 1.6$ et $s_7 = s_8 = 1.9$. (a) Pour $\theta = 0$ argument du vecteur d'onde k . (b) Pour $|V| = 0.2$ et $\theta = 0$.

On note aussi que dans le cas non linéaire on ne peut pas avoir des vitesses V grandes devant une fraction x de la vitesse du son c_0 où $0 < x < 1/2$. En effet, par exemple pour $c_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}$ et $|V| = \frac{c_0}{2}$ le schéma est toujours instable même pour des grandes viscosités. (voir figure 1.12). On ne peut utiliser le schéma D2Q9 que pour des vitesses inférieures à la vitesse du son (*i. e.* $|V| < \frac{c_0}{2}$).

- Pour améliorer la stabilité du schéma de Boltzmann sur réseau, Ansumali et Karlin [AK00] proposent des f_j^{eq} non polynomiaux et d'utiliser le théorème H pour décrire l'étape de collision.

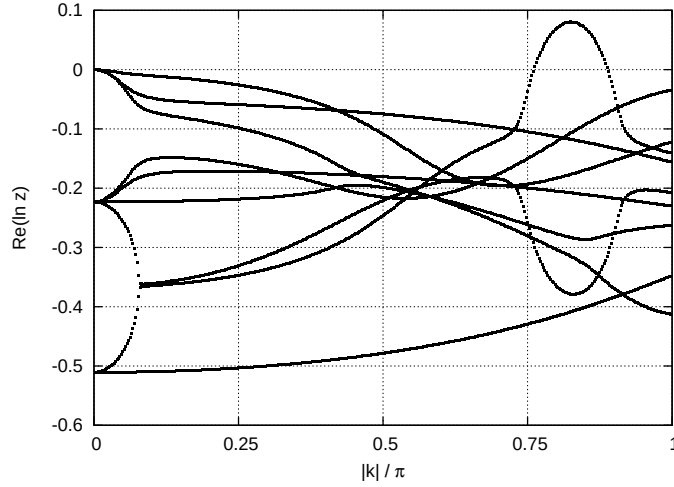


FIG. 1.12 – Partie réelle du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 linéarisé en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\alpha_3 = -2$, $\alpha_4 = 1$, et $c_1 = c_2 = -1$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 0.2$, $s_4 = 1.8$, $s_5 = s_6 = 1.6$ et $s_7 = s_8 = 0.2$. Pour $\theta = \frac{\pi}{4}$ argument du vecteur d'onde k avec V parallèle à k , pour $|V| = \frac{1}{2\sqrt{3}}$.

Conclusion

- La méthode de Boltzmann sur réseau est une méthode particulière qui simule la dynamique microscopique *via* l'équation de Boltzmann, dans le but d'approcher la dynamique macroscopique des fluides (au moins à l'ordre deux d'après l'équation équivalente).
- La méthode de Boltzmann sert à résoudre numériquement des problèmes complexes, et elle est naturellement conçue dans le but d'avoir l'algorithme le plus simple possible et le mieux adapté aux machines de calcul. C'est pour cela la méthode de Boltzmann sur réseau est une excellente méthode numérique de fluide qui est de plus en plus utilisée dans l'industrie.
- Notons que pour cette méthode on a que des résultats numériques de stabilité L^2 , et ne possède pas de propriété de positivité générale. De plus comme la stabilité est en défaut aux vitesses notables devant la vitesse du son, la modélisation est limitée aux basses vitesses.

6 Conditions aux limites

Soit $\mathcal{L}^0$ un maillage (un réseau) régulier d'un domaine borné Ω . On distingue alors deux types de nœuds :

- Les nœuds **intérieurs** du maillage : c'est l'ensemble des nœuds $x \in \mathcal{L}^0$ tels que : $y_j \equiv x + \Delta x e_j$ est un nœud du maillage pour $j = 0, 1, \dots, J$. On note alors $\mathcal{L}_I^0$ l'ensemble des nœuds intérieurs (ou fluides).
- Les nœuds du **bord** : c'est l'ensemble des nœuds qu'on note $x_b \in \mathcal{L}^0$ tels que : il existe $j \in (0, 1, \dots, J)$ pour lequel $y_j \equiv x_b + \Delta x e_j \notin \mathcal{L}^0$. On note $\mathcal{L}_B^0$ l'ensemble des

nœuds du bord. On a alors $\mathcal{L}_I^0 \cup \mathcal{L}_B^0 = \mathcal{L}^0$. Si à l'instant t , on a une configuration $f(x, t)$ pour tout $x \in \mathcal{L}^0$. On remarque que pour les nœuds du bord x_b l'étape d'advection (1.16) ne fournit pas tous les $f_j(x_b)$. En effet soit x_{b_0} un nœud du bord tel que $y_{j_0} = x_{b_0} + \Delta x e_{j_0} \notin \mathcal{L}^0$ (voir Fig. 1.13), alors après l'advection on ne dispose pas de $f_{-j_0}(x_b)$ la distribution associée à la vitesse discrète $-v_{j_0}$. Pour

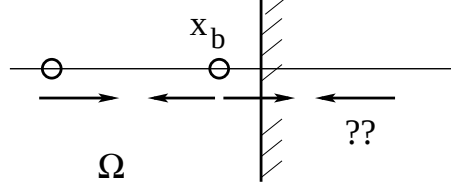


FIG. 1.13 – Nœud x_b du bord.

définir alors les distributions f associées à la vitesse $-v_{j_0}$, il faut tenir compte des conditions limites physiques imposées par le problème. On distingue alors deux types :

- La condition de type Dirichlet ou Neumann.
- Les conditions de type entrée et sortie du fluide.

Dans le cadre de notre travail on ne va considérer que le cas simple où les nœuds du bord x_b coïncident avec le bord physique du domaine $\partial\Omega$. Pour le cas général voir par exemple [BFL01, GdH03].

- Pour les conditions de type Dirichlet $u = 0$ on se sert du rebond souvent dit “bounce back” (voir Fig 1.14) et si on a une condition du type $u \cdot n = 0$ sur $\partial\Omega$ on utilise la réflexion spéculaire (voir Fig 1.15).

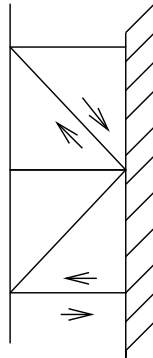
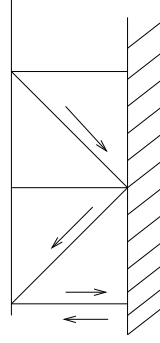


FIG. 1.14 – Condition de rebond pur ($v_{|\partial\Omega} = 0$).

On considère la configuration suivante : soit $x_b \in \mathcal{L}_B^0$ et on impose sur le bord $\partial\Omega$ la condition de Dirichlet $u = 0$. On va montrer que le rebond satisfait la condition de limite de Dirichlet. En effet définir une condition limite en Boltzmann sur réseau revient à définir la distribution f_3 qui va arriver au point x_b (voir figure 1.16). Soit $x_e = x_b + v_1 \Delta t$ le point du maillage à l'extérieur du domaine Ω . Au point x_b on a une densité ρ et une vitesse (j_x, j_y) . On suppose que ρ et j_x sont

FIG. 1.15 – Condition de réflexion spéculaire $v \cdot n_{\partial\Omega} = 0$.

constants entre x_b et x_e , alors en x_e on aura une densité ρ et une vitesse (j_x, j_y) . On écrit ensuite les distributions aux points x_b et x_e en utilisant la configuration donnée par les moments $(\rho, j_x, j_y, m_3^{eq}, m_4^{eq}, \dots, m_8^{eq})$ et la matrice M^{-1} (1.46)

$$\begin{aligned} f_1(x_b) &= \frac{1}{9}\rho + \frac{1}{3\lambda}j_x, \\ f_3(x_e) &= \frac{1}{9}\rho - \frac{1}{3\lambda}j_x. \end{aligned}$$

On prend alors la différence des deux équations :

$$f_1(x_b) - f_3(x_e) = \frac{2}{3\lambda}j_x.$$

Comme j_x vaut zéro entre x_b et x_e (c'est le j_x imposé par la condition de Dirichlet). On retrouve alors :

$$f_3(x_e) = f_1(x_b),$$

la condition de rebond pure. Ainsi on a bien défini le f_3 qui arrive en x_b .

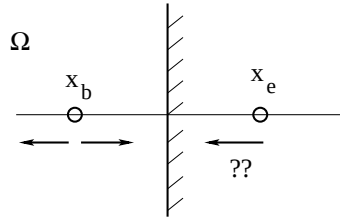


FIG. 1.16 – Condition limite de Dirichlet.

De la même manière on aura :

$$\begin{aligned} f_7(x_e) &= f_5(x_b), \\ f_6(x_e) &= f_8(x_b). \end{aligned}$$

On note qu'on peut traiter avec cette méthode les conditions de Dirichlet non homogènes. En effet on suppose qu'on a $u = u_0 = (u_x^0, u_y^0)$ sur $\partial\Omega$ et qu'on a la

même configuration que celle de la figure 1.16. On trouve alors les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{aligned} f_3(x_e) &= f_1(x_b) - \frac{2}{3\lambda} j_x^0, \\ f_6(x_e) &= f_8(x_b) - \frac{1}{6\lambda} j_x^0 + \frac{1}{6\lambda} j_y^0, \\ f_7(x_e) &= f_5(x_b) - \frac{1}{6\lambda} j_x^0 - \frac{1}{6\lambda} j_y^0, \end{aligned}$$

avec $j_x^0 = \rho u_x^0$ et $j_y^0 = \rho u_y^0$.

Remarque 12 Ces conditions aux limites sont d'ordre un, on peut les améliorer en utilisant des interpolations quadratiques et en tenant en compte des corrections Chapman-Enskog d'ordre 1 des moments non-conservés au lieu de les prendre en équilibre. Ainsi on refait la même méthode avec les moments suivants $(\rho, j_x, j_y, m_3^{eq} + \epsilon m_3^{(1)}, m_4^{eq} + \epsilon m_4^{(1)}, \dots, m_8^{eq} + \epsilon m_8^{(1)})$ [GdH03].

• De la même manière on peut imposer la pression sur le bord. Ainsi si on veut avoir $p = p_0$ en x_b , dans le cas de la configuration de la figure 1.16. On doit faire les conditions limites suivantes :

$$\begin{aligned} f_3(x_e) &= -f_1(x_b) + \frac{2}{9} \rho^0, \\ f_6(x_e) &= -f_8(x_b) + \frac{1}{18} \rho^0, \\ f_7(x_e) &= -f_5(x_b) + \frac{1}{18} \rho^0, \end{aligned}$$

où $\rho^0 = \frac{p^0}{c_0^2}$.

On remarque ici si on impose une pression nulle sur le bord (*i.e.* $p^0 = 0$), on retrouve les conditions “d’anti-rebond”.

• En utilisant les conditions limites de réflexion spéculaire (voir figure 1.15), on impose $u \cdot n = 0$ sur $\partial\Omega$. En effet si on écrit les distributions aux points x_b et x_e en utilisant la configuration donnée par les moments $(\rho, j_x, j_y, m_3^{eq}, m_4^{eq}, \dots, m_8^{eq})$ et la matrice M^{-1} (1.46), on a :

$$\begin{aligned} f_1(x_b) &= \frac{1}{9} \rho + \frac{1}{3\lambda} j_x, \\ f_3(x_e) &= \frac{1}{9} \rho - \frac{1}{3\lambda} j_x, \\ f_5(x_b) &= \frac{1}{36} \rho + \frac{1}{12\lambda} j_x + \frac{1}{12\lambda} j_y, \\ f_6(x_e) &= \frac{1}{36} \rho - \frac{1}{12\lambda} j_x + \frac{1}{12\lambda} j_y, \\ f_7(x_e) &= \frac{1}{36} \rho - \frac{1}{12\lambda} j_x - \frac{1}{12\lambda} j_y, \\ f_8(x_b) &= \frac{1}{36} \rho - \frac{1}{12\lambda} j_x + \frac{1}{12\lambda} j_y. \end{aligned}$$

La différence des ces équations deux par deux nous donne :

$$f_3(x_e) - f_1(x_b) = -\frac{2}{3\lambda}j_x, \quad (1.97)$$

$$f_6(x_e) - f_5(x_b) = -\frac{1}{6\lambda}j_x, \quad (1.98)$$

$$f_7(x_e) - f_8(x_b) = -\frac{1}{6\lambda}j_x. \quad (1.99)$$

Or la condition de $u.n = 0$ sur $\partial\Omega$ dans le cas de la configuration de la figure 1.16 se traduit par $j_x = 0$ dans les équations (1.97), (1.98) et (1.99). Ainsi on retrouve les condition de réflexion spéculaire :

$$\begin{aligned} f_3(x_e) &= f_1(x_b), \\ f_6(x_e) &= f_5(x_b), \\ f_7(x_e) &= f_8(x_b). \end{aligned}$$

• Pour les conditions d'entrée de fluide, on utilise la même technique que pour les conditions de Dirichlet. Soit $\partial\Omega$ une entrée d'un fluide de vitesse $u^0 = (u_x^0, u_y^0)$ (voir figure 1.17), on a alors les conditions suivantes à l'entrée :

$$\begin{aligned} f_1(x_e) &= f_3(x_b) - \frac{2}{3\lambda}j_x^0, \\ f_8(x_e) &= f_6(x_b) - \frac{1}{6\lambda}j_x^0 + \frac{1}{6\lambda}j_y^0, \\ f_5(x_e) &= f_7(x_b) - \frac{1}{6\lambda}j_x^0 - \frac{1}{6\lambda}j_y^0, \end{aligned}$$

avec $j_x^0 = \rho u_x^0$ et $j_y^0 = \rho u_y^0$.

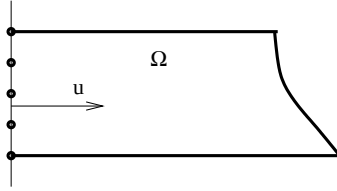


FIG. 1.17 – Entrée d'un fluide dans un tube avec une vitesse u

• Conditions limites périodiques : Ce type de conditions s'obtient en réinjectant les particules sortant par un côté de l'espace de simulation sur le côté opposé, (voir figure 1.18).

7 Exemple de l'écoulement de Poiseuille en D2Q9

L'écoulement de Poiseuille est un bon cas test simple, car on connaît la solution exacte ce qui nous permet de valider les résultats numériques. Il s'agit d'un écoulement plan entre deux parois parallèles à l'axe Ox , fixes de longueur infinie. On va utiliser le schéma de Boltzmann D2Q9 pour modéliser cet écoulement.

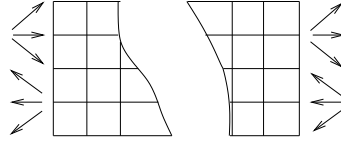
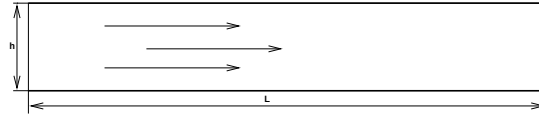


FIG. 1.18 – Conditions limites périodiques

Les équations

Si on note par $U(t, x, y) = (u, v)$ la vitesse du fluide et par P la pression et $\Omega = [0, l] \times [0, h]$ (voir figure 1.19), alors l'équation du problème :

FIG. 1.19 – Domaine $\Omega = [0, l] \times [0, h]$.

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \frac{\partial U}{\partial t} + U \cdot \nabla U - \nu \Delta U + \frac{1}{\rho} \nabla P & = & 0, \\ \nabla \cdot U & = & 0, \\ U(0, x, y) & = & U_0, \\ U(t, x, 0) = U(t, x, h) & = & 0. \end{array} \right. \quad (1.100)$$

Comme le mouvement du fluide est permanent à partir d'un certain moment (sauf pour des régimes turbulents non considérés ici) le problème de Navier-Stokes, devient un problème plus simple, celui de Stokes stationnaire :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} -\nu \Delta U + \frac{1}{\rho} \nabla P & = & 0, \\ \nabla \cdot U & = & 0. \end{array} \right.$$

Vu la géométrie du problème, et le caractère parallèle du mouvement, la solution du problème de Stokes est de la forme suivante :

$$\begin{aligned} u(x, y) = u(y) &= Ky(h - y), \\ v(x, y) &= 0, \\ P(x, y) = P(x) &= K'x + P_0, \end{aligned}$$

où $K = \frac{\partial P}{\partial x} \frac{1}{2\rho\nu}$, K' et P_0 des constantes.

On note que ce problème est équivalent à un écoulement plan entre deux parois fixes parallèles à l'axe Ox , où on applique des conditions périodiques à l'entrée et à la sortie du tube, ainsi qu'une force de volume dans la direction Ox . Ainsi on obtient un tube de longueur infinie. Le système (1.100) est équivalent à :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \frac{\partial U}{\partial t} + U \cdot \nabla U - \nu \Delta U + \frac{1}{\rho} \nabla P & = & f, \\ \nabla \cdot U & = & 0, \\ U(t, x, 0) = U(t, x, h) & = & 0, \end{array} \right. \quad (1.101)$$

où $f = (f_x, 0)$ est la force de volume, et la solution est donnée par :

$$u(y) = \frac{f_x}{2\nu} y(h - y). \quad (1.102)$$

Le schéma

On va utiliser le schéma D2Q9, décrit dans la proposition 10, où $m_3^{eq} = -2\rho + \frac{3}{\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2)$, $m_4^{eq} = \rho + \frac{3}{\lambda^2}(q_x^2 + q_y^2)$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = \frac{q_x^2 - q_y^2}{\lambda^2}$, $m_8^{eq} = \frac{q_x q_y}{\lambda^2}$ et $s_7 = s_8$. On fixe $s_8 = \left(\frac{1}{2} + \frac{3\nu}{\lambda^2 \Delta t}\right)^{-1}$, pour avoir une viscosité de cisaillement de l'équation équivalente, égale à ν du problème continu (1.101). Soit $\mathcal{L}^0 = \{x_{i,j} \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}, 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y\}$, un maillage carré de pas régulier $\Delta x = 1$ du domaine $\Omega = [0, l] \times [0, h]$. On fixe aussi le pas de temps $\Delta t = 1$. Alors l'algorithme se décrit en un pas de temps Δt de la manière suivante :

- A l'instant initial $t = t_0 = 0$ on se donne un état initial du fluide donné par les vecteurs $f(x_{i,j}, t_0) \in \mathbb{R}^9$ pour $0 \leq i \leq N_x$ et $0 \leq j \leq N_y$.
- On calcule les moments à l'aide de la matrice M (donnée par 1.45).
- On change l'impulsion j_x en lui rajoutant une demi fois la force de volume f_x :

$$j_x^* = j_x + \frac{f_x}{2},$$

où j_x^* est l'impulsion avant collision.

- On réalise l'étape de collision comme décrite dans l'espace des moments par (1.14). Ensuite on change le moment conservé j_x :

$$j_x^{**} = j_x^* + \frac{f_x}{2},$$

où f_x est la force de volume et j_x^{**} est l'impulsion après l'étape de collision.

- L'étape d'advection définie par (1.16) qui donnera, à partir de $f_\alpha^*(x_{i,j}, t_0)$, les vecteurs $f_\alpha(x_{k,l}, t_0 + 1)$ pour $0 \leq \alpha \leq 8$, tels que $x_{k,l} = x_{i,j} + v_\alpha$, à condition que $x_{k,l}$ soit bien un site du réseau (*i.e.* $x_{k,l} \in \mathcal{L}^0$). Pour les nœuds $x_{i,j} \in \mathcal{L}_B^0$ du bord, on doit définir les conditions limites : pour les $x_{i,1}$ et x_{i,N_y} où $1 \leq i \leq N_x$, on fait du "rebond" (voir figure 1.14) (bounce back). Car en $y = 0$ et en $y = h$ on a une condition de Dirichlet homogène (1.101). Pour les $x_{1,j}$ et $x_{N_x,j}$ où $1 \leq j \leq N_y$, on applique les conditions aux limites périodiques (voir figure 1.18).

On répète alors ces étapes jusqu'à convergence vers l'état stationnaire. On obtient ainsi les vecteurs $f(x_{i,j}, T = N_t \Delta t)$ où $1 \leq i \leq N_x$, $1 \leq j \leq N_y$ et T le temps de convergence, qui eux décrivent l'état du fluide et en particulier nous donnent la solution du problème 1.101.

Remarque 13 *Pour analyser le champ de vitesse et de pression il faut effectuer les mesures avant l'étape de collision. Le fait d'injecter la force de volume f_x en deux temps, avant et après collision, améliore la précision du schéma [LV01].*

Tests numériques

La solution approchée doit être un profil parabolique, qui correspond à un écoulement de Poiseuille dont la solution exacte est donnée par (1.102). Pour cela on va comparer la solution approchée à la solution exacte. La figure 2.2 nous montre la solution approchée et la solution exacte. On a utilisé un maillage de 5×15 nœuds (*i. e.* $N_x = 5$ et $N_y = 15$), la force de volume appliquée $f_x = 10^{-5}$, la viscosité de cisaillement $\nu = 0.0185$ (*i. e.* $s_7 = s_8 = 1.8$), pour les autres paramètres de relaxation on a pris $s_3 = 1.10$, $s_4 = 1.10$ et $s_5 = s_6 = 1.10$.

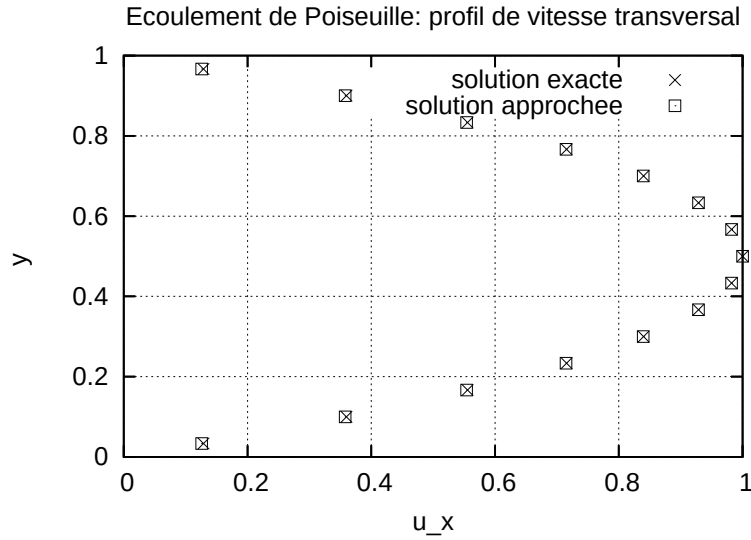


FIG. 1.20 – Solutions exacte et approchée après $N_t = 10000$ itérations.

Remarque 14 Sur la figure 2.2, on dessine la solution normalisée où on a fait une correction de $\frac{1}{2}$ suivant l'axe des Oy . En effet si x_b est un nœud du bord $y = 0$ ou $y = h$ la vitesse j_x ne sera pas nulle exactement en x_b . Ainsi la paroi ne coïncide pas avec x_b , mais elle est située entre le nœud x_b et le nœud voisin le plus proche. Ginzburg et Adler [GA94] ont étudié la position exacte de la paroi dans le cas d'un écoulement de Poiseuille et ils ont montré que cette position dépend de la valeur du paramètre de relaxation s_5 et de la viscosité ν .

Chapitre 2

Adjoint Lattice Boltzmann Equation for Parameter Identification*

Abstract

The Lattice Boltzmann Equation is briefly introduced using moments to clearly separate the propagation and collision steps in the dynamics. In order to identify unknown parameters we introduce a cost function and adapt control theory to the Lattice Boltzmann Equation to get expressions for the derivatives of the cost function *vs.* parameters. This leads to an equivalent of the adjoint method with the definition of an adjoint Lattice Boltzmann Equation.

To verify the general expressions for the derivatives, we consider two elementary situations : a linearized Poiseuille flow to show that the method can be used to optimize parameters, and a nonlinear situation in which a transverse shear wave is advected by a mean uniform flow. We indicate in the conclusion how the method can be used for more realistic situations.

1 Introduction

In many situations involving fluid flows, one uses a combination of experimental measurements and of numerical simulations in order to obtain a good knowledge of the flow. Experiments can provide accurate data for some observable quantities (e.g. pressure or local velocity) but may not provide other information. Numerical techniques may be used to compute the missing information but only upon detailed knowledge of parameters that may not be readily available (like the viscosity or the boundary conditions). In order to increase the use of a combination of high quality measurements and refined models, the notion of optimal model has been developed. The parameters of the numerical model are chosen by minimizing the value of a cost function that compares the predictions of the model to known experimental results.

*Article publié dans *Computers and Fluids*, volume 35, numéros 8-9, pages 805-813, octobre 2006 avec Mah'med Bouzidi, François Dubois et Pierre Lallemand.

This minimization can be simply obtained by a descent method. Therefore it requires the determination of the derivatives of the cost function with respect to the unknown parameters. A general method to compute those derivatives is provided by control theory and is used in many circumstances. Here we adapt this general method to the modeling of fluid flows by the Lattice Boltzmann Equation (LBE).

We shall briefly recall the framework of moments that allows a very clear distinction of the two steps of LBE : propagation and collision. Then we adapt the derivation of control theory to the case of a discrete model in order to get the Adjoint Lattice Boltzmann Model. We apply the adjoint model to two simple situations (a steady state and a time dependent case). In the first place we consider the linear LBE and apply it to Poiseuille flow in a 2-dimensional periodic channel with a uniform body-force. We then include the nonlinear terms in LBE and show how this modifies the adjoint equation. As a simple application, we consider a transverse shear wave advected by a uniform flow.

2 Direct model for Lattice Boltzmann Equation

The lattice Boltzmann equation is a numerical method based on kinetic theory to simulate various hydrodynamic systems. It uses elements of several origins : the classical Boltzmann equation, the Broadwell models [Br64, Ga75] with a small number of velocities and more recently the lattice gas automata [FHP86].

In contrast to the continuous Boltzmann equation that deals with distribution functions $\phi(t, r, \xi)$, the LBE method deals with a small number of functions that can be interpreted as populations of fictitious “particles”. The dynamics of these “particles” is such that time, space and momentum are discretized. They move at successive discrete times from nodes to nodes of a regular lattice $\mathcal{T} = \{\mathbf{r}_l, 1 \leq l \leq K\}$, composed by K nodes so that momentum space ξ is discretized into a small set of discrete velocities $\{\mathbf{e}_\alpha | \alpha = 0, 1, \dots, b\}$. The unknown is the distribution $f_\alpha = f_\alpha(\mathbf{r}_l, t)$ which is function of velocity $\mathbf{e}_\alpha$ at location $\mathbf{r}_l$ and at time t . The lattice Boltzmann equations are written as :

$$f_\alpha(\mathbf{r}_l + \mathbf{e}_\alpha, t + 1) = f_\alpha(\mathbf{r}_l, t) + \Omega_\alpha(f), \quad (2.1)$$

The term $\Omega_\alpha(f)$ models the collisions. Macroscopic quantities are obtained by taking velocity moments of f as follows :

$$\rho(\mathbf{r}_l, t) = \sum_{\alpha=0}^{\alpha=b} f_\alpha(\mathbf{r}_l, t), \quad (2.2)$$

$$\rho \mathbf{u}(\mathbf{r}_l, t) = \sum_{\alpha=0}^{\alpha=b} \mathbf{e}_\alpha f_\alpha(\mathbf{r}_l, t), \quad (2.3)$$

$$e(\mathbf{r}_l, t) = \sum_{\alpha=0}^{\alpha=b} \mathbf{e}_\alpha^2 f_\alpha(\mathbf{r}_l, t), \quad (2.4)$$

where ρ is the density (mass), $\mathbf{u}$ is the velocity and e is the energy. They will be used later.

From here, for the sake of simplicity we consider the particular two-dimensional LBE model : the nine velocity model without thermal effects [LL00]. In this model, $K = N_x N_y$ and $\mathcal{T} = \{\mathbf{r}_l \equiv \mathbf{x}_{i,j} ; i = 1, 2, \dots, N_x ; j = 1, 2, \dots, N_y\}$ is a square lattice, and there are nine discrete velocities (*i.e.*, $b = 8$) described on figure (2.5) and algebraically given by :

$$\mathbf{e}_\alpha = \begin{cases} (0, 0), & \alpha = 0, \\ (\cos((\alpha - 1)\frac{\pi}{2}), \sin((\alpha - 1)\frac{\pi}{2})), & \alpha = 1, \dots, 4, \\ (\cos((2\alpha - 9)\frac{\pi}{4}), \sin((2\alpha - 9)\frac{\pi}{4})), & \alpha = 5, \dots, 8. \end{cases} \quad (2.5)$$

The equation (2.1) describes the evolution of the particle in a one time increment. So in each increment there are two fundamental steps : advection and collision. Now we will describe these two steps.

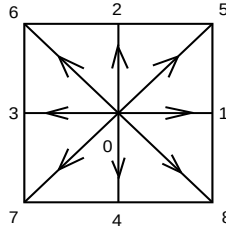


FIG. 2.1 – The velocities for the 9-bit lattice LBE model on a square lattice

Advection step

In this step the “particles” move from a lattice node $\mathbf{x}_{i,j}$ to either itself (with the velocity $\mathbf{e}_0 = 0$), one of the four nearest neighbors (with the velocity $\mathbf{e}_\alpha$, $\alpha = 1, \dots, 4$), or one of the four next-nearest neighbors (with the velocity $\mathbf{e}_\alpha$, $\alpha = 5, \dots, 8$). This step is exact and global in space, since it is the solution to the transport equation given by :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = 0.$$

We will represent this step by the operator $\mathcal{A}$ defined by :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} : \quad \mathcal{V}_f &\rightarrow \mathcal{V}_f \\ \mathcal{F} &\mapsto \mathcal{A}(\mathcal{F}), \end{aligned} \quad (2.6)$$

where $\mathcal{V}_f \equiv \mathbb{R}^{9 \times K}$ and $\mathcal{F} = (f_\alpha(\mathbf{x}_{i,j}, t))_{(0 \leq \alpha \leq 8, 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y)}^T$ is a vector in $\mathcal{V}_f$. Boundary conditions are taken into account through modification of the operator $\mathcal{A}$. Here we shall take either periodic boundary conditions on the outer edges of the fluid domain or the simple “bounce-back” conditions on fluid-solid boundaries.

Collision step

This step consists in the redistribution of the distribution $\{f_\alpha\}$ at each node $\mathbf{x}_{i,j}$, and it is modeled by the operator $\Omega_\alpha(f)$ in (2.1). The lattice Boltzmann equation (2.1) can be rewritten in vector form :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_{i,j} + \mathbf{e}_\alpha, t + 1) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_{i,j}, t) + \mathbf{\Omega}(\mathbf{f}), \quad (2.7)$$

where $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_8)^T$ and $\mathbf{\Omega}(\mathbf{f}) = (\Omega_0(\mathbf{f}), \Omega_1(\mathbf{f}), \dots, \Omega_8(\mathbf{f}))^T$. We remark that $\mathcal{F} = (\mathbf{f}(\mathbf{x}_{i,j}, t))_{(1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y)}^T \in \mathcal{V}_f$.

Remark 2.1 *If we take the discrete velocities, $\{\mathbf{e}_\alpha | \alpha = 0, 1, \dots, 8\}$, with corresponding distribution functions, $\{f_\alpha | \alpha = 0, 1, \dots, 8\}$, then we can construct a vector space $\mathbb{V} = \mathbb{R}^9$ based upon the discrete velocity set. So $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \dots, f_8)^T$ is a vector in $\mathbb{V}$. The collision operator acts locally in space $\mathbb{V}$. It will be expressed with the help of the moments.*

To describe this operator for each lattice node, we can construct [dH92] a 9-dimensional vector space $\mathbb{M} = \mathbb{R}^9$ based upon the different moments of $\{f_\alpha\}$. Such that

$$\begin{aligned} \mathcal{M} : \quad \mathbb{V} &\rightarrow \mathbb{M} \\ \mathbf{f} &\mapsto \mathcal{M}(\mathbf{f}) = \mathbf{M} \cdot \mathbf{f} = \mathbf{m}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

where the orthogonal matrix $\mathbf{M}$ is explicitly given by :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

and $\mathbf{m} = (\rho, j_x, j_y, e, \epsilon, q_x, q_y, p_{xx}, p_{xy})^T$, where the physical interpretation of the 9 moments are respectively : density, x-momentum, y-momentum, energy, energy square, x-heat flux, y-heat flux, diagonal stress and off-diagonal stress. Thus, with the help of the linear transformation $\mathcal{M}$, we can describe the collision operator in moment space $\mathbb{M}$.

In the athermal model the only conserved quantities are density ρ and linear momentum $\mathbf{j} = (j_x, j_y)$. For the other quantities (non-conserved moments) [HCB54], we assume that they relax towards equilibrium values that are nonlinear functions of the conserved quantities. Due to symmetry arguments, the relaxation equations are given by :

$$e^* = e - s_2 [e - (\alpha_2 \rho + \gamma_2 (j_x^2 + j_y^2))], \quad (2.10)$$

$$\epsilon^* = \epsilon - s_3 [\epsilon - (\alpha_3 \rho + \gamma_4 (j_x^2 + j_y^2))], \quad (2.11)$$

$$q_x^* = q_x - s_5 [q_x - (c_1 j_x)], \quad (2.12)$$

$$q_y^* = q_y - s_5 [q_y - (c_1 j_y)], \quad (2.13)$$

$$p_{xx}^* = p_{xx} - s_8 [p_{xx} - (\gamma_1 (j_x^2 - j_y^2))], \quad (2.14)$$

$$p_{xy}^* = p_{xy} - s_8 [p_{xy} - (\gamma_3 j_x j_y)], \quad (2.15)$$

where the quantities with and without superscript $*$ are post-collision and pre-collision values, respectively.

Remark 2.2 *The relaxation parameters s_i , $i = 2, 3, 8$ are directly linked to the transport coefficients. For the seven other adjustable parameters α_2 , α_3 , c_1 , γ_1 , γ_2 , γ_3 , γ_4 , we will fix them as follows :*

$$\gamma_1 = \gamma_3 = 1, \quad \gamma_2 = 3, \quad c_1 = -1, \quad \alpha_2 = -2, \quad \alpha_3 = 1 \text{ and } \gamma_4 = -3. \quad (2.16)$$

This choice of the parameters $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, c_1$ yields Galilean invariance and isotropy. The parameter α_2 is linked to the speed of sound. Two other parameters α_3 and γ_4 are fixed to improve stability. See [LL00] for the complete derivation of these properties. The relaxation rates s_3 and s_5 play no role in the hydrodynamic behaviour of the model, however they are relevant for stability [LL00] and for the accuracy of the boundary conditions [GA94, GdH96].

Now we can contract the collision operator in moment space, with the help of (10) to (2.15), as follows :

$$\begin{aligned} \mathbf{C} : \quad \mathbb{M} &\rightarrow \mathbb{M} \\ \mathbf{m} &\mapsto \mathbf{m}^* = \mathbf{C}(\mathbf{m}). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Thus, we have the collision operator in $\mathbb{V}$, for an initial distribution $\mathbf{f}$, given by :

$$\tilde{\Omega}(\mathbf{f}) = \mathbf{f} + \Omega(\mathbf{f}) = M^{-1} \cdot \mathbf{C}(M \cdot \mathbf{f}).$$

So, now we define the global collision operator $\mathcal{C}$ like the advection operator by :

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : \quad \mathcal{V}_f &\rightarrow \mathcal{V}_f \\ \mathcal{F} &\mapsto \mathcal{C}(\mathcal{F}), \end{aligned} \quad (2.18)$$

where $\mathcal{C}(\mathcal{F}) = \left(\tilde{\Omega}(\mathbf{f})(\mathbf{x}_{1,1}, t), \tilde{\Omega}(\mathbf{f})(\mathbf{x}_{1,2}, t), \dots, \tilde{\Omega}(\mathbf{f})(\mathbf{x}_{i,j}, t), \dots, \tilde{\Omega}(\mathbf{f})(\mathbf{x}_{N_x, N_y}, t) \right)^T$.

Direct model

The net result of the advection and the collision steps is that if $\mathcal{F}_{ini}$ is the initial state of the system, it evolves according to

$$\begin{cases} \mathcal{F}^0 &= \mathcal{F}_{ini}, \\ \mathcal{F}^{k+1} &= \mathcal{A} \circ \mathcal{C}(\mathcal{F}^k) \equiv \Phi(\mathcal{F}^k), \quad k \in 0, 1, \dots, N-1. \end{cases} \quad (2.19)$$

where $\mathcal{F}^k$ is the discrete state for particle distribution in space at time k . So $\mathcal{F}^k = (f_\alpha(\mathbf{x}_{i,j}, k))_{(0 \leq \alpha \leq 8, 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y)}^T$. We shall call equation (2.19) the *direct model* which has been shown [CD98] to behave like the solutions of those of the Navier-Stokes equations in situations where the flow evolves sufficiently slowly in space and time.

3 Adjoint method for identifying parameters

In this section we are interested in identifying some parameters of the lattice Boltzmann scheme, for instance the relaxation parameters s_5 and s_8 by comparing the predictions of the direct model to those derived from some other technique (analytic or numerical solution to the Navier-Stokes equations or from experiments). So, we will use inverse modeling to estimate these parameters. This will be done using the adjoint method, which is directly derived from the optimal control theory [Li68].

General discrete theory for adjoint method

To introduce the method, let's consider a steady state laminar Poiseuille flow, with kinematic velocity ν , between two plates parallel to Ox , separated by height h , with periodic boundary condition along the flow and a uniform body force (δp) to drive the flow. We know an analytic solution at discrete time k

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}_{i,j}, k) = (u(\mathbf{x}_{i,j}, k), v(\mathbf{x}_{i,j}, k)) = \left(\frac{h\delta p}{2\nu} y_j \left(1 - \frac{y_j}{h}\right), 0 \right), \quad (2.20)$$

$$\text{where } \mathbf{x}_{i,j} = (x_i, y_j) \text{ for } 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y.$$

We consider the state of the LBE solution for a long enough time so that it has reached steady state computed for the same geometry as the analytic case but with unknown relaxation coefficient $\lambda = (s_5, s_8)$. We note that we neglect any space dependence of the density ρ . So that we will identify from here velocity with momentum $\rho \mathbf{u}$ evaluated by (3). Since we take $\rho \equiv 1$.

We wish to estimate an optimal λ in the sense that it will correspond to the minimum of a cost function. We define the cost-function $J(\lambda)$ in a “natural” way : it is the mean-square difference between the velocity $\tilde{\mathbf{u}}_k(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, k)$,

$$\tilde{\mathbf{u}}(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, k) = (\tilde{u}(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, k), \tilde{v}(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, k)), \quad (2.21)$$

at discrete time $k\delta t$, calculated by LBE (2.21) and the exact velocity u which is the analytic solution (2.20). The notation $\tilde{\mathbf{u}}(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, k)$ corresponds to the fact that the discrete LBE solution $\tilde{\mathbf{u}}$ depends also on some parameters λ of the model.

We consider the following cost-function $J(\lambda)$, where the first term (with coefficient a) deals with a vision of the error at the final time and the second term (with coefficient b) is a discrete time integration of the error.

$$\left\{ \begin{aligned} J(\lambda) = & \frac{a}{2} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} |\tilde{u}(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, N) - u(\mathbf{x}_{i,j}, N)|^2 + \\ & \frac{b}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} |\tilde{u}(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, k) - u(\mathbf{x}_{i,j}, k)|^2. \end{aligned} \right. \quad (2.22)$$

$k = k\delta t$ ($\delta t = 1$) is the observation time, $N = N\delta t$ is the time when the steady state is reached, $\lambda = (s_5, s_8) \in \mathbb{R}^2$, and a, b are two real adjustable constants.

In the cost-function (2.22), the term associated with a is used when we simulate a steady state problem. So for the first case of the Poiseuille flow, it is obvious that the exact solution (2.20) is stationary (*i.e.*, $u(\mathbf{x}_{i,j}, k) = u(\mathbf{x}_{i,j})$). We will take $a = 1$, $b = 0$ for the cost function. The term with b is used for the unsteady simulation (*e.g.* see nonlinear case). The discrete time $N = N\delta t$ ($\delta t = 1$) is the final time where we evaluate the solution. So in this case we will take $a = 0$, $b = 1$.

Now the assimilation process consists in minimizing the cost-function J . We decide to use a gradient method :

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n + \tilde{\omega} \nabla_{\lambda} J^n(\lambda), \quad \tilde{\omega} > 0.$$

So we need to estimate the gradient of the cost-function $\nabla_{\lambda} J(\lambda)$. The adjoint method is used to evaluate the gradient of the cost-function $\nabla_{\lambda} J$.

First, we rewrite the cost-function :

$$J(\lambda) = \frac{a}{2} \Psi(\mathcal{F}^N, N, \lambda) + \frac{b}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \Psi(\mathcal{F}^k, k, \lambda), \quad (2.23)$$

where $\mathcal{F}^k \in \mathcal{V}_f$ is the solution to LBE and

$$\Psi(\mathcal{F}^k, k, \lambda) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} |\tilde{u}(\lambda, \mathbf{x}_{i,j}, k) - u(\mathbf{x}_{i,j}, k)|^2,$$

is the global error at time step k measured with least squares.

Proposition 19 *With the cost-function given by the relation (2.22) the gradient $\nabla_{\lambda} J$ can be evaluated as follows :*

$$\nabla_{\lambda} J = - \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda}, \quad (2.24)$$

where $\mathcal{P}^k$ are a set of dual parameters, which are naturally line vectors. The parameters $(\mathcal{P}^k)^T$ belong to the space $\mathcal{V}_f$ introduced in paragraph 2 (Advection step) and are determined by the following backward lattice Boltzmann equation called Adjoint Lattice Boltzmann Equation (ALBE) :

$$\begin{cases} \mathcal{P}^N &= -\frac{a}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{F}}, \\ \mathcal{P}^k &= \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} - \frac{b}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{F}} \quad \text{for} \quad k = N-1, N-2, \dots, 1. \end{cases} \quad (2.25)$$

Remark 3.1 *The $\mathcal{P}^k$ for $k = N-1, N-2, \dots, 1$ describe an inverse dynamics. So $\mathcal{P}^k$ is a vector defined by $(p_{\alpha}(\mathbf{x}_{i,j}, k))_{(0 \leq \alpha \leq 8, 1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y)}$ where $p_{\alpha}(\mathbf{x}_{i,j}, k)$ is the “dual distribution” function of velocity $\mathbf{e}_{\alpha}$ at location $\mathbf{x}_{i,j}$ and at discrete time k .*

Proof: As $\mathcal{F}^k$ is the solution to the direct state (2.19), we can see this dynamics as a constraint :

$$\begin{cases} \mathcal{F}^0 &= 0, \\ \mathcal{F}^{k+1} - \Phi(\mathcal{F}^k) &= 0, \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \end{cases} \quad (2.26)$$

And now we can consider the constrained minimization problem of finding the minimum of J given by (2.23) under the constraint (2.26).

A classical way to do this is to give a Lagrangian formulation of this problem. So we define a Lagrangian as follows :

$$\mathcal{L} = J + \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \cdot (\mathcal{F}^{k+1} - \Phi(\mathcal{F}^k)), \quad (2.27)$$

where the dot $\cdot$ denotes the scalar product in $\mathcal{V}_f$, and $\mathcal{P}^k \in \mathcal{V}_f$ is a Lagrange multiplier related to the constraint (2.26).

The differentiation of $\mathcal{L}$, reads :

$$d\mathcal{L} = dJ + \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \left(d\mathcal{F}^{k+1} - \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^k - \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} d\lambda \right). \quad (2.28)$$

We note here that the cost-function J doesn't depend directly on λ , so we have :

$$dJ = \frac{a}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^N + \frac{b}{2} \sum_{k=0}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^k. \quad (2.29)$$

With a discrete part integration we deduce that :

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \left(d\mathcal{F}^{k+1} - \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^k \right) = \\ \mathcal{P}^N d\mathcal{F}^N - \mathcal{P}^1 \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^0 + \sum_{k=1}^{N-1} \left(\mathcal{P}^k - \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} \right) d\mathcal{F}^k. \end{cases} \quad (2.30)$$

Now using (2.28), (2.29) and (2.30), we find :

$$\begin{cases} d\mathcal{L} = \frac{a}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^N + \frac{b}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial \Psi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^k + \mathcal{P}^N d\mathcal{F}^N - \mathcal{P}^1 \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} d\mathcal{F}^0 \\ + \sum_{k=1}^{N-1} \left(\mathcal{P}^k - \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} \right) d\mathcal{F}^k - \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} d\lambda. \end{cases} \quad (2.31)$$

Since we don't change the initial condition of the direct model (2.19), we choose

$$d\mathcal{F}^0 = 0.$$

Due to (2.27), we notice that $d\mathcal{L} \equiv dJ = \nabla_{\lambda} J \cdot d\lambda$ when constraint (2.26) holds. When we choose the adjoint dynamics, *i.e.*, $\mathcal{P}^k$ be equal to the solution to the backward LB equation (2.25), we cancel all the terms in factor of $d\mathcal{F}^k$ in the expression (2.31) of $d\mathcal{L}$, so that the expression (2.24) of $\nabla_{\lambda} J$ is established. $\square$

We proceed now to compute the adjoint state and the gradient of J .

Adjoint Lattice Boltzmann Equation for linear case

Now, we describe the adjoint model (2.25), which allows us to compute all the $\mathcal{P}^k$. In a first case we consider the steady state laminar Poiseuille flow which is introduced in paragraph 3. This case is a natural way to test this method, since laminar Poiseuille flow is also a solution to the Stokes problem which is linear. So the coefficients $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma_4 = 0$ and the direct algorithm (2.19) is simpler (*i.e.*, the operator Φ is linear). Since we have a steady problem we choose $a = 1$ and $b = 0$. So we have an adjoint dynamics $\mathcal{P}^k = \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}}$, with initial condition depending on error, where $\frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}}$ is a linear operator defined by :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}} : \quad \mathcal{V}_f^* & \rightarrow \mathcal{V}_f^* \\ \mathcal{P} & \mapsto \mathcal{PAC} = (\mathcal{C}^T \mathcal{A}^T \mathcal{P}^T)^T. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Where $\mathcal{V}_f^*$ is the dual space of linear space $\mathcal{V}_f$. This operator (since the operator $\Phi = \mathcal{AC}$ is linear in the direct model) is composed of two fundamental steps :

- Transposed advection $\mathcal{A}^T$: which models the transport with “backward” discrete velocity.
- Transposed collision $\mathcal{C}^T$: as in the direct model, this operator is local in space.

So we also need to introduce the following nine “dual moments” of $\mathbf{p}(\mathbf{x}_{i,j}, k) = (p_\alpha(\mathbf{x}_{i,j}, k))_{0 \leq \alpha \leq 8}$ with the help of the matrix $\mathbf{M}$ (2.9) :

$$\mathbf{m} = (m_0, m_1, \dots, m_8) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{M}^{-1}.$$

Since there are three conserved moments in the direct model, there are also three conserved quantities in the adjoint model given by :

$$\begin{aligned} m_0 + 2m_3 - m_4 & \text{ scalar invariant like “mass” } \rho \\ \begin{pmatrix} m_1 + m_5 \\ m_2 + m_6 \end{pmatrix} & \text{ vector invariant like velocity} \end{aligned}$$

The matrix of transposed collision $\mathbf{C}$ in the space of moments satisfies :

$$\mathbf{C}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -2s_2 & s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -s_5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -s_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - s_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 \end{pmatrix}$$

The collision is defined by : $\mathcal{P} \cdot \mathcal{C} = \mathcal{P}^*$

where $\mathcal{P} = (\mathbf{p}(\mathbf{x}_{i,j}, k))_{(1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y)} \in \mathcal{V}_f^*$, $\mathcal{P}^* = (\mathbf{p}^*(\mathbf{x}_{i,j}, k))_{(1 \leq i \leq N_x, 1 \leq j \leq N_y)} \in \mathcal{V}_f^*$, where $\mathbf{p}^*(\mathbf{x}_{i,j}, k) = \mathbf{p}(\mathbf{x}_{i,j}, k) \cdot \mathbf{M}^{-1} \cdot \mathbf{C} \cdot \mathbf{M} = ((\mathbf{M})^T \cdot \mathbf{C}^T \cdot (\mathbf{M}^{-1})^T \cdot (\mathbf{p}(\mathbf{x}_{i,j}, k))^T)^T$.

ALBE algorithm for the nonlinear case

When we model the Navier-Stokes equation, the direct algorithm (2.19) is nonlinear. So $\gamma_i \neq 0, i = 1, 2, 3, 4$, and the collision step is nonlinear. In this case the adjoint algorithm (2.25) is still linear since $\mathcal{P}^k = \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}}$, where $\frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}}$ is a linear operator. As in the linear case $\frac{\partial \Phi}{\partial \mathcal{F}}$ is defined by (2.32) and it is composed of two steps : transposed advection $\mathcal{A}^T$ and transposed collision $\mathcal{C}^T$. Only the transposed collision $\mathcal{C}^T$ is different from the linear case. To describe this step let us use the superscript d for quantities related to the direct problem and among them $V^d(\mathbf{x}_{i,j}, t)$ the velocity field. So the transposed matrix collision $\mathcal{C}^T$ is expressed as follows :

$$\mathcal{C}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -2s_2 & s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2\gamma_1 s_2 V_x^d & 2\gamma_3 s_3 V_x^d & -s_5 & 0 & \gamma_3 s_8 V_y^d & 2\gamma_1 s_8 V_x^d \\ 0 & 0 & 1 & 2\gamma_1 s_2 V_y^d & 2\gamma_3 s_3 V_y^d & 0 & -s_5 & \gamma_3 s_8 V_x^d & -2\gamma_1 s_8 V_y^d \\ 0 & 0 & 0 & 1 - s_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 \end{pmatrix}.$$

Compared to the linear case, there are just a few additional off-diagonal terms and these terms can be computed from the information in the stored $\mathcal{F}$ field of the direct problem.

4 First numerical experiments for a Poiseuille flow

Case of a one scalar parameter problem

Our first simple case consists in identifying a single parameter s_8 (*i.e.*, the viscosity $\nu = \frac{1}{3}(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2})$) and the parameter s_5 is supposed to be known. So the unknown parameter λ is equal to s_8 (*i.e.*, $\lambda = s_8 \in \mathbb{R}$). In this case, the discrete exact gradient is given by the help of (2.31), (2.32) and (2.25) as follows :

$$\nabla_{\lambda} J = J'(s_8) = d\mathcal{L} = - \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial s_8}. \quad (2.33)$$

The computation of $J'(s_8)$ requires one integration of the direct model and one integration of the adjoint model. Thus, we may try and apply a descent method in order to find the solution to the minimization problem.

Before making use of the adjoint method, it is necessary to check that we calculate exactly the gradient of the cost-function J . For that purpose we consider a simple determination of the gradient for finite difference quotient.

ϵ	Relative error	ϵ	Relative error
10^{-2}	4.89×10^{-3}	10^{-9}	3.20×10^{-9}
10^{-3}	4.84×10^{-5}	10^{-10}	4.56×10^{-8}
10^{-4}	4.83×10^{-7}	10^{-11}	1.00×10^{-7}
10^{-5}	3.85×10^{-9}	10^{-12}	3.63×10^{-6}
10^{-6}	9.44×10^{-10}	10^{-13}	1.99×10^{-5}
10^{-7}	9.19×10^{-10}	10^{-14}	2.10×10^{-4}
10^{-8}	1.30×10^{-9}	10^{-15}	2.23×10^{-3}

TAB. 2.1 – Comparison of the proposed determination of gradient with a simple finite difference quotient : Relative error : $\frac{|J'_{df}(s_8) - J'_{inv}(s_8)|}{J'_{inv}(s_8)}$ for $s_8 = 0.3$ and optimal $s_8 = 0.8$.

– Difference quotient of the cost function J

$$J'_{dq}(s_8) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{J(s_8 + \epsilon) - J(s_8 - \epsilon)}{2\epsilon}. \quad (2.34)$$

So we can validate the adjoint model if and only if the two quantities (2.33) and (2.34) are equal. We have gradient J with adjoint method $J'_{inv}(s_8 = 0.3) = -4.87278648 \times 10^{-7}$.

Table 4 shows that the gradient is well calculated, so for $\epsilon = 10^{-6}$ we have the same quantity for two gradients with a 10^{-8} relative accuracy.

Remark 4.1 Figure (2.2) shows that for $\epsilon \leq 10^{-10}$ we have machine precision errors and for $\epsilon \geq 10^{-3}$ we have convergence errors.

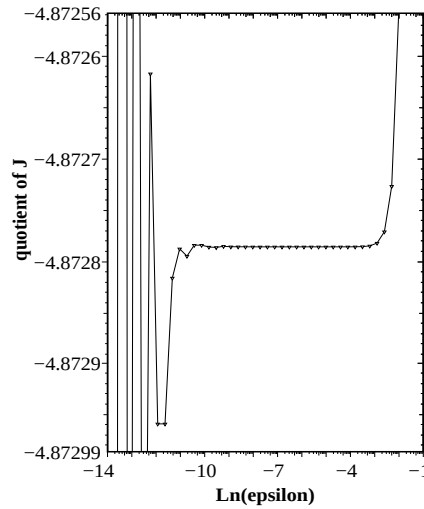


FIG. 2.2 – Difference quotient of the cost function J vs. $\ln(\epsilon)$.

In figure (2.3), we show that the adjoint method is able to calculate exactly the gradient of cost-function.

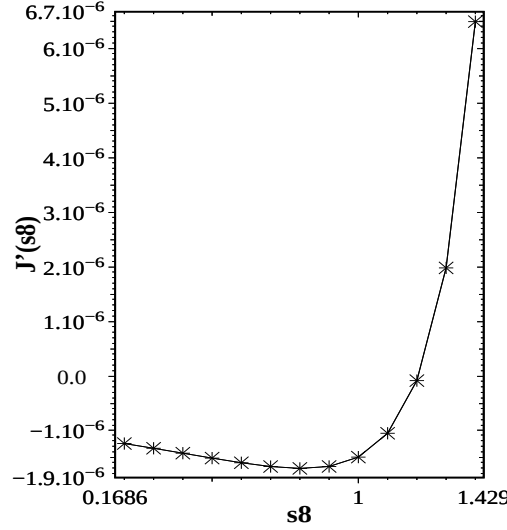


FIG. 2.3 – Profiles of gradient $J'(s_8)$ vs. s_8 calculated by two methods, $J'(s_8)$ with adjoint method (+) and with difference quotient of J (x). Optimal $s_8 = 1.2$

Now, we try to identify the parameter s_8 by a descent method with a fixed step :

$$s_8^{n+1} = s_8^n + \tilde{\omega} J'(s_8)^n, \quad \tilde{\omega} > 0.$$

Figure (2.4) shows the convergence of algorithm to the optimal parameter s_8^* . In this case the first guess is $s_8 = 0.2$ and the optimal one $s_8^* = 0.8$.

Case of two parameters

In the second case, the two parameters s_8 and s_5 are unknown (*i.e.*, $\lambda = (s_5, s_8)$). So we use the adjoint method to evaluate the discrete gradient $\nabla_\lambda J$. So in this case the gradient is given by the help of (2.31), (2.32) and (2.25) as follows :

$$\nabla_\lambda J = \nabla J(s_5, s_8) = - \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} = \left(- \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial s_5}, - \sum_{k=0}^{N-1} \mathcal{P}^{k+1} \frac{\partial \Phi}{\partial s_8} \right).$$

We use a descent method with a variable step.

$$\lambda^{n+1} = \lambda^n + \tilde{\omega}^n \nabla_\lambda J^n(\lambda), \quad \tilde{\omega}^n > 0,$$

where $\tilde{\omega}^n$ are calculated by a standard line search [Cu94]. Figure (2.5) shows the convergence of algorithm to the optimal parameters $\lambda^* = (s_5^*, s_8^*) = (1.0, 0.8)$.

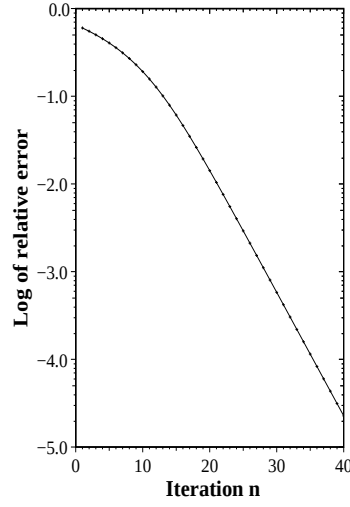


FIG. 2.4 – Log of the error ($|s_8 - s_8^*|$) *vs.* iteration n .

The first guess is $(s_5, s_8) = (1.2, 1.2)$. We find that $|\nabla_{s_8} J| \gg |\nabla_{s_5} J|$ as expected, since it is known that s_8 is related to the viscosity whereas s_5 has only subtle effects on the accuracy of the boundary conditions [GA94, GdH96].

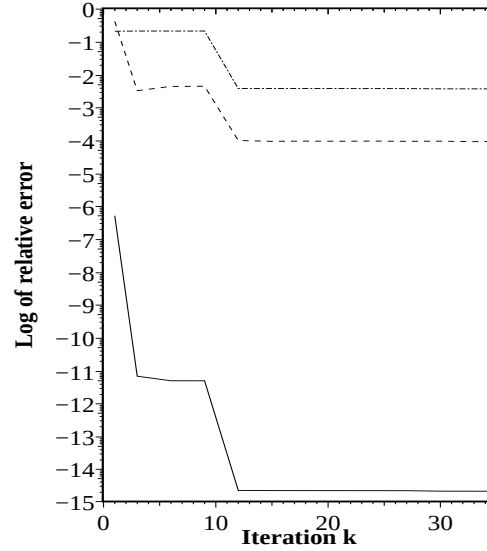


FIG. 2.5 – Log of the cost function $J(s_5, s_8)$ (solid line), Log of the error ($|s_5 - s_5^*|$) (dashed-dotted line) and Log of the error ($|s_8 - s_8^*|$) *vs.* iteration k .

5 ALBE method for a Navier-Stokes flow

We shall consider a simple case, that of a flow arising from the superposition of a uniform flow with speed $\{V, 0\}$ and a transverse shear wave in a domain with periodic boundary conditions, so that if N_x is the number of lattice points along Ox , one expects to find a time dependent solution, assuming $v \ll V$,

$$v_x = V, \quad (2.35)$$

$$v_y = v \cos(k(x - Vt) + \phi) \exp(-\nu k^2 t). \quad (2.36)$$

where the wave vector k is of the form $k = 2m\pi/N_x$ (m integer) and ϕ some phase factor.

Now we will suppose that $\gamma_1 = \gamma_3 = \frac{\gamma_2}{3} = c$ and $\gamma_4 = 3d$. We have introduced two unknown parameters c and d (*i.e.*, $\lambda = (c, d)$) in the expression (2.16) of γ_i , $i = 1, 2, 3, 4$, having in mind the use of the adjoint method to find their values in order to get a model optimally chosen with respect to a required solution. Once we have solved the adjoint problem, we can determine the derivatives of the cost function, using expressions (2.24).

We have tested the ability of the adjoint method to determine c and d using the particular cost function with $a = 0$ and $b = 1$ in Equ. 2.22, which is appropriate for a time dependent problem. We have found that the derivative of the cost function with respect to the parameter d is very small (and probably insignificant due to rounding errors in the numerical simulations). This is expected as the term depending upon d does not show up in the Chapman-Enskog analysis [dH92] of the problem. It is taken into consideration for the simple reason that in the ordinary BGK-LBE model [QdHL92], the equilibrium distributions lead to such a term.

The derivative of the cost function with respect to c obtained by the adjoint method is close to that determined by finite differences as was the case above for the parameter s_8 directly linked to the viscosity. We show in figure (2.6) the convergence of the error function with iteration number (no effort has been made to accelerate convergence).

Note that for one case the error levels at a significant value (dashed-dotted line in Figure (2.6)). That case corresponds to using as the expression given above for the “target function” and using as initial state $\mathcal{F}_0$ the distribution function computed to second order in Chapman-Enskog development. The case that leads to much better convergence (solid line in Figure (2.6)) uses as “target function” the velocity of a LBE model in which $c = d = 1$. This shows that the initial conditions used in the first case are not satisfactory and that they do not lead precisely to the simple analytic expressions given above. This result could be used to try and determine better initial conditions that lead to a small residual error. Note more generally that the identification procedure proposed in this paper will not give information on other sources of error (quality of the target or in the numerical model).

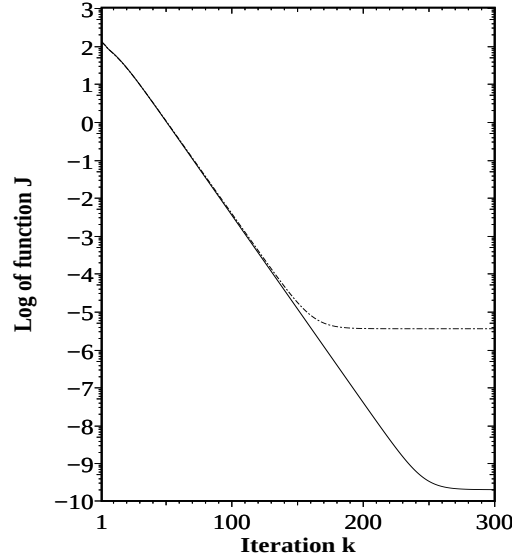


FIG. 2.6 – Log of the cost-function $J(\lambda)$ vs iteration. First case (dashed-dotted line) and second case (solid line).

6 Conclusion

We have considered the problem of parameter identification for the LBE model in computational fluid dynamics. We have used a gradient method associated with the adjoint methodology applied for discrete time. We have compared this approach with a finite difference methodology and have tested our scheme for two different configurations : a simple linear Poiseuille flow and a more realistic nonlinear model. We have derived the general adjoint model (ALBE). We note that this algorithm is as easy to parallelize as the standard LBE model.

Work is under way to test the ability of the proposed method to determine a large number (p) of unknown parameters. In that case for each set of unknown parameters for which the gradients are required, one needs one direct and one backward computation instead of at least p direct computations using the simple finite quotient determination.

The extension for future work could be the following : determination of the numerical scheme for ALBE model in case of curved boundaries, identification of unknown flow parameters at the boundary or identification of local viscosity for turbulent flows. The extension to three dimensional flows is straightforward concerning the methodology but the difficulty will be in the larger amount of data to manage.

Chapitre 3

Rappel sur les couches parfaitement absorbantes

1 Introduction

La simulation numérique de la propagation d'onde dans un domaine non borné demande *a priori* la création d'un domaine borné de calcul à l'exception des méthodes intégrales [JN80]. Cela amène à introduire une frontière artificielle délimitant le domaine de calcul. Plusieurs méthodes ont été proposées : les méthodes de couches absorbantes [IO81] qui sont d'origine empirique et les méthodes de conditions limites absorbantes [EM77] qui sont basées sur une approche théorique. Dans le cadre de ce travail on ne détaillera pas les méthodes intégrales qui consistent à se ramener à un domaine borné par une représentation intégrale.

2 Conditions limites absorbantes

Les méthodes de conditions aux limites absorbantes qui ont été développées depuis plusieurs années consistent à imposer des conditions limites artificielles. Le but de ces conditions est de laisser sortir toutes les ondes incidentes sans réflexion. L'aspect mathématique de ces méthodes a été développé par Engquist et Majda [EM77]. En effet cette méthode est basée sur la théorie des opérateurs pseudo-différentiels pour obtenir une séquence d'approximations locales des conditions du bord. Pour illustrer cette méthode on considère le problème bidimensionnel de l'équation des ondes :

$$\partial_t^2 u - \partial_x^2 u - \partial_y^2 u = 0. \quad (3.1)$$

En cherchant les solutions de la forme $u = e^{i(\omega t - k_x x - k_y y)}$ et en utilisant la transformée de Fourier, on a l'équation de dispersion

$$\omega^2 = k_x^2 + k_y^2. \quad (3.2)$$

On considère qu'en $x = x_0$ on impose des conditions limites absorbantes. On note $s = \frac{k_y}{\omega}$, on a alors de (3.2) :

$$k_x = \pm \omega \sqrt{1 - s^2} \quad \text{en} \quad x = x_0 > 0, \quad (3.3)$$

où le signe plus et moins représente l'onde plane progressive et régressive respectivement. Pour ne pas avoir d'onde réfléchie par le bord $x = x_0$, on ne prend en compte que les ondes progressives, en choisissant la branche correspondant au signe plus. En regardant la relation (3.2) comme équation de dispersion monodimensionnelle, on obtient la relation :

$$Lu \equiv \mathcal{F}^{-1} \left((k_x - \omega \sqrt{1 - s^2}) \mathcal{F}(u) \right) = 0 \quad \text{en} \quad x = x_0, \quad (3.4)$$

où $\mathcal{F}$ et $\mathcal{F}^{-1}$ sont respectivement les transformations de Fourier et de Fourier inverse. Enquist et Majda ont montré que l'opérateur L est exact [EM77]. En effet il absorbe parfaitement les ondes arrivant (de gauche à droite) en $x = x_0$ quel que soit l'angle d'incidence (*i. e.* quel que soit k_y). Comme $k_x(s)$ est une fonction irrationnelle de s , l'opérateur L n'est pas un opérateur différentiel mais pseudo-différentiel. De plus il n'est local ni en espace ni en temps. Pour avoir un opérateur plus maniable numériquement Enquist et Majda approchent l'opérateur pseudo-différentiel L par un opérateur différentiel E et cela en approchant la quantité $\sqrt{1 - s^2}$ à l'aide d'un développement de Taylor [EM77, EM79]. L'approximation d'ordre un de $k_x(s) = \sqrt{1 - s^2} = 1 + O(s^2)$, nous donne la condition absorbante :

$$E_1 u \equiv \partial_x u + \partial_t u = 0 \quad \text{en} \quad x = x_0. \quad (3.5)$$

L'approximation d'ordre deux de $k_x(s) = \sqrt{1 - s^2} = 1 - \frac{s^2}{2} + O(s^3)$, nous donne la condition absorbante :

$$E_2 u \equiv \partial_t^2 u + \partial_{tx} u - \frac{1}{2} \partial_y^2 u = 0 \quad \text{en} \quad x = x_0. \quad (3.6)$$

Ces approximations d'un opérateur "global" L par un opérateur différentiel local, engendrent des réflexions plus ou moins importantes en fonction de la fréquence de l'onde et de son angle d'incidence. Le problème consiste à trouver la meilleure approximation qui donne les plus faibles réflexions parasites, tout en ayant un problème bien posé. En essayant les approximations de Taylor d'ordre supérieur de la fonction $\sqrt{1 - s^2}$ on est conduit à des problèmes mal posés [EM77].

L'étude de telles conditions absorbantes approchées, a été réalisée par Halpern et Trefethen [TH86, HT88] grâce à des approximations basées sur des développements en fractions rationnelles de $\sqrt{1 - s^2}$:

$$\sqrt{1 - s^2} = \frac{p_m(s)}{q_n(s)}, \quad \text{sur} \quad [-1, 1], \quad (3.7)$$

où p_m et q_n sont des polynômes en s de degrés respectifs m et n . A l'aide de cette approximation on peut voir les modèles d'Engquist-Majda comme un cas particulier. En effet si on approxime $\sqrt{1 - s^2} = p_0 + p_2 s^2$ avec $p_0 = 1$ et $p_2 = -\frac{1}{2}$, on retrouve la condition (3.6). On note aussi que Halpern et Trefethen [TH86, HT88] ont proposé différents types d'approximations : Chebyshev, Chebyshev-Padé, Newman, L^2 , et L^∞ . Dans [TH86] Halpern et Trefethen ont utilisé une approximation par une fonction rationnelle du type (3.7) de $\sqrt{1 - s^2}$. Ils ont identifié les fonctions r qui donnent des conditions aux limites absorbantes pour

lesquelles le problème est bien posé au sens de Kreiss [Kr70].

- Bayliss et Turkel [BT80] proposent une autre classe de conditions aux limites absorbantes qui repose sur un développement en série de l'opérateur (approche de champ lointain), qu'on peut interpréter comme une amélioration de la condition de Sommerfeld [So64] qui consiste à imposer la condition de radiation suivante :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{\frac{d-1}{2}} (\partial_r u - iku) = 0,$$

où r est la coordonnée radiale et d la dimension d'espace. Ensuite Bayliss et Turkel [BT82] ont utilisé cette idée pour le problème d'Euler compressible en 2D et 3D et le problème de guide d'onde. On cite ici aussi les travaux de Joly-Mercier [JM89] et Tafløve [Ta98] pour les conditions aux limites absorbantes pour les ondes électromagnétiques. On note que cette présentation des conditions aux limites absorbantes est non exhaustive, on peut consulter l'article de synthèse "Review" de Givoli [Gi90] pour une étude plus complète.

3 Couches absorbantes

Les méthodes de couches absorbantes consistent à entourer le domaine d'étude par un milieu non réfléchissant de petite épaisseur (quelques mailles seulement), où l'onde est absorbée. Les premiers modèles d'Orlanski [Or76] consistent à prendre un coefficient d'absorption constant. En effet on donne ici un modèle simple de Israeli et Orszag [IO81] de couches absorbantes pour l'équation des ondes en dimension deux :

$$\partial_t^2 u - \partial_x^2 u - \partial_y^2 u = 0, \quad \text{dans } \mathbb{R}_- \times \mathbb{R}. \quad (3.8)$$

On rajoute à l'équation (3.8) un terme d'absorption $\sigma > 0$, on a alors dans la couche l'équation suivante :

$$\partial_t^2 u + \sigma \partial_t u - \partial_x^2 u - \partial_y^2 u = 0, \quad \text{dans } [0, \delta] \times \mathbb{R}. \quad (3.9)$$

On peut vérifier que l'énergie des ondes décroît dans la couche absorbante. Une analyse du coefficient de réflexion R , montre que si σ est grand alors R est grand et que si σ est petit les ondes ne seront pas suffisamment absorbées dans la couche d'épaisseur $\delta > 0$. Une des solutions à ce défaut consiste à prendre $\sigma = \sigma(x)$ variable (σ petit au début de la couche pour que l'onde incidente ne voit pas la couche et σ grand à la fin de la couche pour pouvoir absorber l'onde). On note qu'il y a d'autres alternatives : changer le terme d'absorption de l'équation (3.9) par $\partial_t u + \partial_x u$, ainsi on a l'équation suivante dans la couche $[0, \delta] \times \mathbb{R}$:

$$\partial_t^2 u + \sigma (\partial_t u + \partial_x u) - \partial_x^2 u - \partial_y^2 u = 0. \quad (3.10)$$

Il y a aussi l'alternative de Israeli-Orszag [IO81] qui consiste à faire un couplage entre les conditions aux limites absorbantes et les couches absorbantes. On note que les méthodes de couches absorbantes ont deux handicaps majeurs : le choix de la couche dépend des fréquences du signal incident et elles sont difficiles à

mettre en œuvre.

En 1994, un regain d'intérêt a eu lieu pour les méthodes de couches grâce à la contribution de Béranger [Be94], qui propose pour les problèmes d'électromagnétisme un modèle de couche parfaitement adaptée, "perfectly matched layer" dite PML. En effet les couches de Béranger ont les avantages majeurs suivants : la transmission d'onde dans la couche se fait sans réflexion parasite pour tout angle d'incidence et toute fréquence, la résolution des problèmes des coins et finalement la facilité de mise en œuvre.

Une intense activité s'est développée autour de cet outil, en particulier avec le travail de Collino [Co95] et l'adaptation aux équations d'Euler linéarisées de Hu [Hu96] et en particulier en acoustique.

4 Modèle de Béranger en acoustique

On étudie ici le modèle de Béranger en acoustique [Hu96, DDMT02] décrivant un milieu propagatif absorbant et non réfléchissant. La méthode consiste à entourer le milieu d'étude Ω par un matériau absorbant (*i. e.* couche de Béranger), (voir Fig. 3.1). Cette couche de Béranger laisse passer toutes les ondes quel que soit leur

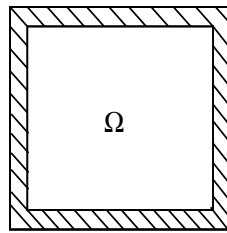


FIG. 3.1 – Domaine d'intérêt Ω et couche absorbante

angle d'incidence en ne générant aucune onde réfléchi dans le milieu d'intérêt Ω , (voir Fig. 3.2).

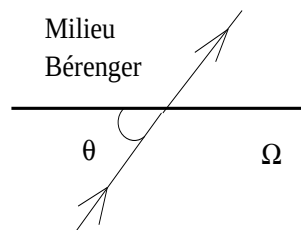


FIG. 3.2 – Transmission parfaite entre Ω et le milieu Béranger

Construction du modèle

On considère un milieu semi-infini dans la direction x défini par $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$, avec :

$$\begin{cases} \Omega^- = \{(x, y), y < 0\} \\ \Omega^+ = \{(x, y), 0 < y < \delta\} \end{cases} \quad (3.11)$$

où Ω^- représente le milieu d'intérêt (*i.e.* le milieu physique) et Ω^+ représente le milieu absorbant d'épaisseur $\delta > 0$, (voir Fig. 3.3).

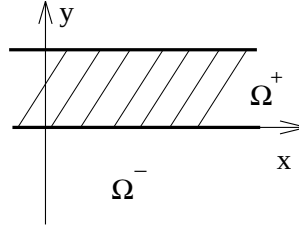


FIG. 3.3 – Domaine $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$

Le milieu acoustique Ω^- :

On considère le problème suivant dans le milieu Ω^- :

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

On cherche les solutions sous la forme (*i.e.* ondes planes) :

$$\Phi = \Phi_0 e^{i(\omega t - k_x x - k_y y)}, \quad (3.13)$$

où ω est la fréquence et $k = (k_x, k_y)$ le vecteur d'onde. A l'aide de la transformée de Fourier le système d'équations (3.12), devient :

$$\begin{cases} i\omega p_0 - ik_x j_{x0} - ik_y j_{y0} = 0, \\ i\omega j_{x0} - ik_x p_0 = 0, \\ i\omega j_{y0} - ik_y p_0 = 0. \end{cases} \quad (3.14)$$

avec l'équation de dispersion suivante :

$$\omega^2 = k_x^2 + k_y^2. \quad (3.15)$$

Le milieu absorbant Ω^+ :

Dans le milieu absorbant, la technique de Béranger consiste à décomposer l'inconnue p en deux parties :

$$p = p_x + p_y. \quad (3.16)$$

Comme ici on s'intéresse à écrire la couche absorbante pour le système (3.12), dans la direction y , on introduit le facteur d'absorption σ défini sur $\mathbb{R}_+$:

$$\sigma(y) \geq 0, \quad (3.17)$$

$$\sigma(0) = 0. \quad (3.18)$$

On a le nouveau système, associé au problème (3.12) :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \frac{\partial p_x}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} & = & 0, \\ \frac{\partial p_y}{\partial t} + \sigma p_y + \frac{j_y}{\partial y} & = & 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \frac{\partial(p_x + p_y)}{\partial x} & = & 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + \sigma j_y + \frac{\partial(p_x + p_y)}{\partial y} & = & 0, \end{array} \right. \quad (3.19)$$

avec $p = p_x + p_y$ en $y = 0$.

On cherche les solutions sous la forme :

$$\Phi = \Phi_0 e^{i(\omega t - k_x x - k_y y)}. \quad (3.20)$$

A l'aide de la transformée de Fourier, le système d'équations devient :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} i\omega p_{x0} - ik_x j_{x0} & = & 0, \\ i\omega p_{y0} + \sigma p_{y0} - ik_y j_{y0} & = & 0, \\ i\omega j_{x0} - ik_x(p_{x0} + p_{y0}) & = & 0, \\ i\omega j_{y0} + \sigma j_{y0} - ik_y(p_{x0} + p_{y0}) & = & 0. \end{array} \right. \quad (3.21)$$

En $y = 0$ en utilisant $p = p_x + p_y$ on a :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} i\omega p_0 - ik_x j_{x0} - \frac{i\omega}{i\omega + \sigma} ik_y j_{y0} & = & 0, \\ i\omega j_{x0} - ik_x p_0 & = & 0, \\ i\omega j_{y0} - \frac{i\omega}{i\omega + \sigma} ik_y p_0 & = & 0. \end{array} \right. \quad (3.22)$$

On obtient alors l'équation de dispersion suivante :

$$\omega^2 = k_x^2 + \frac{k_y^2}{(1 - \frac{i\sigma(0)}{\omega})^2}. \quad (3.23)$$

Lemme 1 Soit $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$ un domaine de $\mathbb{R}^2$. On considère une solution régulière du problème (3.12) dans le milieu Ω^- et une solution régulière du problème (3.19) dans le milieu Ω^+ . A l'interface Σ on a continuité de la pression et de l'impulsion normale :

$$p^- = p^+ \quad \text{et} \quad j_y^+ = j_y^-. \quad (3.24)$$

Preuve: On écrit le problème (3.12) sous la forme conservative suivante :

$$\partial_t W + \partial_x f^-(W) + \partial_y g^-(W) = 0, \quad (3.25)$$

où $W \equiv (p, j_x, j_y)$, $f^-(x, y, z) \equiv (y, x, 0)$ et $g^-(x, y, z) \equiv (z, 0, x)$. On écrit de même, le problème (3.19) à l'interface $y = 0$ en utilisant $p_x + p_y = p$, $\sigma(0) = 0$ et en sommant les deux premières équations du système, sous la forme suivante :

$$\partial_t W + \partial_x f^+(W) + \partial_y g^+(W) = 0, \quad (3.26)$$

où $W \equiv (p, j_x, j_y)$, $f^-(x, y, z) \equiv (y, x, 0)$ et $g^-(x, y, z) \equiv (z, 0, x)$.

Soit W^- une solution régulière dans le milieu Ω^- et W^+ une solution régulière dans le milieu Ω^+ . Soit Ω_1 la région espace temps où W^- est défini et Ω_2 la région espace temps où W^+ est défini. On désigne par n la normale à l'interface Γ dans l'espace (x, y, t) (voir la figure 3.4) qui sépare les deux régions Ω_1 et Ω_2 . On a alors

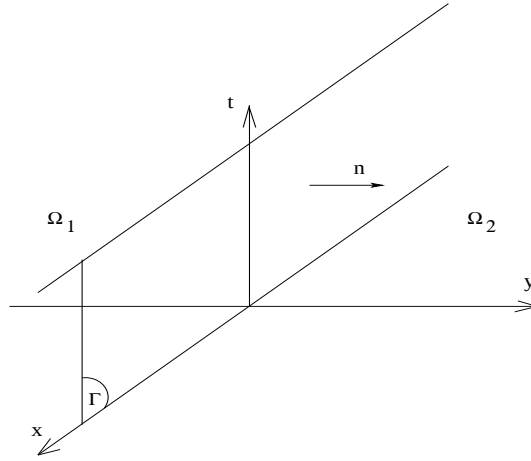


FIG. 3.4 – Interface Γ entre Ω_1 et Ω_2 .

d'après les relations de Rankine-Hugoniot [Al03] :

$$(W^+ - W^-)n_t + (f^+(W^+) - f^-(W^-))n_x + (g^+(W^+) - g^-(W^-))n_y = 0. \quad (3.27)$$

où $(n_x, n_y, n_t) = n$. Dans notre problème on a $n = (0, 1, 0)$, on déduit alors de (3.27) :

$$(g^+(W^+) - g^-(W^-))n_y = \begin{pmatrix} j_y^+ - j_y^- \\ 0 \\ p^+ - p^- \end{pmatrix} = 0. \quad (3.28)$$

□

Facteur de réflexion et de transmission

Proposition 20 Interface entre milieu acoustique et milieu Bérenger

Soit $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$, avec Ω^- le milieu acoustique (3.12) et Ω^+ le milieu Bérenger (3.19). Soit Φ_i une onde incidente dans le milieu Ω^- , Φ_r l'onde réfléchie par

l'interface Σ dans le milieu Ω^- et Φ_t l'onde transmise dans le milieu Ω_+ . On définit le facteur de réflexion R et le facteur de transmission T , par :

$$R = \frac{\Phi_r}{\Phi_i}, \quad T = \frac{\Phi_t}{\Phi_i}. \quad (3.29)$$

On a alors $R = 0$ et $T = 1$.

Preuve: Quand une onde incidente Φ_i de vecteur d'onde k^i rencontre l'interface $\Sigma = \{(x, y), y = 0\}$ séparant les deux milieux Ω^+ et Ω^- , une partie de l'onde incidente passe dans le milieu Ω^+ et donne naissance à une onde transmise Φ_t de vecteur d'onde k^t . Le reste de l'onde revient dans le milieu Ω^- et donne naissance à une onde réfléchie Φ_r de vecteur d'onde k^r .

On introduit le coefficient de réflexion R et le coefficient de transmission T :

$$R = \frac{p_r}{p_i}, \quad T = \frac{p_t}{p_i}. \quad (3.30)$$

La continuité de la pression à l'interface (voir lemme 1) s'exprime par : $p_i + p_r = p_t$, d'où on déduit

$$1 + R = T. \quad (3.31)$$

On a aussi :

$$\begin{aligned} j_x^r &= R j_x^i & \text{et} & & j_x^t &= T j_x^i, \\ j_y^r &= R j_y^i & \text{et} & & j_y^t &= T j_y^i. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Comme les ondes Φ_i et Φ_r sont dans le milieu Ω^- , on déduit alors de (3.14) :

$$j_x^i = \frac{k_x^i}{\omega} p^i \quad \text{et} \quad j_y^i = \frac{k_y^i}{\omega} p^i, \quad (3.33)$$

D'après les lois de Descartes on a :

$$k_x^i = k_x^r \quad \text{et} \quad k_y^i = -k_y^r. \quad (3.34)$$

En utilisant (3.30), (3.32), (3.33) et (3.34) on déduit :

$$j_x^i + j_x^r = \frac{k_x^i}{\omega} (1 + R) p^i, \quad (3.35)$$

$$j_y^i + j_y^r = \frac{k_y^i}{\omega} (1 - R) p^i. \quad (3.36)$$

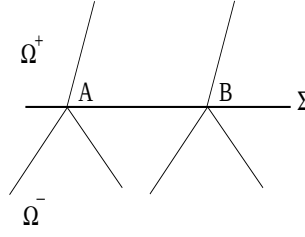
L'onde Φ_t dans le milieu Ω^+ se déduit du système (3.22) :

$$j_x^t = \frac{k_x^t}{\omega} (1 + R) p^i, \quad (3.37)$$

$$j_y^t = \frac{ik_y^t}{i\omega + \sigma} (1 + R) p^i. \quad (3.38)$$

La continuité de j_y à l'interface (voir lemme 1) en $y = 0$ entraîne :

$$j_y^i + j_y^r = j_y^t. \quad (3.39)$$

FIG. 3.5 – Interface Σ entre les deux milieux Ω_+ et Ω_- .

On a alors d'après (3.36), (3.38) et (3.39) :

$$\frac{k_y^i}{\omega}(1 - R)p^i = \frac{ik_y^t}{i\omega + \sigma(0)}(1 + R)p^i. \quad (3.40)$$

Comme le système est invariant par translation le long de l'interface Σ , le rapport de l'onde incidente Φ_i et Φ_t en deux points A et B de l'interface doit être le même (voir fig. 3.5) :

$$\frac{\Phi_t(B)}{\Phi_i(B)} = \frac{\Phi_t(A)}{\Phi_i(A)}. \quad (3.41)$$

En utilisant (3.13) et (3.20) on a :

$$\Phi_i(B) = \Phi_i(A)e^{-ik_x^i d} \quad \text{et} \quad \Phi_t(B) = \Phi_t(A)e^{-ik_x^t d}$$

avec $d = AB$. A l'aide de (3.41) on conclut :

$$k_x^i = k_x^t. \quad (3.42)$$

En utilisant l'équation de dispersion (3.15) dans le milieu Ω^- , l'équation de dispersion (3.23) dans le milieu Ω^+ , la condition de raccord $\sigma(0) = 0$, l'équation (3.42), et le fait qu'on a la même fréquence ω dans les deux milieux, on conclut :

$$k_y^i = k_y^t. \quad (3.43)$$

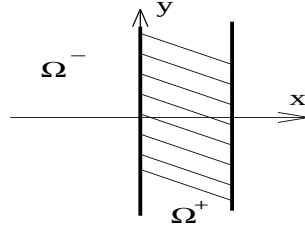
Ainsi l'équation (3.40) devient :

$$\frac{1}{\omega}(1 - R) = \frac{i}{i\omega + \sigma(0)}(1 + R). \quad (3.44)$$

On utilise encore une fois la condition de raccord $\sigma(0) = 0$ et on conclut de (3.44) que $R = 0$. $\square$

Remarque 15 Si l'interface Σ entre le milieu physique Ω^- et la couche absorbante Ω^+ , est orthogonale à l'axe des x (voir Fig. 3.6), le système de Bérenger associé au problème (3.12) s'écrit dans Ω_+ :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \frac{\partial p_x}{\partial t} + \sigma p_x + \frac{\partial j_x}{\partial x} & = & 0, \\ \frac{\partial p_y}{\partial t} + \frac{j_y}{\partial y} & = & 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \sigma j_x + \frac{\partial(p_x + p_y)}{\partial x} & = & 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + \frac{\partial(p_x + p_y)}{\partial y} & = & 0. \end{array} \right. \quad (3.45)$$

FIG. 3.6 – Domaine $\Omega = \Omega^+ \cup \Omega^-$

avec $p_x + p_y = p$ et $\sigma = 0$ en $x = 0$, et $\sigma(x) \geq 0$.

5 Perte d'hyperbolicité

Rappelons que Abarbanel et *al.* [AGH99] et Rahmouni [Ra01, Ra99] ont étudié le défaut des couches parfaitement adaptées de Béranger à savoir que la formulation correspond à des problèmes qui ne sont que faiblement bien posés. En effet si on considère le problème acoustique suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (3.46)$$

Alors la couche parfaitement absorbante de Béranger associée [Hu96, DDMT02] est donnée par

$$\begin{cases} \frac{\partial p_x}{\partial t} + \sigma_x p_x + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial p_y}{\partial t} + \sigma_y p_y + \frac{\partial j_y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \sigma_x j_x + \frac{\partial(p_x + p_y)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + \sigma_y p_x + \frac{\partial(p_x + p_y)}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (3.47)$$

avec $\sigma_x \geq 0$ et $\sigma_y \geq 0$ qui sont les fonctions d'absorption. On peut écrire le système de couche absorbante (3.47) sous la forme suivante :

$$\partial_t W + A \partial_x W + B \partial_y W + C W = 0, \quad (3.48)$$

où $W = (p_x, p_y, j_x, j_y)^t$,

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad C = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma_y \end{pmatrix}.$$

On regarde alors les solutions de la forme $W = e^{i(\omega t - k_x x - k_y y)}(\phi_{p_x}, \phi_{p_y}, \phi_{j_x}, \phi_{j_y})^t$, on a alors le symbole principal, $M = ik_x A + ik_y B$, du système (3.48) donné par :

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & ik_x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ik_y \\ ik_x & ik_x & 0 & 0 \\ ik_y & ik_y & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

La matrice M admet $\lambda_0 = 0$ comme valeur propre double, alors que le sous-espace vectoriel E_{λ_0} associé à λ_0 est de dimension 1. Ce qui montre que le système de couche absorbante de Béranger (3.47) n'est pas hyperbolique [Ra91]. Abarbanel et *al.* [AGH99] et Rahmouni [Ra01, Ra99] proposent alors de nouveaux modèles de couches parfaitement adaptés bien posés (*i.e* le système d'équations dans les couches absorbantes reste hyperbolique). En effet on écrit le système Béranger (3.47) sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \partial_t W_x + A \partial_x W + \sigma_x W_x = 0, \\ \partial_t W_y + B \partial_y W + \sigma_y W_y = 0, \end{cases} \quad (3.49)$$

où $W_x + W_y = W$. Ensuite en raisonnant en variable de Fourier en temps le système précédent s'écrit :

$$\begin{cases} (i\omega + \sigma_x)W_x + A \partial_x W = 0, \\ (i\omega + \sigma_y)W_y + B \partial_y W = 0. \end{cases} \quad (3.50)$$

En sommant les deux équations on obtient :

$$i\omega W + (S_x A \partial_x + S_y B \partial_y) W = 0, \quad (3.51)$$

où $S_x = \frac{i\omega}{i\omega + \sigma_x}$ et $S_y = \frac{i\omega}{i\omega + \sigma_y}$. Rahmouni [Ra01] propose alors de faire un changement de base en utilisant les deux matrices suivantes :

$$N = \begin{pmatrix} S_y^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & S_x^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad M = \begin{pmatrix} S_x & 0 & 0 \\ 0 & S_y & 0 \\ 0 & 0 & S_x S_y \end{pmatrix}.$$

Les matrices M et N ont les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} S_x A \partial_x + S_y B \partial_y &= M (A \partial_x + B \partial_y) N, \\ A \partial_x N + B \partial_y N &= 0, \\ \lim_{\sigma_x, \sigma_y \rightarrow 0} N &= I. \end{aligned}$$

Ainsi l'équation (3.51) s'écrit :

$$i\omega W + M (A \partial_x + B \partial_y) N W = 0. \quad (3.52)$$

Finalement en utilisant le changement de variable $\widetilde{W} = N W$, et en développant l'opérateur $i\omega M^{-1} N^{-1}$ (voir [Ra01]), on obtient le modèle suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \widetilde{W} + C \widetilde{W} + R T + (A \partial_x + B \partial_y) \widetilde{W} = 0, \\ \partial_t T + D T - \widetilde{W} = 0, \end{cases} \quad (3.53)$$

où $D = \text{diag}(\sigma_y, \sigma_x, 0)$, $C = \text{diag}(\sigma_x - \sigma_y, \sigma_y - \sigma_x, \sigma_x + \sigma_y)$, $R = \text{diag}(\sigma_y(\sigma_y - \sigma_x), \sigma_x(\sigma_x - \sigma_y), -\sigma_x \sigma_y)$ et T est une nouvelle inconnue. Le modèle (3.53) est une couche absorbante parfaitement adaptée de plus il est fortement hyperbolique.

Chapitre 4

Schéma de Boltzmann sur réseau pour une couche de Béranger

1 Construction du schéma au premier ordre

Pour pouvoir disposer de conditions aux limites parfaitement absorbantes pour la méthode de Boltzmann sur réseau, on a choisi de contruire un schéma de **B**oltzmann sur **R**éseau qui modélise la couche parfaitement adaptée de **B**éranger qu'on note BRB. On a commencé par modéliser le système (3.45) dans le cas de l'acoustique.

Dans une première approche, on va négliger les termes d'absorption dans les équations du milieu Béranger (3.45) (*i.e.* $\sigma = 0$). La particularité de ce système de Béranger réside dans le fait qu'il y a quatre équations macroscopiques, alors que le système d'équations équivalentes (1.58) du schéma de Boltzmann D2Q9 n'a que trois équations. Pour cela on se propose de conserver un moment en plus dans l'étape de collision pour avoir quatre équations macroscopiques. Ainsi nous allons chercher un schéma à quatre moments conservés. On pourrait essayer de considérer des modèles avec un grand nombre de vitesses discrètes, mais ceci conduirait à des difficultés de raccordement à l'interface entre le milieu d'intérêt où on a neuf vitesses discrètes (*i. e.* schéma D2Q9) et la couche absorbante pour l'étape d'advection. On a préféré alors garder un automate à neuf vitesses discrètes.

Proposition 21 Construction du schéma BRB.

Il existe un schéma de Boltzmann, à 9 vitesses discrètes et 4 moments conservés : $\rho = \rho_x + \rho_y$, $\rho_x - \rho_y \equiv \gamma_\rho \rho + \gamma_3 m_3 + \gamma_4 m_4 + \gamma_7 m_7 + \gamma_8 m_8$, j_x et j_y . On garde alors les moments non conservés suivants : m_3 , m_4 , m_5 , m_6 et m_8 qui relaxent autour de leurs valeurs d'équilibre données par :

$$m_3^{eq} = a_x \rho_x + a_y \rho_y, \text{ où } \begin{cases} a_x &= -4 + 6c_s^2, \\ a_y &= -4 + 6c_s^2, \end{cases}$$
$$m_4^{eq} = c_x \rho_x + c_y \rho_y, \text{ où } \begin{cases} c_x &= \frac{(4\gamma_3 - 6\gamma_3 c_s^2 - \gamma_\rho + 1)}{\gamma_4}, \\ c_y &= \frac{(4\gamma_3 - 6\gamma_3 c_s^2 - \gamma_\rho - 1)}{\gamma_4}, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} m_5^{eq} &= \frac{c_1}{\lambda} j_x \quad \text{où} \quad c_1 = \frac{(3\gamma_\rho + \gamma_7 + 3\gamma_3 - 3)}{(\gamma_7 - 3\gamma_3 - 3\gamma_4)}, \\ m_6^{eq} &= \frac{c_2}{\lambda} j_y \quad \text{où} \quad c_2 = \frac{(-3\gamma_\rho + \gamma_7 - 3\gamma_3 - 3)}{(\gamma_7 + 3\gamma_3 + 3\gamma_4)}, \\ m_8^{eq} &= 0. \end{aligned}$$

et

$$\gamma_8 = 0 \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \gamma_\rho = \gamma_3 + 2\gamma_4 + 1 - \gamma_7, \\ \gamma_7 = 1. \end{cases}$$

L'équation équivalente de ce schéma BRB à l'ordre 1 par rapport à Δt est le milieu de Béranger (3.45) avec $\sigma = 0$ qui s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{\partial p_x}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p_y}{\partial t} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial (p_x + p_y)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial (p_x + p_y)}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (4.1)$$

Preuve: On part du schéma de Boltzmann D2Q9 défini dans le chapitre 1, en conservant la même géométrie du réseau et les mêmes vitesses discrètes. On garde l'étape d'advection et on change l'étape de collision. On redéfinit alors l'espace des moments de la manière suivante :

- les moments conservés :

$$\begin{aligned} - \rho &= \rho_x + \rho_y = \sum_{j=0}^8 f_j. \\ - J_x &= (f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8). \\ - J_y &= (f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8). \\ - \rho_x - \rho_y &. \end{aligned}$$

- Les moments non conservés : on garde m_3, m_4, m_5, m_6 et m_8 . On note qu'on ne s'intéresse plus à l'évolution du moment m_7 . De plus pour écrire la matrice de passage M de l'espace des distributions f à l'espace des moments $\mathbb{M}$ on considère le nouvel ordre suivant : $\rho, \rho_x - \rho_y, J_x, J_y, m_3, m_4, m_5, m_6$ et m_8 .

On construit alors le moment conservé $\rho_x - \rho_y$ comme combinaison linéaire des neuf moments $m_k, 0 \leq k \leq 8$ déjà introduits dans le modèle D2Q9 sous les deux contraintes suivantes : les équations macroscopiques sont celles du milieu Béranger (4.1) et la matrice M_B de passage de l'espace des distribution f à l'espace des moments $\mathbb{M}$ est inversible.

On pose alors :

$$\rho_x - \rho_y = \gamma_\rho \rho + \gamma_x J_x + \gamma_y J_y + \gamma_3 m_3 + \gamma_4 m_4 + \gamma_5 m_5 + \gamma_6 m_6 + \gamma_7 m_7 + \gamma_8 m_8.$$

On définit aussi les moments à l'équilibre en fonction des moments conservés tel que le modèle soit invariant par rapport au groupe de symétrie de l'ensemble des vitesses discrètes :

$$m_3^{eq} = a_x \rho_x + a_y \rho_y, \quad (4.2)$$

$$m_4^{eq} = c_x \rho_x + c_y \rho_y, \quad (4.3)$$

$$m_5^{eq} = \frac{c_1}{\lambda} j_x, \quad (4.4)$$

$$m_6^{eq} = \frac{c_2}{\lambda} j_y, \quad (4.5)$$

$$m_8^{eq} = 0. \quad (4.6)$$

On cherche alors les paramètres $(\gamma_\rho, \gamma_x, \gamma_y, \gamma_{3,4,5,6,7,8}, a_x, a_y, c_x, c_y, c_1 \text{ et } c_2)$ tels que le système d'équations équivalentes d'ordre un en Δt soit égal au système d'équations de Béranger (4.1). On a alors le système d'équations* équivalentes d'ordre un en Δt :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_x}{\partial y} = O(\Delta t), \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial J_x}{\partial t} + A_1 \frac{\partial J_x}{\partial x} + A_2 \frac{\partial J_y}{\partial x} + A_3 \frac{\partial \rho}{\partial x} + A_4 \frac{\partial(\rho_x - \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t), \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial J_y}{\partial t} + B_1 \frac{\partial J_y}{\partial y} + B_2 \frac{\partial J_x}{\partial y} + B_3 \frac{\partial \rho}{\partial y} + B_4 \frac{\partial(\rho_x - \rho_y)}{\partial y} = O(\Delta t), \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_x - \rho_y)}{\partial t} + C_1 \frac{\partial(\rho_x - \rho_y)}{\partial x} + C_2 \frac{\partial(\rho_x - \rho_y)}{\partial y} + C_3 \frac{\partial \rho}{\partial x} + C_4 \frac{\partial \rho}{\partial y} + \\ + C_5 \frac{\partial J_x}{\partial x} + C_6 \frac{\partial J_x}{\partial y} + C_7 \frac{\partial J_y}{\partial x} + C_8 \frac{\partial J_y}{\partial y} = O(\Delta t). \end{aligned} \quad (4.10)$$

où

$$A_1 = \frac{-1}{2\gamma_7} (\gamma_x + c_1 \gamma_5), \quad A_2 = \frac{-1}{2\gamma_7} (\gamma_y + c_2 \gamma_6),$$

$$A_3 = \frac{2}{3} - \frac{\gamma_\rho}{2\gamma_7} + \frac{a_x + a_y}{4} \left(\frac{1}{3} - \frac{\gamma_3}{\gamma_7} \right) - \frac{\gamma_4(c_x + c_y)}{4\gamma_7}, \quad (4.11)$$

$$A_4 = \frac{1}{2\gamma_7} + \frac{a_x - a_y}{4} \left(\frac{1}{3} - \frac{\gamma_3}{\gamma_7} \right) - \frac{\gamma_4(c_x - c_y)}{4\gamma_7}, \quad (4.12)$$

$$B_1 = \frac{1}{2\gamma_7} (\gamma_y + c_2 \gamma_6), \quad B_2 = \frac{1}{2\gamma_7} (\gamma_x + c_1 \gamma_5),$$

$$B_3 = \frac{2}{3} + \frac{\gamma_\rho}{2\gamma_7} + \frac{a_x + a_y}{4} \left(\frac{1}{3} + \frac{\gamma_3}{\gamma_7} \right) + \frac{\gamma_4(c_x + c_y)}{4\gamma_7}, \quad (4.13)$$

$$B_4 = \frac{-1}{2\gamma_7} + \frac{a_x - a_y}{4} \left(\frac{1}{3} + \frac{\gamma_3}{\gamma_7} \right) + \frac{\gamma_4(c_x - c_y)}{4\gamma_7}, \quad (4.14)$$

$$C_1 = \frac{(a_x - a_y)}{2} \left(\frac{\gamma_x}{6} + \frac{\gamma_5}{3} + \frac{\gamma_3}{2\gamma_7} (2\gamma_5 - \gamma_x) \right) + \frac{c_x - c_y}{2} \left(\frac{\gamma_5}{3} + \frac{\gamma_4}{2\gamma_7} (2\gamma_5 - \gamma_x) \right),$$

$$C_2 = \frac{(a_x - a_y)}{2} \left(\frac{\gamma_y}{6} + \frac{\gamma_6}{3} + \frac{\gamma_3}{2\gamma_7} (-2\gamma_6 + \gamma_y) \right) + \frac{c_x - c_y}{2} \left(\frac{\gamma_6}{3} + \frac{\gamma_4}{2\gamma_7} (-2\gamma_6 + \gamma_y) \right),$$

*calcul fait à l'aide de Maple

$$C_3 = \frac{2\gamma_x}{3} + \frac{\gamma_\rho}{2\gamma_7}(2\gamma_5 - \gamma_x) + \frac{a_x + a_y}{2} \left(\frac{\gamma_5}{3} + \frac{\gamma_x}{6} + \frac{\gamma_3(2\gamma_5 - \gamma_x)}{2\gamma_7} \right) +$$

$$+ \frac{c_x + c_y}{2} \left(\frac{\gamma_5}{3} + \frac{\gamma_4}{2\gamma_7}(2\gamma_5 - \gamma_x) \right),$$

$$C_4 = \frac{2\gamma_y}{3} + \frac{\gamma_\rho}{2\gamma_7}(-2\gamma_6 + \gamma_y) + \frac{a_x + a_y}{2} \left(\frac{\gamma_6}{3} + \frac{\gamma_y}{6} + \frac{\gamma_3(-2\gamma_6 + \gamma_y)}{2\gamma_7} \right) +$$

$$+ \frac{c_x + c_y}{2} \left(\frac{\gamma_6}{3} + \frac{\gamma_4}{2\gamma_7}(-2\gamma_6 + \gamma_y) \right),$$

$$C_5 = \gamma_\rho + \gamma_3 + c_1(\gamma_3 + \gamma_4) + \frac{\gamma_7}{3}(1 - c_1) + \frac{\gamma_5\gamma_x}{2\gamma_7}(2 - c_1) + \frac{2c_1\gamma_5^2 - \gamma_x^2}{2\gamma_7},$$

$$C_6 = \frac{\gamma_8(2 + c_1)}{3} + \frac{1}{2\gamma_7}(c_1\gamma_5 + \gamma_x)(\gamma_y - 2\gamma_6),$$

$$C_7 = \frac{\gamma_8(2 + c_2)}{3} - \frac{1}{2\gamma_7}(c_2\gamma_6 + \gamma_y)(\gamma_x - 2\gamma_5),$$

$$C_8 = \gamma_\rho + \gamma_3 + c_2(\gamma_3 + \gamma_4) - \frac{\gamma_7}{3}(1 - c_2) - \frac{\gamma_6\gamma_y}{2\gamma_7}(2 - c_1) - \frac{2c_2\gamma_6^2 - \gamma_y^2}{2\gamma_7}.$$

On procède par identification, il faut que $A_1 = A_2 = A_4 = 0$, $A_3 = c_s^2$, $B_1 = B_2 = B_4 = 0$, $B_3 = c_s^2$, $C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_6 = C_7 = 0$, $C_5 = 1$ et $C_8 = -1$. On a alors 16 équations et 15 paramètres à fixer.

On résout $A_1 = A_2 = 0$ on trouve $\gamma_x = -\gamma_5 c_1$ et $\gamma_y = -\gamma_6 c_2$, ainsi on a $A_1 = A_2 = B_1 = B_2 = 0$ car ($B_1 = -A_1$ et $B_2 = -A_2$). On résout ensuite $A_3 = c_s^2$ par rapport à a_x et $B_3 = c_s^2$ par rapport à c_x on trouve :

$$a_x = \frac{\gamma_7(12c_s^2 - a_y - 8) + 3\gamma_4(c_x + c_y) + 6\gamma_\rho + 3\gamma_3 a_y}{\gamma_7 - 3\gamma_\rho} \quad (4.15)$$

$$c_x = \frac{(8 - 12c_s^2)\gamma_3 - 2\gamma_\rho - \gamma_4 c_y}{\gamma_4}. \quad (4.16)$$

On remplace alors a_x et c_x par leur valeur (4.15) et (4.16) dans A_4 et B_4 . Or il faut que $A_4 = 0$ ce qui nous donne une valeur pour $a_y = \frac{(6c_s^2 - 4)\gamma_7 - 3(1 + \gamma_\rho + \gamma_4 c_y)}{\gamma_7 + 3\gamma_3}$. De même il faut que $B_4 = 0$ ce qui nous donne une valeur pour $c_y = \frac{(4 - 6c_s^2)\gamma_3 - \gamma_\rho - 1}{\gamma_4}$. Il nous reste encore huit équations à satisfaire $C_{1,2,3,4,6,7} = 0$, $C_5 = 1$ et $C_8 = -1$. On remplace γ_x , γ_y , a_x , a_y , c_x et c_y par leur valeur qu'on vient de trouver dans ces huit équations, on trouve :

$$C_1 = \frac{\gamma_5}{3\gamma_4} = 0, \quad (4.17)$$

$$C_2 = \frac{\gamma_6}{3\gamma_4} = 0, \quad (4.18)$$

$$C_3 = \frac{\gamma_5}{3\gamma_4} ((4 - 6c_s^2)\gamma_3 + (6c_s^2 - 4 - 3c_1c_s^2)\gamma_4 - \gamma_\rho) = 0, \quad (4.19)$$

$$C_4 = \frac{\gamma_6}{3\gamma_4} ((4 - 6c_s^2)\gamma_3 + (6c_s^2 - 4 - 3c_2c_s^2)\gamma_4 - \gamma_\rho) = 0, \quad (4.20)$$

$$C_5 = \gamma_3(1 + c_1) + \frac{\gamma_7}{3}(1 - c_1) + (c_1\gamma_4 + \gamma_\rho) = 1, \quad (4.21)$$

$$C_6 = \frac{\gamma_8}{3}(2 + c_1) = 0, \quad (4.22)$$

$$C_7 = \frac{\gamma_8}{3}(2 + c_2) = 0, \quad (4.23)$$

$$C_8 = \gamma_3(1 + c_2) + \frac{\gamma_7}{3}(c_2 - 1) + (c_2\gamma_4 + \gamma_\rho) = -1. \quad (4.24)$$

Les équations (4.17) et (4.18) nous donnent $\gamma_5 = \gamma_6 = 0$. On remarque que les équations (4.19) et (4.20) sont satisfaites. On résout alors (4.21) et (4.24) par rapport à c_1 et c_2 , on trouve alors

$$c_1 = \frac{3(1 - \gamma_\rho - \gamma_3) - \gamma_7}{3(\gamma_3 + \gamma_4) - \gamma_7}, \quad (4.25)$$

$$c_2 = \frac{\gamma_7 - 3(1 + \gamma_\rho - \gamma_3)}{3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7}. \quad (4.26)$$

Il nous reste alors deux équations (4.22) et (4.23) en remplaçant c_1 et c_2 par leur valeur :

$$C_6 = \frac{\gamma_8}{3} \left(2 + \frac{3(1 - \gamma_\rho - \gamma_3) - \gamma_7}{3(\gamma_3 + \gamma_4) - \gamma_7} \right) = 0, \quad (4.27)$$

$$C_7 = \frac{\gamma_8}{3} \left(2 + \frac{\gamma_7 - 3(1 + \gamma_\rho - \gamma_3)}{3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7} \right) = 0, \quad (4.28)$$

On a alors deux solutions possibles :

$$\gamma_8 = 0 \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \gamma_\rho = \gamma_3 + 2\gamma_4 + 1 - \gamma_7, \\ \gamma_7 = 1. \end{cases}$$

Pour récapituler, en procédant par identification on trouve :

$$\gamma_x = \gamma_y = \gamma_5 = \gamma_6 = 0,$$

$$a_x = -4 + 6c_s^2, \quad a_y = -4 + 6c_s^2,$$

$$c_x = \frac{(4\gamma_3 - 6\gamma_3c_s^2 - \gamma_\rho + 1)}{\gamma_4}, \quad c_y = \frac{(4\gamma_3 - 6\gamma_3c_s^2 - \gamma_\rho - 1)}{\gamma_4},$$

$$c_1 = \frac{(3\gamma_\rho + \gamma_7 + 3\gamma_3 - 3)}{(\gamma_7 - 3\gamma_3 - 3\gamma_4)}, \quad c_2 = \frac{(-3\gamma_\rho + \gamma_7 - 3\gamma_3 - 3)}{(\gamma_7 + 3\gamma_3 + 3\gamma_4)}.$$

et

$$\gamma_8 = 0 \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \gamma_\rho = \gamma_3 + 2\gamma_4 + 1 - \gamma_7, \\ \gamma_7 = 1. \end{cases}$$

Ainsi les équations équivalentes du nouveau schéma sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho_x}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial y} = O(\Delta t), \\ \frac{\partial \rho_y}{\partial t} + \frac{\partial j_y}{\partial x} = O(\Delta t), \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \lambda^2 c_s^2 \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial y} = O(\Delta t), \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + \lambda^2 c_s^2 \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t), \end{array} \right. \quad (4.29)$$

Il nous reste alors 4 paramètres libres dans le cas où on fixe $\gamma_8 = 0$: γ_ρ , γ_3 , γ_4 et γ_7 ou 3 paramètres libres dans le cas où on fixe $\gamma_\rho = \gamma_3 + 2\gamma_4$ et $\gamma_7 = 1$: γ_3 , γ_4 et γ_8 . La contrainte de l'inversibilité de la matrice M se traduit par les conditions suivantes : $\gamma_7 \neq (0, \pm 3(\gamma_3 + \gamma_4))$ et $\gamma_4 \neq 0$.

On va montrer ici que pour un choix de paramètres (pour alléger les calculs) on a bien comme équations équivalentes à l'ordre un en Δt le système (4.29). En effet on va appliquer la méthode de l'équation équivalente dans le cas où $\gamma_8 = 0$, ainsi la matrice de passage de l'espace des distributions f à l'espace des moments $\mathbb{M}$ s'écrit :

$$M_B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ a_0 & a_1 + a_2 & a_1 - a_2 & a_1 + a_2 & a_1 - a_2 & a_3 & a_3 & a_3 & a_3 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

où $a_0 = \gamma_\rho - 4(\gamma_3 - \gamma_4)$, $a_1 = \gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4$, $a_2 = \gamma_7$ et $a_3 = \gamma_\rho + 2\gamma_3 + \gamma_4$. Ici on a changé l'ordre des moments : on a écrit d'abord les moments conservés ρ , $\rho_x - \rho_y$, j_x et j_y , ensuite on a les moments non conservés m_3 , m_4 , m_5 , m_6 et m_8 . Un pas de l'algorithme BRB s'écrit :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8, \quad (4.31)$$

De la même manière que pour le schéma D2Q9 (voir la proposition 1), on a l'ordre zéro en Δt :

$$f_j = f_j^{eq} + O(\Delta t), \quad 0 \leq j \leq 8, \quad (4.32)$$

$$f_j^* = f_j^{eq} + O(\Delta t), \quad 0 \leq j \leq 8, \quad (4.33)$$

avec $f_j^{eq} = \sum_{k=0}^8 (M_B^{-1})_{j,k} m_k^{eq}$ et m_k^{eq} donné par (4.2), (4.3), (4.4), (4.5) et (4.6). On développe à l'ordre deux les deux membres de la relation (4.31) :

$$\begin{aligned} f_j(x, t + \Delta t) &= f_j(x, t) + \Delta t \partial_t f_j + O(\Delta t^2) = \\ &= f_j^*(x - v_j \Delta t, t) = f_j^*(x, t) - \Delta t v_j \cdot \nabla f_j^*(x, t) + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Puis on passe à l'espace des moments à l'aide de la matrice M_B (4.30) et en utilisant (4.32) et (4.33). On obtient :

$$\rho + \Delta t \partial_t \rho = \rho^* - \Delta t \sum_j (M_B)_{0,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + O(\Delta t^2), \quad (4.34)$$

$$(\rho_x - \rho_y) + \Delta t \partial_t (\rho_x - \rho_y) = (\rho_x - \rho_y)^* - \Delta t \sum_j (M_B)_{1,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + O(\Delta t^2), \quad (4.35)$$

$$j_x + \Delta t \partial_t j_x = j_x^* - \Delta t \sum_j (M_B)_{2,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + O(\Delta t^2), \quad (4.36)$$

$$j_y + \Delta t \partial_t j_y = j_y^* - \Delta t \sum_j (M_B)_{3,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + O(\Delta t^2), \quad (4.37)$$

$$m_k + \Delta t \partial_t m_k = m_k^* - \Delta t \sum_j (M_B)_{k+1,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + O(\Delta t^2), \quad (4.38)$$

pour $k = \{3, 4, 5, 6\}$,

$$m_8 + \Delta t \partial_t m_8 = m_8^* - \Delta t \sum_j (M_B)_{8,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + O(\Delta t^2). \quad (4.39)$$

Pour les moments conservés on a : $\rho^* = \rho$, $(\rho_x - \rho_y)^* = (\rho_x - \rho_y)$, $j_x^* = j_x$ et $j_y^* = j_y$. Les équations (4.34), (4.35), (4.36) et (4.37) donnent :

$$\partial_t \rho + \sum_j (M_B)_{0,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} = O(\Delta t), \quad (4.40)$$

$$\partial_t (\rho_x - \rho_y) + \sum_j (M_B)_{1,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} = O(\Delta t), \quad (4.41)$$

$$\partial_t j_x + \sum_j (M_B)_{2,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} = O(\Delta t), \quad (4.42)$$

$$\partial_t j_y + \sum_j (M_B)_{3,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} = O(\Delta t). \quad (4.43)$$

Or $\sum_j (M_B)_{0,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} = \partial_x \sum_j v_j^x f_j^{eq} + \partial_y \sum_j v_j^y f_j^{eq} = \partial_x j_x + \partial_y j_y$, ainsi l'équation (4.40) nous donne :

$$\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y = O(\Delta t). \quad (4.44)$$

Pour l'équation (4.41), il faut calculer :

$$\begin{aligned} \sum_j (M_B)_{1,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} &= \partial_x (\lambda(a_1 + a_2)(f_1^{eq} - f_3^{eq}) + \lambda a_3(f_5^{eq} - f_6^{eq} - f_7^{eq} + f_8^{eq})) + \\ &+ \partial_y (\lambda(a_1 - a_2)(f_2^{eq} - f_4^{eq}) + \lambda a_3(f_5^{eq} + f_6^{eq} - f_7^{eq} - f_8^{eq})), \end{aligned}$$

or

$$\begin{aligned} \lambda(a_1 + a_2)(f_1^{eq} - f_3^{eq}) + \lambda a_3(f_5^{eq} - f_6^{eq} - f_7^{eq} + f_8^{eq}) &= \\ = \lambda(\gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4 + \gamma_7)(f_1^{eq} - f_3^{eq}) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \lambda(\gamma_\rho + 2\gamma_3 + \gamma_4)(f_5^{eq} - f_6^{eq} - f_7^{eq} + f_8^{eq}) = \\
 & = \lambda\left((\gamma_\rho + \gamma_3 + \frac{\gamma_7}{3}) - 2(\gamma_3 + \gamma_4 - \frac{\gamma_7}{3})\right)(f_1^{eq} - f_3^{eq}) + \\
 & + \lambda\left((\gamma_\rho + \gamma_3 + \frac{\gamma_7}{3}) + (\gamma_3 + \gamma_4 - \frac{\gamma_7}{3})\right)(f_5^{eq} - f_6^{eq} - f_7^{eq} + f_8^{eq}) = \\
 & = \lambda\left(\gamma_\rho + \gamma_3 + \frac{\gamma_7}{3}\right)(f_1^{eq} - f_3^{eq} + f_5^{eq} - f_6^{eq} - f_7^{eq} + f_8^{eq}) + \\
 & + \lambda\left(\gamma_3 + \gamma_4 - \frac{\gamma_7}{3}\right)(-2(f_1^{eq} - f_3^{eq}) + f_5^{eq} - f_6^{eq} - f_7^{eq} + f_8^{eq}) = \\
 & = \left(\gamma_\rho + \gamma_3 + \frac{\gamma_7}{3}\right)j_x + \left(\gamma_3 + \gamma_4 - \frac{\gamma_7}{3}\right)\lambda m_5^{eq}
 \end{aligned}$$

de même on a :

$$\begin{aligned}
 & \lambda(a_1 - a_2)(f_2^{eq} - f_4^{eq}) + \lambda a_3(f_5^{eq} + f_6^{eq} - f_7^{eq} - f_8^{eq}) \\
 & = \left(\gamma_\rho + \gamma_3 - \frac{\gamma_7}{3}\right)j_y + \left(\gamma_3 + \gamma_4 + \frac{\gamma_7}{3}\right)\lambda m_6^{eq}
 \end{aligned}$$

L'équation (4.41) s'écrit en remplaçant m_5^{eq} et m_6^{eq} par leur valeur (4.4) et (4.5) :

$$\partial_t(\rho_x - \rho_y) + \left((\gamma_\rho + \gamma_3 + \frac{\gamma_7}{3}) + c_1(\gamma_3 + \gamma_4 - \frac{\gamma_7}{3})\right)\partial_x j_x + \quad (4.45)$$

$$+ \left((\gamma_\rho + \gamma_3 - \frac{\gamma_7}{3}) + c_2(\gamma_3 + \gamma_4 + \frac{\gamma_7}{3})\right)\partial_y j_y = O(\Delta t). \quad (4.46)$$

Or $(\gamma_\rho + \gamma_3 + \frac{\gamma_7}{3}) + c_1(\gamma_3 + \gamma_4 - \frac{\gamma_7}{3}) = C_5$ (voir (4.21)) et $(\gamma_\rho + \gamma_3 - \frac{\gamma_7}{3}) + c_2(\gamma_3 + \gamma_4 + \frac{\gamma_7}{3}) = C_8$ (voir (4.24)). En remplaçant c_1 par (4.25) et c_2 (4.26), on a $C_5 = 1$ et $C_8 = -1$. D'où l'équation (4.46) devient :

$$\partial_t(\rho_x - \rho_y) + \partial_x j_x - \partial_y j_y = O(\Delta t). \quad (4.47)$$

Pour l'équation (4.42), il faut calculer :

$$\begin{aligned}
 \sum_j (M_B)_{2,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} & = \lambda^2 \partial_x (f_1^{eq} + f_3^{eq} + f_5^{eq} + f_6^{eq} + f_7^{eq} + f_8^{eq}) + \\
 & + \lambda^2 \partial_y (f_5^{eq} - f_6^{eq} + f_7^{eq} - f_8^{eq})
 \end{aligned}$$

Or $(f_5^{eq} - f_6^{eq} + f_7^{eq} - f_8^{eq}) = m_8^{eq} = 0$ (voir (4.6)) et

$$\begin{aligned}
 \lambda^2 (f_1^{eq} + f_3^{eq} + f_5^{eq} + f_6^{eq} + f_7^{eq} + f_8^{eq}) & = \\
 = \frac{\lambda^2}{6} (4\rho + m_3^{eq} + 3(f_1^{eq} - f_2^{eq} + f_3^{eq} - f_4^{eq})), & \quad (4.48)
 \end{aligned}$$

(voir la preuve de la proposition 7). Il reste alors à calculer :

$$\begin{aligned}
 (f_1^{eq} - f_2^{eq} + f_3^{eq} - f_4^{eq}) & = \\
 = \frac{1}{\gamma_7} ((\rho_x - \rho_y) - \gamma_\rho \rho - \gamma_3 m_3^{eq} - \gamma_4 m_4^{eq}) &
 \end{aligned}$$

En remplaçant m_3^{eq} par $a_x \frac{\rho+(\rho_x-\rho_y)}{2} + a_y \frac{\rho-(\rho_x-\rho_y)}{2}$ et m_4^{eq} par $c_x \frac{\rho+(\rho_x-\rho_y)}{2} + c_y \frac{\rho-(\rho_x-\rho_y)}{2}$, voir (4.2) et (4.3), on conclut alors :

$$\begin{aligned} \lambda^2(f_1^{eq} + f_3^{eq} + f_5^{eq} + f_6^{eq} + f_7^{eq} + f_8^{eq}) &= \\ &= \frac{\lambda^2}{6} \left[\left(4 + \frac{a_x + a_y}{2} - \frac{3}{\gamma_7} (\gamma_\rho + \gamma_3 \frac{a_x + a_y}{2} + \gamma_4 \frac{c_x + c_y}{2}) \right) \rho + \right. \\ &+ \left. \left(\frac{a_x - a_y}{2} + \frac{3}{\gamma_7} (1 - (\gamma_3 \frac{a_x - a_y}{2} + \gamma_4 \frac{c_x - c_y}{2})) \right) (\rho_x - \rho_y) \right] \\ &= \lambda^2 [A_3 \rho + A_4 (\rho_x - \rho_y)] \end{aligned}$$

où les quantités A_3 et A_4 sont données respectivement par (4.11) et (4.12). En remplaçant $a_{x,y}$ et $c_{x,y}$ par leur valeur on trouve alors : $A_3 = c_s^2$ et $A_4 = 0$. On conclut alors :

$$\sum_j (M_B)_{2,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} = \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho$$

et l'équation (4.42) devient :

$$\partial_t j_x + \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho = O(\Delta t). \quad (4.49)$$

Pour l'équation (4.43), il faut calculer :

$$\begin{aligned} \sum_j (M_B)_{3,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} &= \lambda^2 \partial_x (f_5^{eq} - f_6^{eq} + f_7^{eq} - f_8^{eq}) + \\ &+ \lambda^2 \partial_y (f_2^{eq} + f_3^{eq} + f_5^{eq} + f_6^{eq} + f_7^{eq} + f_8^{eq}) \end{aligned}$$

De même on a $f_5^{eq} - f_6^{eq} + f_7^{eq} - f_8^{eq} = m_8^{eq} = 0$ (voir (4.6)) et

$$\begin{aligned} \lambda^2(f_2^{eq} + f_4^{eq} + f_5^{eq} + f_6^{eq} + f_7^{eq} + f_8^{eq}) &= \\ &= \frac{\lambda^2}{6} (4\rho + m_3^{eq} - 3(f_1^{eq} - f_2^{eq} + f_3^{eq} - f_4^{eq})), \end{aligned} \quad (4.50)$$

(voir la preuve de la proposition 7). On remarque alors que la quantité (4.50) comprend les mêmes termes que (4.48) à un signe moins près. On fait alors les mêmes calculs et on trouve :

$$\lambda^2(f_2^{eq} + f_4^{eq} + f_5^{eq} + f_6^{eq} + f_7^{eq} + f_8^{eq}) = \lambda^2(B_3 \partial_y \rho + B_4 \partial_y (\rho_x - \rho_y)). \quad (4.51)$$

où les quantités B_3 et B_4 sont données respectivement par (4.13) et (4.14). En remplaçant $a_{x,y}$ et $c_{x,y}$ par leur valeur on trouve alors : $B_3 = c_s^2$ et $B_4 = 0$. On conclut alors que l'équation (4.43) devient :

$$\partial_t j_y + \lambda^2 c_s^2 \partial_y \rho = O(\Delta t). \quad (4.52)$$

Ainsi on a le système d'équations équivalentes (4.44), (4.47), (4.49), et (4.52) d'ordre un en Δt du schéma BRB. Ce système est équivalent au système d'équations de Béranger (4.29). $\square$

Remarque 16 *A la différence du schéma D2Q9 classique défini dans le chapitre 1 où les coefficients d'équilibre des moments m_4 , m_5 et m_6 ne jouent pas de rôle dans les équations macroscopiques d'ordre un en Δt (voir la proposition 7), on remarque que pour le schéma BRB les coefficients d'équilibre des moments m_4 , m_5 et m_6 apparaissent dans les équations macroscopiques d'ordre un en Δt (voir les équations (4.7), (4.8), (4.9) et (4.10)).*

2 Propriétés de dissipation du milieu non absorbant

Pour voir les propriétés de dissipation de notre schéma D2Q9 BRB non absorbant (*i.e* $\sigma = 0$), il suffit de déterminer les équations équivalentes à l'ordre deux en Δt .

Proposition 22 Equations équivalentes à l'ordre 2 du schéma BRB.

Le schéma BRB sans absorption défini dans la section 1, en prenant $s_3 = s_4$, $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ et $\gamma_8 = 0$ admet à l'ordre deux en Δt le système d'équations équivalentes suivant :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = O(\Delta t^2), \\ & \frac{\partial j_x}{\partial t} - \frac{\lambda^2 \Delta t (4\gamma_7 - 1)}{6\gamma_7} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 j_x}{\partial x^2} - \\ & \quad - \frac{\lambda^2 \Delta t (3(\gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4 + \gamma_7) - 1)}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 j_x}{\partial y^2} - \\ & \quad - \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left[\frac{3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7(6(\gamma_4 - \gamma_\rho) + 4\gamma_7 - 1)}{2\gamma_7(\gamma_7 + 3(\gamma_3 + \gamma_4))} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{3(\gamma_3 - \gamma_\rho + 2\gamma_4 + \gamma_7) - 1}{\gamma_7 + 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \right] \frac{\partial^2 j_y}{\partial x \partial y} + \frac{\lambda^2}{3} \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t^2), \\ & \frac{\partial j_y}{\partial t} - \frac{\lambda^2 \Delta t (2\gamma_7 + 1)}{3\gamma_7} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 j_y}{\partial y^2} - \\ & \quad - \frac{\lambda^2 \Delta t (3(-\gamma_\rho + \gamma_3 + 3\gamma_4 + \gamma_7) - 1)}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 j_y}{\partial x^2} - \\ & \quad - \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left[\frac{3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7(3(\gamma_\rho - \gamma_4) + 2\gamma_7 - 2)}{\gamma_7(\gamma_7 - 3(\gamma_3 + \gamma_4))} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) + \right. \\ & \quad \left. + \frac{3(\gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4 + \gamma_7) - 1}{\gamma_7 - 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \right] \frac{\partial^2 j_x}{\partial x \partial y} + \frac{\lambda^2}{3} \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t^2), \end{aligned}$$

On note alors que ce modèle n'est pas isotrope.

Preuve: Pour retrouver les équations macroscopiques du schéma BRB d'ordre 2, il suffit d'utiliser la méthode de l'équation équivalente. On a à l'ordre un en Δt (voir la preuve de la proposition 21) :

$$\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y = O(\Delta t), \quad (4.53)$$

$$\partial_t(\rho_x - \rho_y) + \partial_x j_x - \partial_y j_y = O(\Delta t), \quad (4.54)$$

$$\partial_t j_x + \frac{\lambda^2}{3} \partial_x \rho = O(\Delta t), \quad (4.55)$$

$$\partial_t j_y + \frac{\lambda^2}{3} \partial_y \rho = O(\Delta t). \quad (4.56)$$

Pour l'ordre deux on va appliquer la proposition 3 en tenant compte de la nouvelle numérotation et du nombre de moments conservés. Il en résulte :

$$\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y = O(\Delta t^2), \quad (4.57)$$

$$\partial_t j_x + \frac{\lambda^2}{3} \partial_x \rho - \Delta t \left(\sum_{k=4}^8 \left(\frac{1}{\tilde{s}_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{x\beta} \partial_\beta \tilde{\theta}_k \right) = O(\Delta t^2) \quad (4.58)$$

$$\partial_t j_y + \frac{\lambda^2}{3} \partial_y \rho - \Delta t \left(\sum_{k=4}^8 \left(\frac{1}{\tilde{s}_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{y\beta} \partial_\beta \tilde{\theta}_k \right) = O(\Delta t^2), \quad (4.59)$$

où $\tilde{s}_4 = s_3$, $\tilde{s}_5 = s_4$, $\tilde{s}_6 = s_5$, $\tilde{s}_7 = s_6$, $\tilde{s}_8 = s_8$, $\Lambda_k^{\alpha\beta} \equiv \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (M_B^{-1})_{j,k}$ et

$$\tilde{\theta}_4 = \left(\partial_t m_3^{eq} + \sum_j (M_B)_{4,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right), \quad (4.60)$$

$$\tilde{\theta}_5 = \left(\partial_t m_4^{eq} + \sum_j (M_B)_{5,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right), \quad (4.61)$$

$$\tilde{\theta}_6 = \left(\partial_t m_5^{eq} + \sum_j (M_B)_{6,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right), \quad (4.62)$$

$$\tilde{\theta}_7 = \left(\partial_t m_6^{eq} + \sum_j (M_B)_{7,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right), \quad (4.63)$$

$$\tilde{\theta}_8 = \left(\partial_t m_8^{eq} + \sum_j (M_B)_{8,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right), \quad (4.64)$$

(cf les expressions (4.38) et (4.39)). On commence par calculer les Λ_k , $k \in \{4, 5, 6, 7, 8\}$. Pour cela il suffit de calculer M_B^{-1} . Il en résulte : $\Lambda_k^{\alpha\beta} = 0$ pour $k = 6, 7$ et

$$\Lambda_4^{\alpha\beta} = \frac{\lambda^2}{6} \begin{pmatrix} 1 - \frac{3\gamma_3}{\gamma_7} & 0 \\ 0 & 1 + \frac{3\gamma_3}{\gamma_7} \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_5^{\alpha\beta} = \frac{\lambda^2}{2} \begin{pmatrix} -\frac{\gamma_4}{\gamma_7} & 0 \\ 0 & \frac{\gamma_4}{\gamma_7} \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_8^{\alpha\beta} = \lambda^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

On calcule alors les défauts de conservations $\tilde{\theta}_k$, pour $k = 4$, $k = 5$ et $k = 8$.

$$\tilde{\theta}_4 = \partial_t m_3^{eq} + \partial_x(j_x + \lambda m_5^{eq}) + \partial_y(j_y + \lambda m_6^{eq}),$$

En remplaçant m_3^{eq} , m_5^{eq} , m_6^{eq} par leur valeur (4.2), (4.4) et (4.5), on obtient :

$$\tilde{\theta}_4 = \frac{a_x + a_y}{2} \partial_t \rho + \frac{a_x - a_y}{2} \partial_t (\rho_x - \rho_y) + (1 + c_1) \partial_x j_x + (1 + c_2) \partial_y j_y,$$

Comme $a_x = a_y = 6 - 4c_s^2$ et en utilisant l'équations de conservation de masse on conclut :

$$\tilde{\theta}_4 = \left(1 + c_1 - \frac{a_x + a_y}{2}\right) \partial_x j_x + \left(1 + c_2 - \frac{a_x + a_y}{2}\right) \partial_y j_y$$

Pour $\tilde{\theta}_5$ défini par (4.61), on a :

$$\tilde{\theta}_5 = \partial_t m_4^{eq} + \partial_x(\lambda m_5^{eq}) + \partial_y(\lambda m_6^{eq}).$$

En remplaçant m_4^{eq} , m_5^{eq} , m_6^{eq} par leur valeur (4.3), (4.4) et (4.5), on obtient :

$$\tilde{\theta}_5 = \frac{c_x + c_y}{2} \partial_t \rho + \frac{c_x - c_y}{2} \partial_t (\rho_x - \rho_y) + c_1 \partial_x j_x + c_2 \partial_y j_y.$$

Puis on remplace c_x et c_y par leur valeur (voir proposition 1) et en utilisant l'équation de conservation de masse et l'équation (4.47) on conclut :

$$\tilde{\theta}_5 = \left(c_1 - \frac{(4 - 6c_s^2)\gamma_3 - \gamma_\rho}{\gamma_4} - \frac{1}{\gamma_4}\right) \partial_x j_x + \left(c_2 - \frac{(4 - 6c_s^2)\gamma_3 - \gamma_\rho}{\gamma_4} + \frac{1}{\gamma_4}\right) \partial_y j_y,$$

Finalement pour le défaut de conservation $\tilde{\theta}_8$ donné par (4.64), on a

$$\tilde{\theta}_8 = \partial_t m_8^{eq} + \partial_x \left(\frac{2}{3} j_y + \frac{\lambda}{3} m_6^{eq}\right) + \partial_y \left(\frac{2}{3} j_x + \frac{\lambda}{3} m_5^{eq}\right),$$

en utilisant le fait que $m_8^{eq} = 0$ et en remplaçant m_5^{eq} , m_6^{eq} données par les expressions (4.4), (4.5), on conclut :

$$\tilde{\theta}_8 = \frac{2 + c_2}{3} \partial_x j_y + \frac{2 + c_1}{3} \partial_y j_x.$$

On remplace les $\Lambda_k^{\alpha\beta}$ et $\tilde{\theta}_k$ par leur valeur dans les équations (4.57), (4.58) et (4.59) on trouve :

$$\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y = O(\Delta t^2), \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned}
\partial_t j_x &+ \frac{\lambda^2}{3} \partial_x \rho - \Delta t \left(\frac{\lambda^2}{6} \left[\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right] \left(1 - \frac{3\gamma_3}{\gamma_7} \right) \left(1 + c_1 - \frac{a_x + a_y}{2} \right) - \right. \\
&- \frac{\lambda^2 \gamma_4}{2\gamma_7} \left[\frac{1}{s_4} - \frac{1}{2} \right] \left(c_1 - \frac{(4 - 6c_s^2)\gamma_3 - \gamma_\rho + 1}{\gamma_4} \right) \partial_x^2 j_x - \\
&- \Delta t \left(\frac{\lambda^2}{6} \left[\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right] \left(1 - \frac{3\gamma_3}{\gamma_7} \right) \left(1 + c_2 - \frac{a_x + a_y}{2} \right) \right. \\
&- \frac{\lambda^2 \gamma_4}{2\gamma_7} \left[\frac{1}{s_4} - \frac{1}{2} \right] \left(c_2 - \frac{(4 - 6c_s^2)\gamma_3 - \gamma_\rho - 1}{\gamma_4} \right) + \lambda^2 \left[\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right] \frac{2 + c_2}{3} \Big) \partial_{xy} j_y - \\
&- \Delta t \left(\lambda^2 \left[\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right] \frac{2 + c_1}{3} \right) \partial_y^2 j_x = O(\Delta t^2). \tag{4.66}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\partial_t j_y &+ \frac{\lambda^2}{3} \partial_x \rho - \Delta t \left(\frac{\lambda^2}{6} \left[\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right] \left(1 + \frac{3\gamma_3}{\gamma_7} \right) \left(1 + c_1 - \frac{a_x + a_y}{2} \right) + \right. \\
&+ \frac{\lambda^2 \gamma_4}{2\gamma_7} \left[\frac{1}{s_4} - \frac{1}{2} \right] \left(c_1 - \frac{(4 - 6c_s^2)\gamma_3 - \gamma_\rho + 1}{\gamma_4} + \lambda^2 \left[\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right] \frac{2 + c_1}{3} \right) \partial_{xy}^2 j_x - \\
&- \Delta t \left(\frac{\lambda^2}{6} \left[\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right] \left(1 + \frac{3\gamma_3}{\gamma_7} \right) \left(1 + c_2 - \frac{a_x + a_y}{2} \right) + \right. \\
&+ \frac{\lambda^2 \gamma_4}{2\gamma_7} \left[\frac{1}{s_4} - \frac{1}{2} \right] \left(c_2 - \frac{(4 - 6c_s^2)\gamma_3 - \gamma_\rho - 1}{\gamma_4} \right) \Big) \partial_y^2 j_y - \\
&- \Delta t \left(\lambda^2 \left[\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right] \frac{2 + c_2}{3} \right) \partial_x^2 j_y = O(\Delta t^2). \tag{4.67}
\end{aligned}$$

On remplace ensuite a_x , a_y , c_1 , c_2 par leurs valeurs données dans la proposition 21 et on prend $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ et $s_3 = s_4$ dans les équations (4.66) et (4.67) ce qui conduit à :

$$\frac{\partial j_x}{\partial t} + \lambda^2 \Delta t \left(A_{xx} \frac{\partial^2 j_x}{\partial x^2} + A_{yy} \frac{\partial^2 j_x}{\partial y^2} + A_{xy} \frac{\partial^2 j_y}{\partial x \partial y} \right) + \frac{\lambda^2}{3} \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t^2), \tag{4.68}$$

$$\frac{\partial j_y}{\partial t} + \lambda^2 \Delta t \left(B_{xx} \frac{\partial^2 j_y}{\partial x^2} + B_{yy} \frac{\partial^2 j_y}{\partial y^2} + B_{xy} \frac{\partial^2 j_x}{\partial x \partial y} \right) + \frac{\lambda^2}{3} \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t^2), \tag{4.69}$$

avec

$$\begin{aligned}
A_{xx} &= -\frac{1}{6} \frac{4\gamma_7 - 1}{\gamma_7} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right), \\
A_{yy} &= -\frac{1}{3} \frac{(3(\gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4 + \gamma_7) - 1)}{\gamma_7 - 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \\
A_{xy} &= -\frac{1}{3} \left[\frac{3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7(6(\gamma_4 - \gamma_\rho) + 4\gamma_7 - 1)}{2\gamma_7(\gamma_7 + 3(\gamma_3 + \gamma_4))} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{3(\gamma_3 - \gamma_\rho + 2\gamma_4 + \gamma_7) - 1}{\gamma_7 + 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \right], \\
B_{xx} &= -\frac{1}{3} \frac{(3(-\gamma_\rho + \gamma_3 + 3\gamma_4 + \gamma_7) - 1)}{\gamma_7 + 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \\
B_{yy} &= -\frac{1}{3} \frac{2\gamma_7 + 1}{\gamma_7} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right)
\end{aligned}$$

$$B_{xy} = -\frac{1}{3} \left[\frac{3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7(3(\gamma_\rho - \gamma_4) + 2\gamma_7 - 2)}{\gamma_7(\gamma_7 - 3(\gamma_3 + \gamma_4))} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) + \frac{3(\gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4 + \gamma_7) - 1}{\gamma_7 - 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \right].$$

Il nous reste à démontrer que le schéma BRB dans le cas stable n'est pas isotrope. On sait que pour les équations d'impulsion un système de viscosité isotrope s'écrit sous la forme suivante :

$$\partial_t j_x + \nu \Delta j_x + \xi \partial_x \text{div} j + c_s^2 \partial_x \rho = 0, \quad (4.70)$$

$$\partial_t j_y + \nu \Delta j_y + \xi \partial_y \text{div} j + c_s^2 \partial_y \rho = 0. \quad (4.71)$$

On réécrit ce système en développant les opérateurs Laplacien et divergence, d'où :

$$\partial_t j_x + (\nu + \xi) \partial_x^2 j_x + \nu \partial_y^2 j_y + \xi \partial_{xy} j_y + c_s^2 \partial_x \rho = 0, \quad (4.72)$$

$$\partial_t j_y + \nu \partial_x^2 j_y + (\nu + \xi) \partial_y^2 j_y + \xi \partial_{xy} j_x + c_s^2 \partial_y \rho = 0. \quad (4.73)$$

On déduit pour que le système d'équations du schéma BRB (4.68), (4.69) soit isotrope (*i. e.* on peut l'écrire soit la forme du système (4.72), (4.73)), il faut que :

$$A_{xx} = B_{yy}, \quad A_{yy} = B_{xx}, \quad A_{xy} = B_{xy} \text{ et } A_{xx} - A_{xy} = A_{yy}. \quad (4.74)$$

On calcule alors la quantité $A_{xx} - B_{yy} = \frac{1}{2\gamma_7} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right)$ qui doit être nulle d'après la première équation de (4.74). Or pour avoir $\frac{1}{2\gamma_7} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) = 0$ il faut que $s_8 = 2$ qui est une solution pour laquelle le schéma BRB n'est pas stable. Ainsi le système (4.74) n'admet pas de solution en $\gamma_\rho, \gamma_3, \gamma_4, s_3$ et s_8 qui soit stable. $\square$

Proposition 23 Anisotropie de la viscosité du schéma BRB.

Les équations équivalentes d'ordre 2 en Δt du schéma BRB sans absorption dans le cas général où $s_3 \neq s_4$, sont toujours anisotropes.

Preuve: Les équations équivalentes d'ordre deux du schéma BRB sont[†] :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = O(\Delta t^2),$$

$$\frac{\partial j_x}{\partial t} + \lambda^2 \Delta t \left(A_{xx} \frac{\partial^2 j_x}{\partial x^2} + A_{yy} \frac{\partial^2 j_x}{\partial y^2} + A_{xy} \frac{\partial^2 j_y}{\partial x \partial y} \right) + \frac{\lambda^2}{3} \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t^2),$$

$$\frac{\partial j_y}{\partial t} + \lambda^2 \Delta t \left(B_{xx} \frac{\partial^2 j_y}{\partial x^2} + B_{yy} \frac{\partial^2 j_y}{\partial y^2} + B_{xy} \frac{\partial^2 j_x}{\partial x \partial y} \right) + \frac{\lambda^2}{3} \frac{\partial(\rho_x + \rho_y)}{\partial x} = O(\Delta t^2),$$

[†]calcul fait à l'aide de Maple

avec

$$\begin{aligned}
 A_{xx} = & \frac{1}{4s_3s_4\gamma_7(3(\gamma_3 + \gamma_4) - \gamma_7)} ((4\gamma_7^2 + (-20\gamma_7 + 24\gamma_3)\gamma_3 + (30\gamma_3 - 10\gamma_7)\gamma_4 + \\
 & + ((-2 - 4\gamma_7)\gamma_7 + (6 + 24\gamma_7 - 36\gamma_3)\gamma_3 + (12\gamma_7 - 36\gamma_3)\gamma_4)c_s^2 + \\
 & + (2\gamma_7 - 6\gamma_3)\gamma_\rho)s_4 + ((8\gamma_7 - 24\gamma_3)\gamma_3 + (-30\gamma_3 - 2\gamma_7)\gamma_4 + \\
 & + ((-12\gamma_7 + 36\gamma_3)\gamma_3 + (36\gamma_3 + 6)\gamma_4)c_s^2 + (6\gamma_3 - 2\gamma_7)\gamma_\rho \\
 & + (-2\gamma_7^2 + 6\gamma_7\gamma_3 + 6\gamma_7\gamma_4 + ((1 + 2\gamma_7)\gamma_7 + (-3 - 6\gamma_7)\gamma_3 + \\
 & + (-3 - 6\gamma_7)\gamma_4)c_s^2)s_4)s_3)
 \end{aligned}$$

$$A_{yy} = -\frac{1}{3} \frac{(3(\gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4 + \gamma_7) - 1)}{\gamma_7 - 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}\right)$$

$$\begin{aligned}
 A_{xy} = & \frac{1}{4s_3s_4s_8\gamma_7(3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7)} ((-4\gamma_7 + 4\gamma_\rho - 4\gamma_3 + 4c_s^2 - 8\gamma_4)\gamma_7s_4s_3 + \\
 & + ((-4\gamma_7^2 + (4\gamma_7 + 24\gamma_3)\gamma_3 + (30\gamma_3 - 10\gamma_7)\gamma_4 + ((2 + 4\gamma_7)\gamma_7 + \\
 & + (-6 - 36\gamma_3)\gamma_3 + (-36\gamma_3 + 12\gamma_7)\gamma_4)c_s^2 + (-6\gamma_3 + 2\gamma_7)\gamma_\rho)s_4 + \\
 & + ((-8\gamma_7 - 24\gamma_3)\gamma_3 + (2\gamma_7 - 30\gamma_3)\gamma_4 + ((12\gamma_7 + 36\gamma_3)\gamma_3 + \\
 & + (-6 + 36\gamma_3)\gamma_4)c_s^2 + (2\gamma_7 + 6\gamma_3)\gamma_\rho + (4\gamma_7^2 + 4\gamma_7\gamma_3 + 8\gamma_7\gamma_4 \\
 & + ((-3 - 2\gamma_7)\gamma_7 + (-6\gamma_7 + 3)\gamma_3 + (-6\gamma_7 + 3)\gamma_4)c_s^2 - 4\gamma_7\gamma_\rho)s_4)s_3)s_8)
 \end{aligned}$$

$$B_{xx} = -\frac{1}{3} \frac{(3(-\gamma_\rho + \gamma_3 + 3\gamma_4 + \gamma_7) - 1)}{\gamma_7 + 3(\gamma_3 + \gamma_4)} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2}\right)$$

$$\begin{aligned}
 B_{yy} = & \frac{1}{4s_3s_4\gamma_7(3(\gamma_3 + \gamma_4) + \gamma_7)} ((-4\gamma_7^2 + (-20\gamma_7 - 24\gamma_3)\gamma_3 + (-10\gamma_7 - 30\gamma_3)\gamma_4 + \\
 & + ((2 + 4\gamma_7)\gamma_7 + (24\gamma_7 + 6 + 36\gamma_3)\gamma_3 + (12\gamma_7 + 36\gamma_3)\gamma_4)c_s^2 + \\
 & + (2\gamma_7 + 6\gamma_3)\gamma_1)s_4 + (-2\gamma_7 + (-6 + 8\gamma_7 + 24\gamma_3)\gamma_3 + (-2\gamma_7 + 30\gamma_3 - 6)\gamma_4 + \\
 & + ((-12\gamma_7 - 36\gamma_3)\gamma_3 + (6 - 36\gamma_3)\gamma_4)c_s^2 + (-6\gamma_3 - 2\gamma_7)\gamma_1 + ((1 + 2\gamma_7)(\gamma_7 + \\
 & + 3(\gamma_3 + \gamma_4)) + ((-\gamma_7 - 3(\gamma_3 + \gamma_4))(1 + 2\gamma_7))c_s^2)s_4)s_3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 B_{xy} = & \frac{1}{4s_3s_4s_8\gamma_7(3(\gamma_3 + \gamma_4) - \gamma_7)} ((-8\gamma_4 - 4\gamma_3 - 4c_s^2 + 4\gamma_7 + 4\gamma_1)s_4s_3\gamma_7 + \\
 & + ((4\gamma_7^2 + (4\gamma_7 - 24\gamma_3)\gamma_3 + (-10\gamma_7 - 30\gamma_3)\gamma_4 + ((-2 - 4\gamma_7)\gamma_7 + \\
 & + (-6 + 36\gamma_3)\gamma_3 + (12\gamma_7 + 36\gamma_3)\gamma_4)c_s^2 + (2\gamma_7 + 6\gamma_3)\gamma_1)s_4 + (-2\gamma_7 + \\
 & + (-8\gamma_7 + 6 + 24\gamma_3)\gamma_3 + (6 + 30\gamma_3 + 2\gamma_7)\gamma_4 + ((12\gamma_7 - 36\gamma_3)\gamma_3 + \\
 & + (-36\gamma_3 - 6)\gamma_4)c_s^2 + (2\gamma_7 - 6\gamma_3)\gamma_1 + ((1 - 4\gamma_7)\gamma_7 + (-3 + 4\gamma_7)\gamma_3 + \\
 & + (8\gamma_7 - 3)\gamma_4 + ((3 + 2\gamma_7)\gamma_7 + 3\gamma_3\gamma_4(1 - 2\gamma_7))c_s^2 - 4\gamma_7\gamma_1)s_4)s_3)s_8) .
 \end{aligned}$$

On résout alors le système d'équations (4.74). La relation $A_{xx} = B_{yy}$ nous donne :

$$\gamma_\rho = \frac{1}{(-4\gamma_7^2 + 36\gamma_3^2 + 36\gamma_3\gamma_4)(s_3 - s_4)} ((\gamma_7 + 3\gamma_3 + 3\gamma_4)(-\gamma_7 + 3\gamma_3 + 3\gamma_4)s_4 -$$

$$\begin{aligned}
 & - 18\gamma_4^2 + 144\gamma_3^3 + 324\gamma_3^2\gamma_4 + 2\gamma_7^2 - 12c_s^2\gamma_4\gamma_7 - 216c_s^2\gamma_3\gamma_4^2 + 4\gamma_4\gamma_7^2 + 24c_s^2\gamma_3\gamma_7^2 - \\
 & - 36\gamma_3\gamma_4 - 18\gamma_3^2 + 180\gamma_3\gamma_4^2 - 16\gamma_3\gamma_7^2 - 432c_s^2\gamma_3^2\gamma_4 - 216c_s^2\gamma_3^3)s_3 + (12c_s^2\gamma_4\gamma_7 + \\
 & + 216c_s^2\gamma_3\gamma_4^2 + 216c_s^2\gamma_3^3 + 16\gamma_3\gamma_7^2 - 180\gamma_3\gamma_4^2 + 432c_s^2\gamma_3^2\gamma_4 - 144\gamma_3^3 - 24c_s^2\gamma_3\gamma_7^2 - \\
 & - 4\gamma_4\gamma_7^2 - 324\gamma_3^2\gamma_4)s_4
 \end{aligned}$$

Ensuite l'équation $A_{yy} = B_{xx}$ nous donne :

$$\gamma_7 = \frac{12\gamma_3c_s^2(s_3 - s_4)}{24\gamma_3(1 - c_s^2)(s_3 - s_4) + s_3(s_4 - 2)}.$$

L'équation $A_{xy} = B_{xy}$ nous donne :

$$\gamma_3 = \frac{s_3(2 - s_4)}{24(s_3 - s_4)(c_s - 1)}.$$

Il ne nous reste que les $s_{3,4,8}$ comme paramètres libres. Finalement on résout $A_{xx} - A_{xy} = A_{yy}$ par rapport à s_8 , on trouve :

$$s_8 = \frac{4s_3}{s_3(3 - c_s^2) + 2(c_s^2 - 1)} \equiv \Phi(s_3). \quad (4.75)$$

Or Φ est décroissante en s_3 pour $c_s^2 < 1$ et $\Phi(2) = 2$. On en déduit que si on fixe $s_3 \in]0, 2[$ alors $s_8 > 2$. Donc le système d'équation 4.74 n'admet pas de solution pour la quelle le schéma BRB est stable. $\square$

Remarque 17 Même si on cherche les paramètres $\gamma_{\rho,3,4,7}$ et $s_{3,4,5,6,8}$, tels que le schéma BRB ait une viscosité la plus petite possible, on n'aura pas la même viscosité que le milieu D2Q9, car ce dernier est un schéma qui conduit à des coefficients de transport qui peuvent être isotrope.

3 Etude expérimentale de stabilité

Pour étudier la stabilité du schéma BRB (défini dans la proposition 21) sans absorption (*i. e.* $\sigma = 0$), on va utiliser la méthode d'analyse de Von Neumann (comme dans le chapitre 1 section 5). Cette analyse consiste à chercher les f solution sous la forme $f_i(x, t) = \phi_i e^{i(\omega t - k \cdot x)}$ au moyen de la transformée de Fourier. Celle-ci est donnée par la proposition 15 :

$$f(x_i, t + \Delta t) = G(p, q)f(x_i, t), \quad (4.76)$$

où $p = e^{ik_x \Delta x}$, $q = e^{ik_y \Delta x}$ et $G(p, q) = A(p, q)M_B^{-1}CM_B$. La matrice d'advection $A(p, q)$ est donnée par (1.87) :

$$A = \text{diag} \left(1, p, q, \frac{1}{p}, \frac{1}{q}, pq, \frac{q}{p}, \frac{1}{pq}, \frac{p}{q} \right),$$

la matrice des moments M_B est donnée par :

$$M_B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ a_0 & a_1+a_2 & a_1-a_2 & a_1+a_2 & a_1-a_2 & a_3+a_4 & a_3-a_4 & a_3-a_4 & a_3+a_4 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.77)$$

où $a_0 = \gamma_\rho - 4(\gamma_3 - \gamma_4)$, $a_1 = \gamma_\rho - \gamma_3 - 2\gamma_4$, $a_2 = \gamma_7$, $a_3 = \gamma_\rho + 2\gamma_3 + \gamma_4$ et $a_4 = \gamma_8$. La matrice M_B^{-1} est l'inverse de la matrice de M_B . On note ici qu'on a changé l'ordre de moments, on a mis les moments conservés en premier :

$$\begin{aligned} - \rho &= \rho_x + \rho_y = \sum_{j=0}^8 f_j, \\ - \rho_x - \rho_y &= a_0 f_0 + (a_1 + a_2)[f_1 + f_3] + (a_1 - a_2)[f_2 + f_4] + \\ &\quad + (a_3 + a_4)[f_5 + f_8] + (a_3 - a_4)[f_6 + f_7], \\ - j_x \text{ et } j_y, \end{aligned}$$

puis les moments non conservés : m_3, m_4, m_5, m_6 et m_8 .

La matrice C est donnée par :

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_x s_3 & \frac{a_x - a_y}{2} s_3 & 0 & 0 & 1 - s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_x s_4 & \frac{c_x - c_y}{2} s_4 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{c_1}{\lambda} s_5 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{c_2}{\lambda} s_6 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 - s_8 \end{pmatrix}, \quad (4.78)$$

où a_x, a_y, c_x, c_y, c_1 et c_2 sont donnés par (4.29), (4.29) et (4.29).

Si l'opérateur G est diagonalisable et toutes les valeurs propres sont de module plus petit que 1, alors l'algorithme est stable (voir la proposition ??). On fait varier le module du vecteur d'onde k entre 0 et π et son argument entre 0 et π , et on calcule numériquement les valeurs propres de la matrice $G(p, q)$, pour un jeu de paramètres : $s_k, \gamma_\rho, \gamma_3, \gamma_4$ et γ_7, γ_8 donné. L'algorithme est alors stable (proposition ??) pour cette configuration si la partie réelle de $\ln(z_\alpha)$ est négative pour tout α et tout k (*i.e.* $\text{Re}(\ln z_\alpha) < 0$). On étudie numériquement, pour une vitesse du son $c_s^2 = \frac{1}{3}$, on trouve alors que l'algorithme n'est pas stable pour le premier cas où $\gamma_8 \neq 0$ et $\gamma_\rho = \gamma_3 + 2\gamma_4$ et $\gamma_7 = 1$. On se place alors dans le deuxième cas possible (*i.e.* $\gamma_8 = 0$) qui modélise les équations de Béranger

(voir la proposition 21). On trouve alors que l'algorithme est stable pour le jeu de paramètres suivant : $\gamma_7 = 1$, $\gamma_\rho = \gamma_3 + 2\gamma_4$, $\gamma_3 \in [0.88, 3.22]$, $\gamma_4 \in [0.77, 2.22]$, $s_{3,4} \in]0, 1.66[$, $s_{5,6} \in]0, 1.8[$ et $s_8 \in]0, 1.6[$.

- On note ici que pour ce schéma on a plus de contrainte sur les paramètres de relaxation s_i que dans le schéma D2Q9, en effet on ne peut plus faire tendre s_i vers la valeur 2, sinon le schéma est instable. Par contre on peut prendre $s_{3,4} \in]0, 1.75[$ sans perdre la stabilité mais il faut que $s_8 < 1.1$. De même on peut prendre $s_8 \in]0, 1.9[$ mais il faut que $s_{3,4} < 1.4$.

- Les figures 4.1 (a, b) et 4.2 (a, b) montrent que le schéma est stable pour la configuration suivante des paramètres du schéma : $\gamma_\rho = 7$, $\gamma_3 = 3$, $\gamma_4 = 2$ et $\gamma_7 = 1$. La figure 4.1 (a), est le cas particulier où on prend k parallèle à l'axe des x (*i. e.* l'argument θ du vecteur d'onde est nul). Dans ce cas on a quatre modes hydrodynamiques (modes lents) qui sont représentés par les quatre courbes qui commencent à zéro pour $|k| = 0$. Ces modes représentent les deux modes longitudinaux (deux courbes confondues pour les ondes progressives et régressives) un mode transverse et un quatrième mode qui vaut 0 pour tout $|k|$. Ce dernier mode est découplé des autres modes, cela s'interprète par le fait que lorsqu'on a une incidence normale ($\theta = 0$ argument de k) l'une des équations du système de Béranger (4.1) est nulle.

Remarque 18 *On note que notre schéma BRB est moins stable que le schéma D2Q9, c'est-à-dire qu'on dispose d'un intervalle de stabilité plus petit pour les différents coefficients de relaxation s_i (*i. e.* on ne peut pas faire tendre les s_i vers la valeur 2). Cela se traduit par une viscosité importante du schéma BRB.*

4 Absorption à l'ordre zéro

Jusqu'ici on n'a traité que le cas de Béranger sans absorption (*i. e.* $\sigma = 0$ dans les équations de Béranger (3.45)) pour étudier l'aspect non-réflexion de notre schéma BRB. Dans cette section nous allons proposer une façon de tenir compte des termes d'absorption en σ dans les équations que nous récrivons ici :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial p_x}{\partial t} + \sigma p_x + \frac{\partial j_x}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p_y}{\partial t} + \frac{j_y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \sigma j_x + c_s^2 \frac{\partial (p_x + p_y)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial (p_x + p_y)}{\partial y} = 0. \end{array} \right. \quad (4.79)$$

avec $p_x + p_y = p$ et $\sigma = 0$ en $x = 0$, et $\sigma(x) \geq 0$.

Pour des raisons de simplicité on va commencer alors par manipuler le schéma D2Q9 et introduire un terme d'absorption pour ce schéma. On se donne alors les

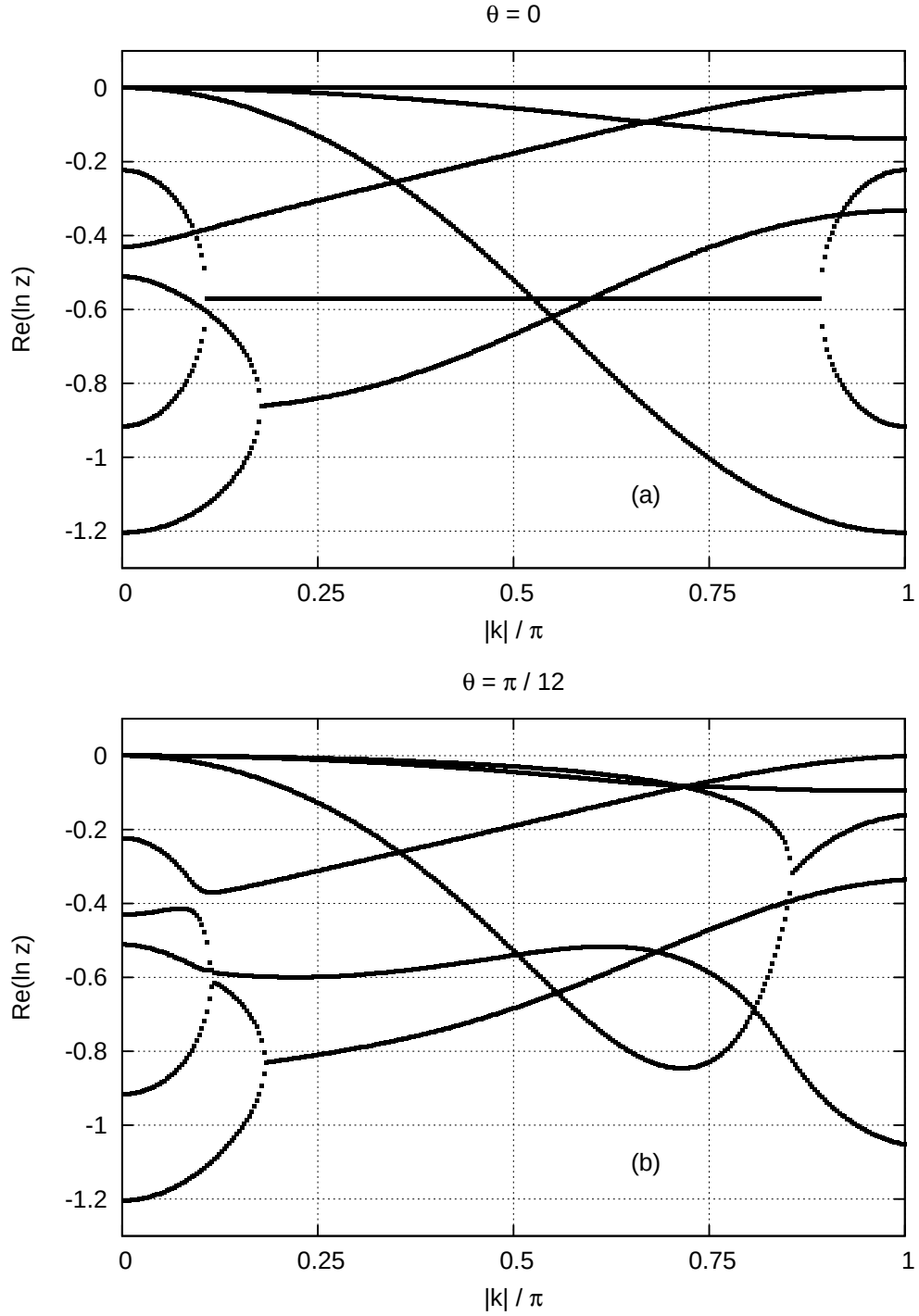


FIG. 4.1 – Partie réelle du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 BRB en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\gamma_\rho = 7$, $\gamma_3 = 3$, $\gamma_4 = 2$, $\gamma_7 = 1$ et $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 1.6$, $s_4 = 1.65$, $s_5 = 1.3$, $s_6 = 1.8$ et $s_8 = 1.4$. (a) Pour $\theta = 0$ argument du vecteur d'onde k (*i. e.* k parallèle à l'axe Ox). (b) Idem avec $\theta = \frac{\pi}{12}$.

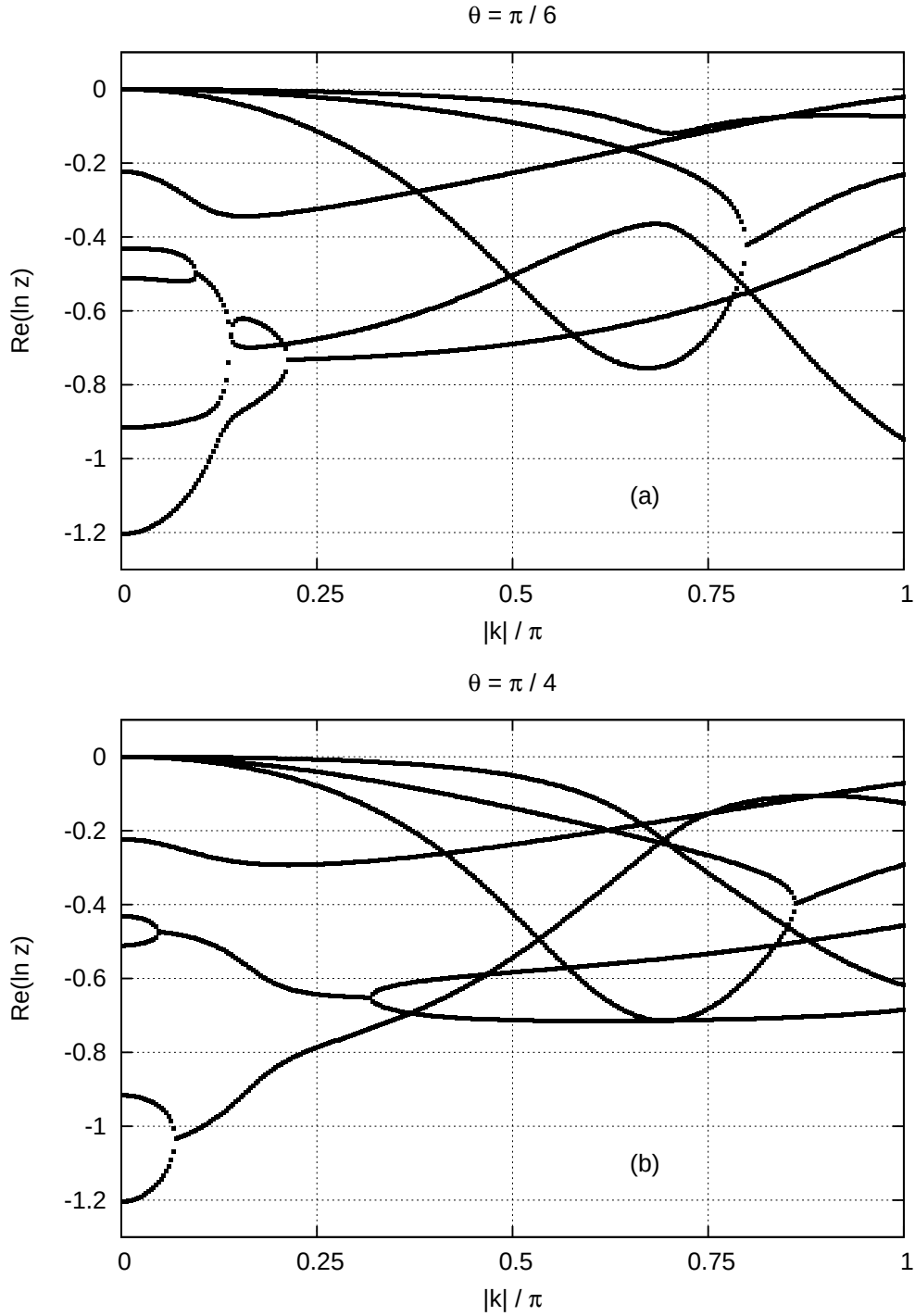


FIG. 4.2 – Partie réelle du logarithme des valeurs propres du modèle D2Q9 BRB en fonction de $|k|$. Les valeurs des paramètres sont : $\gamma_\rho = 7$, $\gamma_3 = 3$, $\gamma_4 = 2$, $\gamma_7 = 1$ et $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Les coefficients de relaxation sont : $s_3 = 1.6$, $s_4 = 1.65$, $s_5 = 1.3$, $s_6 = 1.8$ et $s_8 = 1.4$. (a) Pour $\theta = \frac{\pi}{6}$ argument du vecteur d'onde k . (b) Idem avec $\theta = \frac{\pi}{4}$.

équations suivantes (problème fortement hyperbolique) :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sigma \rho + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \sigma j_x + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (4.80)$$

où $\sigma > 0$. Pour modéliser les termes en σ du système d'équations (4.80), on se propose de changer l'étape d'advection du schéma. On remarque que pour $\sigma = 0$ dans (4.80) on retrouve les équations équivalentes d'ordre un en Δt du schéma D2Q9 linéaire (voir la proposition 7).

Proposition 24 Atténuation d'ordre zéro pour D2Q9.

Il existe une matrice $\tilde{\sigma}$:

$$\tilde{\sigma} = (\tilde{\sigma}_{k,j})_{0 \leq k,j \leq 8} = \sigma \Delta t \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.81)$$

pour modéliser les termes d'absorption en σ des équations (4.80). En effet on peut modifier l'étape d'advection du schéma de Boltzmann :

$$f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \Delta t, t) - \sum_{k=0}^8 \tilde{\sigma}_{k,j} f_k^*(x - v_k \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8.$$

Preuve: La démonstration consiste à utiliser la méthode de l'équation équivalente. En effet on va simplifier le problème et montrer qu'en modifiant l'étape d'advection du modèle D2Q9 décrit dans la proposition 7 (avec 3 moments conservés) et en prenant $\tilde{\sigma} = \sigma \text{Id}_{\mathbb{R}^9}$, $\sigma > 0$, on obtient les équations macroscopiques suivantes :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \sigma \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y = O(\Delta t), \\ \partial_t q_x + \sigma q_x + \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho = O(\Delta t), \\ \partial_t q_y + \sigma q_y + \lambda^2 c_s^2 \partial_y \rho = O(\Delta t). \end{cases} \quad (4.82)$$

En effet le développement de Taylor à l'ordre deux en Δt de l'équation du schéma :

$$f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j, t) - \sigma f_k^*(x - v_k, t),$$

nous donne :

$$f_j(x, t) + \Delta t \partial_t f_j(x, t) = (1 - \sigma) (f_j^*(x, t) - \Delta t v_j \nabla f_j^*(x, t)) + O(\Delta t^2),$$

en prenant le moment d'ordre k de cette identité, on obtient :

$$m_k + \Delta t \partial_t m_k = (1 - \sigma \Delta t) \left(m_k^* - \Delta t \sum_{j=0,8} M_{k,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^* \right) + O(\Delta t^2),$$

on utilise alors $f_j^* = f_j^{eq} + O(\Delta t)$ et en négligeant les termes en (Δt^2) , on obtient :

$$(1 - \sigma \Delta t) m_k^* - m_k = \Delta t \left(\partial_t m_k + \sum_{j=0,8} M_{k,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right) + O(\Delta t^2).$$

Il suffit alors d'écrire cette relation pour $k = \{0, 1, 2\}$, et utilisant $m_k^* = m_k$, on obtient :

$$\partial_t m_k + \sigma m_k + \partial_\beta \sum_{j=0,8} M_{k,j} v_j^\beta f_j^{eq} = O(\Delta t).$$

Ainsi on a le système (4.82).

En choisissant la matrice $\tilde{\sigma}$ définie par (4.81), on obtient les équations macroscopiques de la proposition (4.80). En effet le développement de Taylor à l'ordre deux en Δt de l'équation du schéma nous donne :

$$\begin{aligned} f_j(x, t) + \Delta t \partial_t f_j(x, t) &= (f_j^*(x, t) - \Delta t v_j \nabla f_j^*(x, t)) - \\ &- \sum_{k=0}^8 \tilde{\sigma}_{j,k} (f_k^*(x, t) - \Delta t v_k \nabla f_k^*(x, t)) + O(\Delta t^2), \end{aligned}$$

en prenant le moment d'ordre k , en utilisant $f_j^* = f_j^{eq} + O(\Delta t)$ et en négligeant les termes en (Δt^2) , on obtient :

$$m_k + \Delta t \partial_t m_k = m_k^* - \Delta t \sum_{j=0,8} M_{k,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} - \sum_{j=0}^8 M_{k,j} \sum_{l=0}^8 \tilde{\sigma}_{j,l} f_l^{eq}(x, t) + O(\Delta t^2),$$

c'est-à-dire :

$$m_k^* - m_k = \Delta t \partial_t m_k + \Delta t \sum_{j=0,8} M_{k,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \sum_{j=0}^8 (M\sigma)_{k,j} f_j^{eq}(x, t) + O(\Delta t^2), \quad (4.83)$$

où $((M\sigma)_{k,j})_{0 \leq k,j \leq 8} = M \cdot \tilde{\sigma}$ (le produit des deux matrices M et $\tilde{\sigma}$). Or le produit matriciel vaut :

$$M \cdot \tilde{\sigma} = \sigma \Delta t \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 & -2 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & -2 & 2 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.84)$$

Ainsi le terme $\sum_{j=0}^8 (M\sigma)_{k,j}^B f_j^{eq}(x, t)$ de l'équation (4.83) vaut :

- $\sigma \Delta t \rho$ pour $k = 0$,
- $\sigma \Delta t j_x$ pour $k = 1$,
- 0 pour $k = 2$.

Il suffit alors d'écrire l'équation (4.83) pour $k = \{0, 1, 2\}$, et en utilisant $m_k^* = m_k$, on obtient le système :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sigma \rho + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = O(\Delta t), \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + \sigma j_x + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = O(\Delta t), \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial y} = O(\Delta t). \end{cases} \quad (4.85)$$

qui est égal au système (4.80). □

On va maintenant changer l'étape d'advection pour le schéma BRB pour avoir les termes d'absorption en σ (voir le système (4.79)).

Proposition 25 Atténuation d'ordre zéro pour BRB.

Il existe une matrice $\tilde{\sigma}_B$:

$$\tilde{\sigma}_B = (\tilde{\sigma}_{k,j}^B)_{0 \leq k,j \leq 8} = \sigma \Delta t \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1+a_0}{4} & 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{a_3+3}{4} & \frac{a_3-1}{4} & \frac{a_3-1}{4} & \frac{a_3+3}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1+a_0}{4} & 0 & 0 & 1 & 0 & \frac{a_3-1}{4} & \frac{a_3+3}{4} & \frac{a_3+3}{4} & \frac{a_3-1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.86)$$

où $a_0 = \gamma_\rho - 4(\gamma_3 - \gamma_4)$ et $a_3 = \gamma_\rho + 2\gamma_3 + \gamma_4$ (défini dans la matrice (4.77) prise dans le cas où le schéma BRB est stable) pour modéliser les termes d'absorption en σ des équations de Béranger (4.79). En effet on peut modifier l'étape d'advection du schéma de Boltzmann :

$$f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j, t) - \sum_{k=0}^8 \tilde{\sigma}_{k,j}^B f_k^*(x - v_k, t), \quad 0 \leq j \leq 8.$$

Preuve: Pour le cas du schéma BRB (configuration stable *i. e.* $a_1 = 0$ et $a_2 = 0$ dans (4.77)), on va faire la même démonstration que pour le cas D2Q9. La démonstration consiste à utiliser la méthode de l'équation équivalente, en particulier on reprend les calculs de l'équation équivalente pour le schéma BRB (voir la démonstration de la proposition 21). En effet on écrit le développement de Taylor à l'ordre deux en Δt de l'équation du schéma BRB ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} f_j(x, t) + \Delta t \partial_t f_j(x, t) &= (f_j^*(x, t) - \Delta t v_j \nabla f_j^*(x, t)) - \\ &- \sum_{k=0}^8 \tilde{\sigma}_{j,k}^B (f_k^*(x, t) - \Delta t v_k \nabla f_k^*(x, t)) + O(\Delta t^2), \end{aligned}$$

où $(\tilde{\sigma}_{j,k}^B)_{0 \leq j,k \leq 8} \equiv \tilde{\sigma}_B$ en prenant le moment d'ordre k , en utilisant $f_j^* = f_j^{eq} + O(\Delta t)$ et en négligeant les termes en (Δt^2) , on obtient :

$$m_k + \Delta t \partial_t m_k = m_k^* - \Delta t \sum_{j=0,8} M_{k,j}^B v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} - \sum_{j=0}^8 M_{k,j}^B \sum_{l=0}^8 \tilde{\sigma}_{j,l}^B f_l^{eq}(x, t) + O(\Delta t^2),$$

c'est-à-dire :

$$m_k^* - m_k = \Delta t \partial_t m_k + \Delta t \sum_{j=0,8} M_{k,j}^B v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \sum_{j=0}^8 (M\sigma)_{k,j}^B f_j^{eq}(x, t) + O(\Delta t^2), \quad (4.87)$$

où $((M\sigma)_{k,j}^B)_{0 \leq k,j \leq 8} = M_B \cdot \tilde{\sigma}_B$ (le produit des deux matrices M_B et $\tilde{\sigma}_B$). Or le produit matriciel vaut :

$$M_B \cdot \tilde{\sigma}_B = \sigma \Delta t \begin{pmatrix} \frac{1+a_0}{2} & 1 & 0 & 1 & 0 & \frac{1+a_3}{2} & \frac{1+a_3}{2} & \frac{1+a_3}{2} & \frac{1+a_3}{2} \\ \frac{1+a_0}{2} & 1 & 0 & 1 & 0 & \frac{1+a_3}{2} & \frac{1+a_3}{2} & \frac{1+a_3}{2} & \frac{1+a_3}{2} \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1+a_0}{2} & -1 & 0 & -1 & 0 & -\frac{1+a_3}{2} & -\frac{1+a_3}{2} & -\frac{1+a_3}{2} & -\frac{1+a_3}{2} \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & -2 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.88)$$

Ainsi le terme $\sum_{j=0}^8 (M\sigma)_{k,j}^B f_j^{eq}(x, t)$ de l'équation (4.87) vaut :

- $\sigma \Delta t \frac{\rho^+(\rho_x - \rho_y)}{2} = \sigma \Delta t \rho_x$ pour $k = 0$,
- $\sigma \Delta t \frac{\rho^+(\rho_x - \rho_y)}{2} = \sigma \Delta t \rho_x$ pour $k = 1$,
- $\sigma \Delta t j_x$ pour $k = 2$.
- 0 pour $k = 3$

Il suffit alors d'écrire l'équation (4.87) pour les quatre premiers moments conservés (*i.e* $k = \{0, 1, 2, 3\}$), et en utilisant $m_k^* = m_k$, on obtient le système (4.79). $\square$

5 Analyse d'une simulation d'interface

Introduction

Dans cette section on va simuler dans un premier cas une interface entre un milieu D2Q9 de viscosité donnée et un milieu BRB avec et sans absorption. Ensuite on va changer l'interface en remplaçant le milieu BRB par un milieu D2Q9 de viscosité croissante et par un milieu D2Q9 avec un terme d'absorption d'ordre zéro.

Interface entre un milieu D2Q9 et un milieu BRB

Soit le domaine $\Omega = [0, l] \times [0, h]$ (voir la figure 4.3) composé du milieu $\Omega_- = [0, \frac{l}{2}] \times [0, h]$ acoustique et de milieu $\Omega_+ = [\frac{l}{2}, l] \times [0, h]$ de Béranger sans atténuation

(i.e. $\sigma = 0$). On impose à l'entrée de Ω_- en $x = 0$ une onde acoustique parallèle à l'axe Ox de fréquence ω . On impose des conditions aux limites périodiques en y et des conditions de rebond pur en sortie (i.e. "bounce back" voir section conditions aux limites chapitre 1). On la laisse alors se propager jusqu'au temps T avant que l'onde n'ait atteint la sortie du milieu Ω_+ en $x = l$.

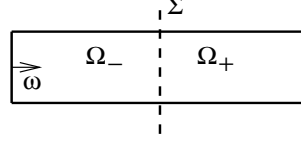


FIG. 4.3 – Domaines de propagation : Ω_- milieu acoustique et Ω_+ milieu de Béranger sans atténuation.

On discrétise les domaines Ω_+ et Ω_- par des sommets x_i avec $1 \leq i \leq 2000$ pour Ω_- et $2001 \leq i \leq 4000$ pour Ω_+ . On utilise dans Ω_- le schéma D2Q9 pour l'acoustique donné par la proposition 9, avec $\alpha_3 = -2$ (i.e. $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$), $\alpha_4 = 1$, $s_3 = 1.97$, $s_4 = 1.9$, $s_5 = s_6 = 1.7$ et $s_7 = s_8 = 1.95$. Dans le milieu Ω_+ on utilise le schéma D2Q9 BRB défini dans la proposition 21, avec $\gamma_\rho = 7$, $\gamma_3 = 3$, $\gamma_4 = 2$, $\gamma_7 = 1$, $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $s_3 = 1.6$, $s_4 = 1.6$, $s_5 = s_6 = 1.7$ et $s_8 = 1.8$. On impose à l'entrée une onde de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$. La figure 4.6 (a), montre J_x en fonction de N_x (le nombre de sites du réseau dans la direction Ox) de l'onde acoustique d'incidence normale sur l'interface se propageant dans les milieux Ω_+ et Ω_- . On remarque pour les $x_i, i > 2000$ (i.e. dans le milieu Ω_+ qui modélise la couche absorbante) on a une viscosité plus importante que pour les $x_i \leq 2000$ (voir la figure (a) 4.6).

Pour déterminer l'onde réfléchie on réalise une autre simulation dans un domaine de référence $\Omega_R = [0, l] \times [0, h]$ (voir la figure 4.4) qui a la même configuration que le domaine Ω_- . Cette simulation nous fournit la solution de référence (voir la figure 4.5).

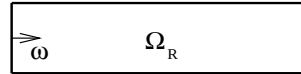
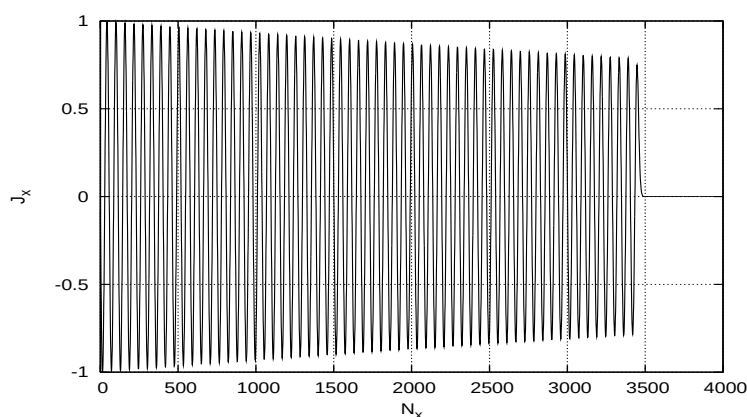


FIG. 4.4 – Domaine de référence Ω_R .

Pour voir si notre milieu Béranger génère ou non une onde réfléchie dans le milieu acoustique Ω_- , on trace la différence entre le flux J_x obtenu dans le cas test avec les deux milieux et le flux J_x obtenu par la solution de référence. La figure ((b) 4.6) montre dans le cas d'une incidence normale sur le dioptré, l'existence d'une onde réfléchie dans le domaine d'étude ("acoustique").

- On note ici que dans cette simulation on a deux différences entre les deux milieux D2Q9 acoustique et le milieu BRB :

FIG. 4.5 – Solution de référence J_x en fonction de N_x

- Une différence de viscosité qui est due au caractère non isotrope du milieu BRB, de plus à la contrainte de stabilité de ce schéma qui réduit la possibilité du choix des paramètres de relaxation s_i (voir la section 3)
- Une différence de la distribution d'équilibre. En effet dans le schéma BRB les moments à l'équilibre m_4^{eq} , m_5^{eq} et m_6^{eq} sont fixés en fonction γ_ρ , γ_3 , γ_4 , γ_7 et c_s pour satisfaire les équations de Béranger à l'ordre 1 en Δt (voir la section 1).

Dans le chapitre 5, on va étudier l'interface entre deux schémas de Boltzmann. Dans un premier cas de viscosités différentes et dans un deuxième cas de distribution d'équilibre différente. On mettra alors en évidence dans les deux cas l'existence d'une onde réfléchie.

• Milieu BRB avec absorption.

On va simuler une interface entre un milieu D2Q9 et un milieu BRB avec absorption décrit dans la proposition 25 qui consiste à changer l'étape d'advection en utilisant la matrice $\tilde{\sigma}_B$. On reprend alors la même expérience qu'on a faite ci-dessus. On garde alors le même maillage et le même milieu Ω_- . Dans le milieu Ω_+ on utilise le schéma BRB en modifiant l'étape d'advection (voir la proposition 25), avec $\gamma_\rho = 7$, $\gamma_3 = 3$, $\gamma_4 = 2$, $\gamma_7 = 1$, $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$, $s_3 = 1.6$, $s_4 = 1.6$, $s_5 = s_6 = 1.7$, $s_8 = 1.8$ et $\sigma(x_i) = 10^{-7}(x_i - 2000)^2$. La figure 4.7 (a) montre J_x en fonction de N_x de l'onde acoustique d'incidence normale sur l'interface se propageant dans les milieux Ω_+ et Ω_- . On remarque pour les $x_i, i > 2000$ (*i.e.* dans le milieu Ω_+ qui modélise la couche absorbante) que l'onde est atténuée au bout de 500 mailles.

La figure 4.7 (b) montre la différence entre le flux J_x obtenu dans le cas test avec les deux milieux et le flux J_x obtenu par la solution de référence. On a alors dans le cas d'une incidence normale sur le dioptré D2Q9-BRB avec absorption, l'existence d'une onde réfléchie dans le domaine d'étude qui est comparable à celle qui existe dans le cas où on a un milieu BRB sans absorption.

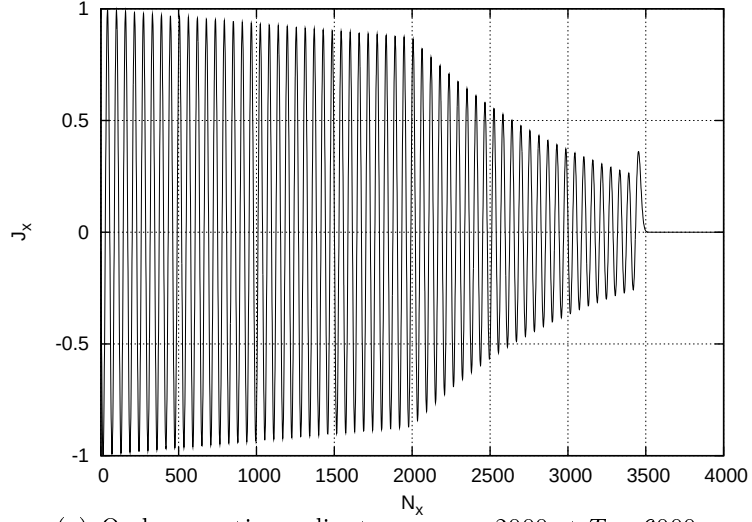
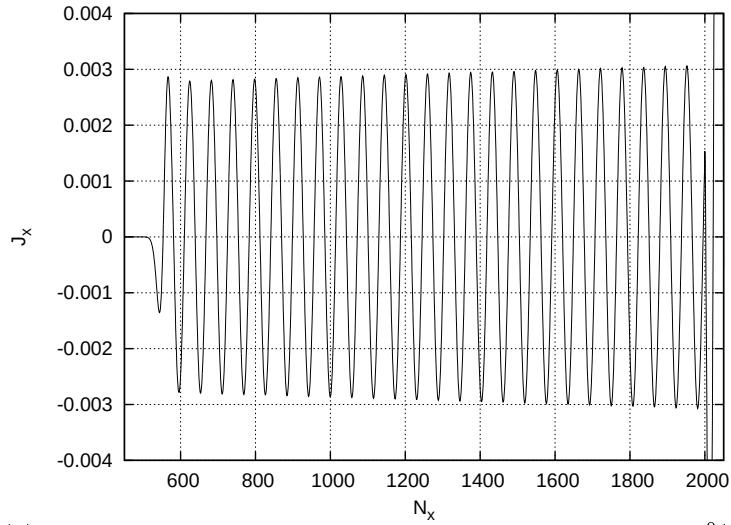
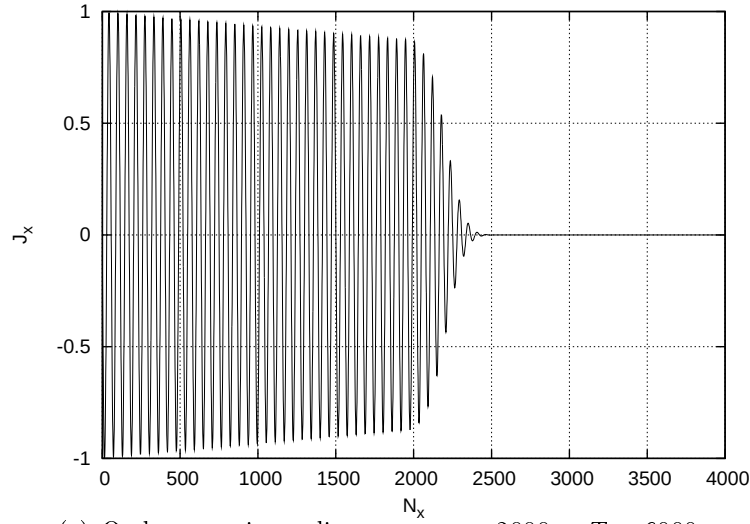
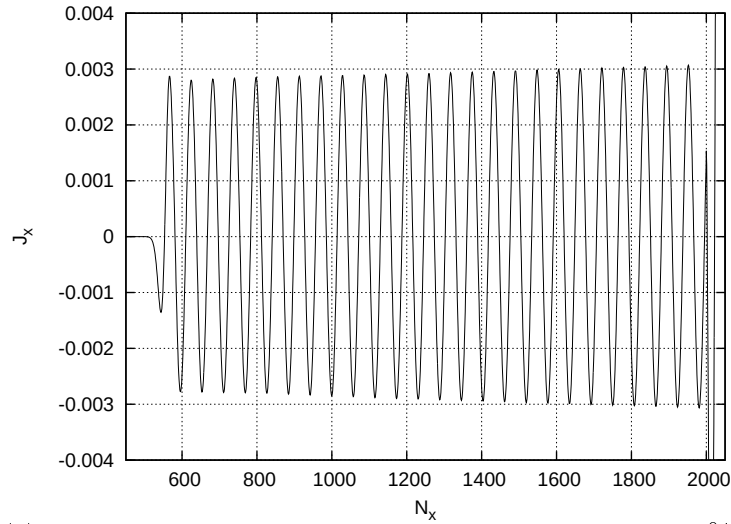
(a) Onde acoustique, dioptré en $x_i = 2000$ et $T = 6000$.(b) Onde réfléchié dans le milieu acoustique de module $\simeq 3,1 \text{ } ^0/_{00}$.

FIG. 4.6 – Test du dioptré dans le cas d'une incidence normale sur l'interface avec Ω_+ milieu **BRB sans absorption**. (a) J_x en fonction de N_x de l'onde acoustique incidente de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$ se propageant dans les milieux Ω_+ et Ω_- à $T = 6000$, (b) J_x en fonction de N_x de la différence entre l'onde se propageant dans le milieu $\Omega = \Omega_+ \cup \Omega_-$ et l'onde se propageant dans le milieu de référence Ω_R à $T = 6000$.



(a) Onde acoustique, dioptre en $x_i = 2000$ et $T = 6000$.



(b) Onde réfléchie dans le milieu acoustique de module $\simeq 3,1 \text{ }^0/_{00}$.

FIG. 4.7 – Test du dioptre dans le cas d’une incidence normale avec Ω_+ milieu **BRB avec absorption**. (a) J_x en fonction de N_x de l’onde incidente de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$. (b) J_x en fonction de N_x de la différence entre l’onde se propageant dans le milieu Ω et dans le milieu de référence Ω_R .

Interface entre un milieu D2Q9 et un milieu D2Q9 de viscosité croissante

Dans cette partie on va simuler dans un premier cas une interface entre un milieu D2Q9 de viscosité donnée et un milieu D2Q9 de viscosité croissante. Soit le domaine $\Omega = [0, l] \times [0, h]$ composé du milieu $\Omega_- = [0, \frac{l}{2}] \times [0, h]$ et du milieu $\Omega_+ =]\frac{l}{2}, l] \times [0, h]$. Dans le milieu Ω_- on a le schéma D2Q9 acoustique (voir la proposition 9) de viscosités de volume ξ et de cisaillement ν données dont l'équation équivalente est donnée par :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y &= 0, \\ \partial_t q_x + c_0^2 \partial_x \rho - \zeta (\partial_x^2 q_x + \partial_{xy} q_y) - \nu (\partial_x^2 q_x + \partial_y^2 q_x) &= 0, \\ \partial_t q_y + c_0^2 \partial_y \rho - \zeta (\partial_{yx} q_x + \partial_y^2 q_y) - \nu (\partial_x^2 q_y + \partial_y^2 q_y) &= 0. \end{cases} \quad (4.89)$$

où $\xi = -\alpha_3 \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right)$ et $\nu = \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right)$. Dans le milieu Ω_+ on a aussi le schéma D2Q9 acoustique (voir la proposition 9) mais de viscosités de volume $\xi(x)$ et de cisaillement $\nu(x)$ croissantes pour les x croissants :

$$\begin{cases} \xi(l/2) &= \xi \text{ la viscosité de volume du milieu } \Omega_- \\ \nu(l/2) &= \nu \text{ la viscosité de cisaillement du milieu } \Omega_- \\ \xi(x) \quad \text{et} \quad \nu(x) &\text{croissent en } x^2. \end{cases}$$

On fait alors le même test numérique que dans le cas précédent. On impose alors à l'entrée de Ω_- en $x = 0$ une onde acoustique parallèle à l'axe Ox de fréquence ω . On la laisse alors se propager jusqu'au temps T avant que l'onde n'ait atteint la sortie du milieu Ω_+ en $x = l$.

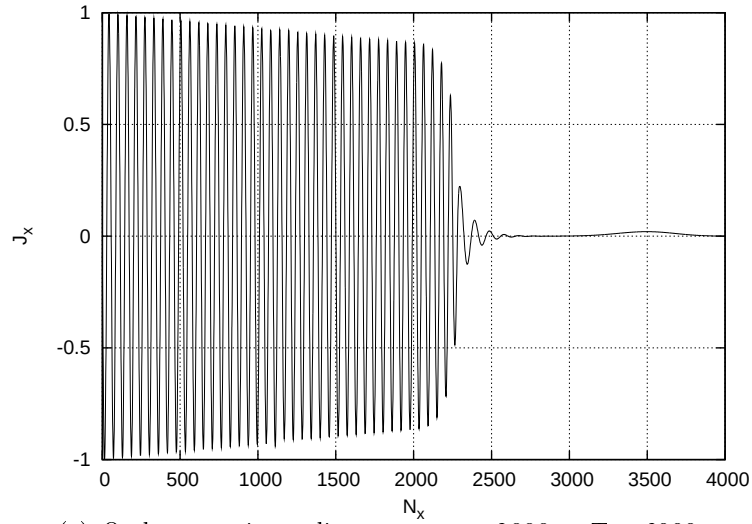
On discrétise les domaines Ω_+ et Ω_- par des sommets x_i avec $1 \leq i \leq 2000$ pour Ω_- et $2001 \leq i \leq 4000$ pour Ω_+ . On choisit les paramètres du schéma dans Ω_- comme suit : $\alpha_3 = -2$ (i. e. $c_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}$), $\alpha_4 = 1$, $s_3 = 1.97$ (i. e. $\xi = \frac{1}{3}(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2})$), $s_4 = 1.9$, $s_5 = s_6 = 1.7$ et $s_7 = s_8 = 1.95$ (i. e. $\nu = \frac{1}{3}(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2})$). On a gardé le même milieu Ω_- que dans les cas d'interfaces précédentes. Dans le milieu Ω_+ on choisit les paramètres comme suit : $\alpha_3 = -2$ (i. e. $c_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}$), $\alpha_4 = 1$, $s_4 = 1.9$, $s_5 = s_6 = 1.7$,

$$s_3(x_i) = \begin{cases} 1.97 \left(1 - \left(\frac{x_i - 2000}{300} \right)^2 \right) & \text{pour } i < 2300, \\ 1.97 \left(1 - \left(\frac{2299 - 2000}{300} \right)^2 \right) & \text{pour } i \geq 2300, \end{cases}$$

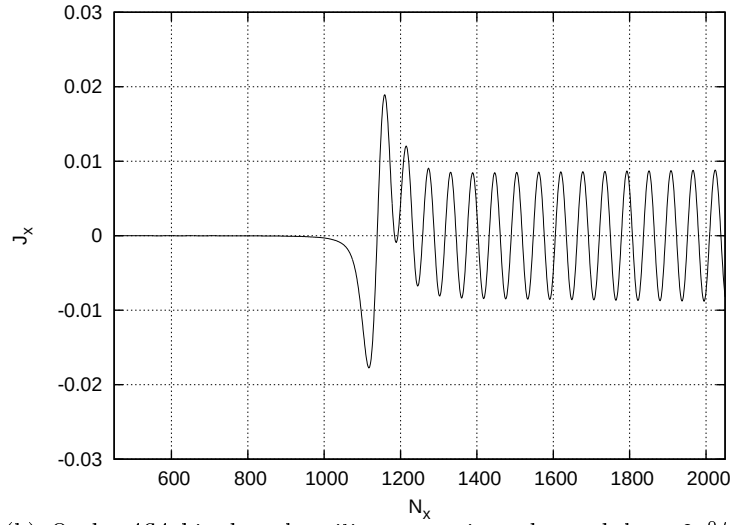
$$s_8(x_i) = \begin{cases} 1.95 \left(1 - \left(\frac{x_i - 2000}{300} \right)^2 \right) & \text{pour } i < 2300, \\ 1.95 \left(1 - \left(\frac{2299 - 2000}{300} \right)^2 \right) & \text{pour } i \geq 2300, \end{cases}$$

où 1.97 et 1.95 sont respectivement les valeurs de s_3 et s_8 dans le milieu Ω_- . On impose à l'entrée une onde de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$. La figure 4.8 (a) représente J_x en fonction de N_x de l'onde acoustique d'incidence normale sur l'interface se propageant dans les milieux Ω_+ et Ω_- .

Pour mettre en évidence l'onde réfléchie dans le milieu acoustique Ω_- due au changement de viscosité, on trace la différence entre le flux J_x obtenu dans le cas test avec les deux milieux et le flux J_x obtenu par la solution de référence (voir la figure 4.5). La figure (b) 4.8 montre dans le cas d'une incidence normale sur le dioptré, l'existence d'une onde réfléchie dans le domaine Ω_- ($\{x_i, i \geq 2000\}$).



(a) Onde acoustique, dioptré en $x_i = 2000$ et $T = 6000$.



(b) Onde réfléchie dans le milieu acoustique de module $\simeq 9 \text{ ‰}$.

FIG. 4.8 – Test du dioptré dans le cas d’une incidence normale avec Ω_+ milieu **D2Q9 de viscosité croissante**. (a) J_x en fonction de N_x de l’onde incidente de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$ à $T = 6000$. (b) J_x en fonction de N_x de la différence entre l’onde se propageant dans le milieu Ω et l’onde se propageant dans le milieu de référence Ω_R .

On voit ici la limitation de cette méthode car elle génère une onde réfléchie relativement importante (plus importante que dans le cas BRB). En plus on a besoin d'une couche d'épaisseur 700 mailles pour pouvoir absorber l'onde dans le milieu Ω_+ . Pour pouvoir atténuer l'onde plus rapidement on peut augmenter la viscosité plus rapidement mais on va générer une onde réfléchie plus importante.

Interface entre un milieu D2Q9 et un milieu D2Q9 avec un terme d'absorption d'ordre zéro

Dans cette partie on va tester le cas d'un dioptre entre un milieu D2Q9 (le milieu Ω_-) et un milieu D2Q9 avec des termes absorbants (le milieu Ω_+) qui satisfait les équations équivalentes suivantes d'ordre un en Δt :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \sigma \rho + \partial_x q_x + \partial_y q_y &= O(\Delta t), \\ \partial_t q_x + \sigma q_x + c_s^2 \partial_x \rho &= O(\Delta t), \\ \partial_t q_y + c_s^2 \partial_y \rho &= O(\Delta t). \end{cases} \quad (4.90)$$

Ce schéma est le D2Q9 sauf qu'il faut changer l'étape d'advection (voir la proposition 24). Ainsi le schéma s'écrit :

$$f_j(x, t + \Delta t) = (\text{Id} - \tilde{\sigma}) f_j^*(x - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8.$$

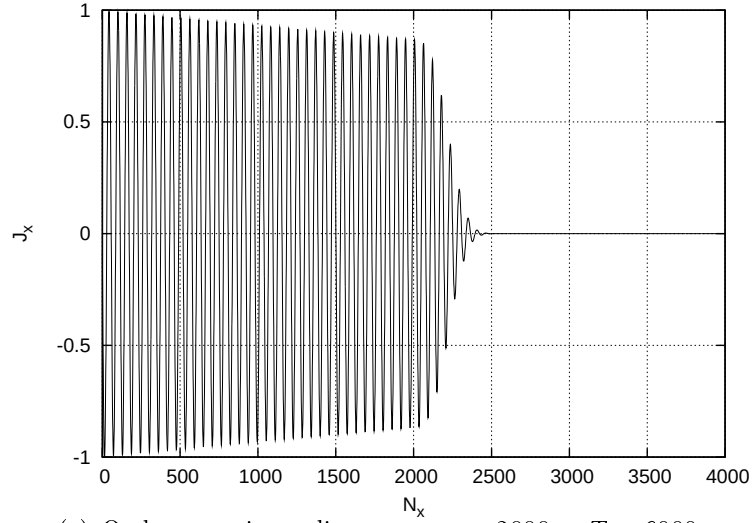
où la matrice $\tilde{\sigma}$ est donnée par (4.81). On choisit les paramètres du schéma dans Ω_- comme suit : $\alpha_3 = -2$ (i. e. $c_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}$), $\alpha_4 = 1$, $s_3 = 1.8$ (i. e. $\xi = \frac{1}{3}(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2})$), $s_4 = 1.75$, $s_5 = s_6 = 1.7$ et $s_7 = s_8 = 1.9$ (i. e. $\nu = \frac{1}{3}(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2})$). Dans le milieu Ω_+ on choisit les mêmes paramètres comme suit : $\alpha_3 = -2$ (i. e. $c_0 = \frac{1}{\sqrt{3}}$), $\alpha_4 = 1$, $s_3 = 1.8$ (i. e. $\xi = \frac{1}{3}(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2})$), $s_4 = 1.75$, $s_5 = s_6 = 1.7$, $s_7 = s_8 = 1.9$ (i. e. $\nu = \frac{1}{3}(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2})$) et $\sigma(x_i) = 10^{-7}(x_i - 2000)^2$ (on a l'interface $\sigma(x_{2000}) = 0$). On impose à l'entrée une onde de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$. La figure 4.9 (a), présente J_x en fonction de N_x de l'onde acoustique d'incidence normale sur l'interface se propageant dans les milieux Ω_+ et Ω_- . On voit alors que l'onde est absorbée dans le milieu Ω_+ au bout de 600 mailles.

Pour mettre en évidence l'onde réfléchie dans le milieu acoustique Ω_- , on trace la différence entre le flux J_x obtenu dans le cas test avec les deux milieux et le flux J_x obtenu par la solution de référence. La figure 4.9 (b) montre dans le cas d'une incidence normale sur le dioptre, l'existence d'une onde réfléchie d'amplitude 10^{-6} dans le domaine Ω_- ($\{x_i, i \geq 2000\}$). On note qu'on n'a pas analysé le front qui se propage en x décroissant au début de l'onde réfléchie.

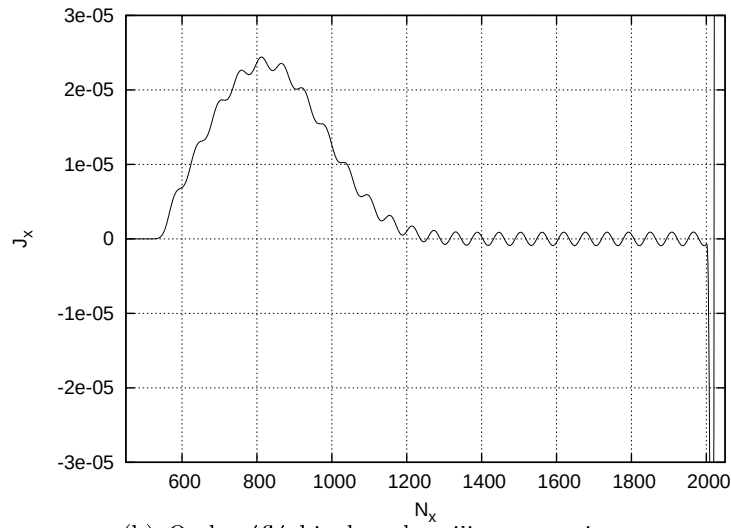
Pour analyser la cause de cette onde réfléchie on va étudier les équations équivalentes à l'ordre deux en Δt du milieu D2Q9 avec absorption.

Proposition 26 Equations équivalentes d'ordre deux en Δt du milieu D2Q9 absorbant.

Le schéma de Boltzmann D2Q9 avec un terme d'absorption d'ordre zéro défini dans la proposition 24 et avec $m_3^{eq} = \alpha_3 \rho$, où $\alpha_3 = 6c_s^2 - 4$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} =$



(a) Onde acoustique, dioptré en $x_i = 2000$ et $T = 6000$.



(b) Onde réfléchie dans le milieu acoustique.

FIG. 4.9 – Test du dioptré dans le cas d’une incidence normale sur l’interface avec Ω_+ milieu **D2Q9 avec absorption**. (a) J_x en fonction de N_x de l’onde acoustique incidente de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$. (b) J_x en fonction de N_x .

$-\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = 0$ et $m_8^{eq} = 0$, admet comme équations équivalentes à l'ordre deux en Δt le système suivant :

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y + \sigma \left(1 + \frac{\sigma \Delta t}{2}\right) \rho &= \frac{\sigma \Delta t}{2} \partial_y j_y + O(\Delta t^2), \\
\partial_t j_x + \lambda^2 \left[c_s^2 - \sigma \Delta t \left(\frac{3c_s^2 + 2}{6} + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{s_3} - 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s_8} - 1 \right) \right) \right] \partial_x \rho + \\
+ \sigma \left(1 + \frac{\sigma \Delta t}{2}\right) j_x &= \\
= \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} (4 - 6c_s^2) \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \partial_x (\partial_x j_x + \partial_y j_y) + \\
+ \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) (\partial_x^2 j_x + \partial_y^2 j_x) + O(\Delta t^2), \\
\partial_t j_y + \lambda^2 \left(c_s^2 - \sigma \Delta t \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{s_3} - 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s_8} - 1 \right) \right] \right) \partial_y \rho &= \\
= \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} (4 - 6c_s^2) \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \partial_y (\partial_x j_x + \partial_y j_y) + \\
+ \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) (\partial_x^2 j_y + \partial_y^2 j_y) + O(\Delta t^2).
\end{aligned}$$

Preuve: Pour trouver les équations équivalentes d'ordre deux en Δt du schéma D2Q9 avec atténuation (voir la proposition 24 qui donne les équations équivalentes d'ordre un), on utilise la méthode d'équations équivalentes (voir la proposition 3). En effet le schéma est décrit par :

$$f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \Delta t, t) - \sum_{k=0}^8 \tilde{\sigma}_{k,j} f_k^*(x - v_k \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8. \quad (4.91)$$

où la matrice $\tilde{\sigma}$ est défini par (4.81). On écrit alors le développement d'ordre trois en Δt de l'équation du schéma (4.91) :

$$\begin{aligned}
f_j + \Delta t \partial_t f_j + \frac{\Delta t^2}{2} \partial_t^2 f_j &= f_j^* - \Delta t v_j^\beta \partial_\beta f_j^* + \frac{\Delta t^2}{2} v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^* - \\
- \sum_{k=0}^8 \tilde{\sigma}_{j,k} \left(f_k^* - \Delta t v_k^\beta \partial_\beta f_k^* + \frac{\Delta t^2}{2} v_k^\beta v_k^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_k^* \right) &+ O(\Delta t^3),
\end{aligned}$$

On prend alors le moment d'ordre i de cette identité :

$$\begin{aligned}
m_i^* - m_i &= \Delta t \sum_j M_{ij} \left(\partial_t f_j + v_j^\beta \partial_\beta f_j^* \right) + \frac{\Delta t^2}{2} \sum_j M_{ij} \left[\partial_t^2 f_j - v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^* \right] + \\
+ \sum_{k=0}^8 (M\sigma)_{i,k} \left(f_k^* - \Delta t v_k^\beta \partial_\beta f_k^* + \frac{\Delta t^2}{2} v_k^\beta v_k^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_k^* \right) &+ O(\Delta t^3), \quad (4.92)
\end{aligned}$$

où la matrice $(M\sigma)$ est le produit matriciel (voir (4.84)) de M et $\tilde{\sigma}$. Pour $i \in \{0, 1, 2\}$ on a $m_i = m_i^*$ d'où (4.92) devient :

$$\begin{aligned} \partial_t m_i + \sum_j M_{ij} v_j^\beta \partial_\beta f_j^* + \sum_{j=0}^8 \frac{(M\sigma)_{i,j}}{\Delta t} f_j^* &= \frac{\Delta t}{2} \left[-\partial_t^2 m_i + \sum_j M_{ij} v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^* \right] + \\ &+ \sum_{j=0}^8 (M\sigma)_{i,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^* + O(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (4.93)$$

On remplace alors dans le membre de droite la relation précédente $\partial_t^2 m_i$ par $\partial_t^2 m_i^{eq}$, $\partial_\alpha \partial_\gamma f_j^*$ par $\partial_\alpha \partial_\gamma f_j^{eq}$ et $\partial_\gamma f_j^*$ par $\partial_\gamma f_j^{eq}$ sans changer l'ordre en Δt . On utilise aussi la relation (1.24) (voir Lemme 3.1) pour évaluer f_j^* dans l'équation précédente :

$$f_j^* = f_j^{eq} - \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \Delta t M_{jk}^{-1} \tilde{\theta}^k + O(\Delta t^2), \quad (4.94)$$

où $\tilde{\theta}_k$ sont les développements d'ordre deux en Δt de $m_k^* - m_k$ (*i. e.* $m_k^* - m_k = \Delta t \tilde{\theta}_k + O(\Delta t^2)$ voir équation (4.83)) pour le schéma D2Q9 avec atténuation. Ainsi on a :

$$\tilde{\theta}_k = \partial_t m_k^{eq} + \sum_j v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \sum_j (M\sigma)_{k,j} f_j^{eq} = \theta_k + \sum_j (M\sigma)_{k,j} f_j^{eq}$$

où les $\theta_k = \partial_t m_k^{eq} + \sum_j v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq}$ sont définis dans le lemme 3.1. Ainsi (4.93) devient :

$$\begin{aligned} \partial_t m_i + \sum_j M_{ij} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \sum_{j=0}^8 \frac{(M\sigma)_{i,j}}{\Delta t} f_j^{eq} &= \\ &= \frac{\Delta t}{2} \left[-\partial_t^2 m_i^{eq} + \sum_j M_{ij} v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{eq} \right] + \sum_{j=0}^8 (M\sigma)_{i,j} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \\ &+ \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \left[\Delta t \sum_j M_{ij} v_j^\beta M_{jk}^{-1} \partial_\beta \tilde{\theta}^k + \sum_j (M\sigma)_{i,j} M_{jk}^{-1} \tilde{\theta}^k \right] + O(\Delta t^2). \end{aligned} \quad (4.95)$$

On prend alors $i = 0$ dans l'équation précédente, d'où :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \sum_j v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \sigma \rho &= \\ &= \frac{\Delta t}{2} \left[-\partial_t^2 \rho + \sum_j v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{eq} \right] + \sigma \Delta t \sum_{j=0}^8 v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + O(\Delta t^2), \end{aligned} \quad (4.96)$$

car $\sum_j M_{ij} v_j^\beta M_{jk}^{-1} = \sum_j M_{0j} v_j^\beta M_{jk}^{-1} = \sum_j M_{\beta j} M_{jk}^{-1} = 0$ pour $\beta \leq 2$ et $k \geq 3$ et $\sum_j (M\sigma)_{0,j} M_{jk}^{-1} = 0$ pour $k \geq 3$. De plus

$$\partial_t^2 \rho = -\partial_t (\partial_x j_x + \partial_y j_y + \sigma \rho) + O(\Delta t) \quad \text{compte tenu de (4.90)}$$

$$\begin{aligned}
&= -(\partial_x \partial_t j_x + \partial_y \partial_t j_y + \sigma \partial_t \rho) + O(\Delta t) \\
&= -\left[\partial_x \left(-\sigma j_x - \sum_j v_j^x v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right) + \partial_y \left(-\sum_j v_j^y v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} \right) + \sigma \partial_t \rho \right] + O(\Delta t) \\
&= \sigma \partial_x j_x - \sigma \partial_t \rho + \sum_j v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{eq} + O(\Delta t) \\
&= \sigma \partial_x j_x + \sigma (\sigma \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y) + \sum_j v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{eq} + O(\Delta t).
\end{aligned}$$

On remplace alors $\partial_t^2 \rho$ par l'expression ci-dessus dans (4.96), on obtient :

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y + \sigma \rho &= \\
&= \frac{\Delta t}{2} [-\sigma^2 \rho - 2\sigma \partial_x j_x - \sigma \partial_y j_y] + \sigma \Delta t (\partial_x j_x + \partial_y j_y) + O(\Delta t^2), \\
&= \frac{\sigma \Delta t}{2} (\partial_y j_y - \sigma \rho) + O(\Delta t^2),
\end{aligned}$$

la première équation équivalente est établie.

On prend $i = 1$ dans l'équation (4.95), d'où :

$$\begin{aligned}
\partial_t j_x + \sum_j v_j^x v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \sigma j_x &= \tag{4.97} \\
&= \frac{\Delta t}{2} \left[-\partial_t^2 j_x + \sum_j v_j^x v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{eq} \right] + \sigma \Delta t \sum_{j=0}^8 v_j^x v_j^\beta \partial_\beta f_j^{eq} + \\
&+ \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \left[\Delta t \sum_j v_j^x v_j^\beta M_{jk}^{-1} \partial_\beta \tilde{\theta}^k \right] + O(\Delta t^2).
\end{aligned}$$

car $\sum_j (M\sigma)_{0,j} M_{jk}^{-1} = 0$ pour $k \geq 3$. On modifie l'écriture algébrique des deux derniers termes de l'équation précédente comme suit :

$$\begin{aligned}
-\partial_t^2 j_x + \sum_j v_j^x v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{eq} &= \\
&= \partial_t \partial_\beta \sum_j v_j^x v_j^\beta f_j^{eq} + \sigma \partial_t j_x + \sum_j v_j^x v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{eq} + O(\Delta t) \\
&= \partial_\beta \left\{ \sum_j v_j^x v_j^\beta (\partial_t f_j^{eq} + v_j^\gamma \partial_\gamma f_j^{eq}) \right\} + \sigma \partial_t j_x + O(\Delta t) \\
&= \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta \sum_k M_{jk}^{-1} (\partial_\beta \theta_k) + \sigma \partial_t j_x + O(\Delta t) \\
&= \sum_k \Lambda_k^{\alpha\beta} (\partial_\beta \theta_k) + \sigma \partial_t j_x + O(\Delta t),
\end{aligned}$$

où $\Lambda_k^{\alpha\beta} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta M_{jk}^{-1}$, (défini par (1.19)). L'équation (4.97) devient :

$$\partial_t j_x + \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho + \sigma j_x = \frac{\Delta t}{2} \left(-\sigma^2 j_x - \sigma \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho + \sum_k \Lambda_k^{x\beta} \partial_\beta \theta_k \right) +$$

$$+ \sigma \lambda^2 \Delta t c_s^2 \partial_x \rho + \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \Lambda_k^{x\beta} \partial_\beta \tilde{\theta}^k + O(\Delta t^2).$$

Or on a $\Lambda_k^{\alpha\beta} = 0$ pour $k = 1, 2, 4, 5, 6$ et

$$\Lambda_0^{\alpha\beta} = \frac{2\lambda^2}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\Lambda_3^{\alpha\beta} = \frac{\lambda^2}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\Lambda_7^{\alpha\beta} = \frac{\lambda^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\Lambda_8^{\alpha\beta} = \lambda^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

De plus on a :

$$\begin{aligned} \tilde{\theta}_0 &= \theta_0 + \sigma \rho = O(\Delta t), \\ \tilde{\theta}_1 &= \theta_1 + \sigma j_x = O(\Delta t), \\ \tilde{\theta}_2 &= \theta_2 = O(\Delta t), \\ \tilde{\theta}_3 &= \theta_3 + \sigma \rho, \\ \tilde{\theta}_4 &= \theta_4 + 2\sigma \rho, \\ \tilde{\theta}_5 &= \theta_5 + 2\sigma j_x, \\ \tilde{\theta}_6 &= \theta_6, \\ \tilde{\theta}_7 &= \theta_7 + \sigma \rho, \\ \tilde{\theta}_8 &= \theta_8. \end{aligned}$$

On remplace alors les $\tilde{\theta}_k$ par leur valeur dans l'équation (4.98), on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_t j_x + \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho + \sigma j_x &= \frac{\Delta t}{2} \left(-\sigma^2 j_x - \sigma \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho + \Lambda_0^{x\beta} \partial_\beta \theta_0 \right) + \\ &+ \sigma \lambda^2 \Delta t c_s^2 \partial_x \rho + \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{x\beta} \partial_\beta \theta^k + \\ &+ \Delta t \sigma \left[\left(\frac{1}{s_3} - 1 \right) \Lambda_3^{x\beta} \partial_\beta \rho + \left(\frac{1}{s_7} - 1 \right) \Lambda_7^{x\beta} \partial_\beta \rho \right] + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

On calcule alors les expressions de θ_k (voir la démonstration de la proposition 8) et en remplaçant les $\Lambda_k^{\alpha\beta}$ par leur valeur on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_t j_x + \lambda^2 c_s^2 \partial_x \rho + \sigma j_x &= -\frac{\sigma^2 \Delta t}{2} j_x \\ &+ \sigma \lambda^2 \Delta t \left[\frac{3c_s^2 + 2}{6} + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{s_3} - 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s_8} - 1 \right) \right] \partial_x \rho \\ &+ \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} (4 - 6c_s^2) \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \partial_x (\partial_x j_x + \partial_y j_y) + \\ &+ \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) (\partial_x^2 j_x + \partial_y^2 j_x) + O(\Delta t^2), \end{aligned}$$

on note qu'on a pris les paramètres du schéma comme ils sont fixés dans l'énoncé de la proposition (*i. e.* $m_3^{eq} = \alpha_3 \rho$, où $\alpha_3 = 6c_s^2 - 4$, $m_5^{eq} = -\frac{q_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{q_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = 0$ et $m_8^{eq} = 0$). Ainsi on a la deuxième équation équivalente.

On reprend les mêmes calculs pour $i = 2$ dans l'équation (4.95), sachant que cette fois on utilisera l'équation $\partial_t j_y + \lambda^2 c_s^2 \partial_y \rho = O(\Delta t)$. On trouve alors :

$$\begin{aligned} \partial_t j_y + \lambda^2 c_s^2 \partial_y \rho &= \frac{\Delta t}{2} \left(\Lambda_0^{y\beta} \partial_\beta \theta_0 \right) + \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{y\beta} \partial_\beta \theta^k + \\ &+ \Delta t \sigma \left[\left(\frac{1}{s_3} - 1 \right) \Lambda_3^{y\beta} \partial_\beta \rho + \left(\frac{1}{s_7} - 1 \right) \Lambda_7^{y\beta} \partial_\beta \rho \right] + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Il suffit alors de remplacer les $\Lambda_k^{\alpha\beta}$, θ_k par leur valeur dans l'équation précédente, d'où :

$$\begin{aligned} \partial_t j_y + \lambda^2 c_s^2 \partial_y \rho &= \sigma \lambda^2 \Delta t \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{s_3} - 1 \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{s_8} - 1 \right) \right] \partial_y \rho \\ &+ \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} (4 - 6c_s^2) \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \partial_y (\partial_x j_x + \partial_y j_y) + \\ &+ \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) (\partial_x^2 j_y + \partial_y^2 j_y) + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Ce qui établit la troisième équation équivalente de la proposition. $\square$

Le schéma D2Q9 avec absorption a la même viscosité que le schéma D2Q9 sans absorption. En effet si on prend $\sigma = 0$, les coefficients de $\partial_x \text{div} j_x$, Δj_x , $\partial_y \text{div} j_y$ et Δj_y dans les équations équivalentes d'ordre deux en Δt ne changent pas. Par contre le fait de rajouter l'absorption va affecter la vitesse du son du schéma qui sera fonction de σ , s_3 et s_8 . Ce qui va générer une onde réfléchie.

6 Conclusion

La méthode de la couche absorbante de Béranger permet à la fois pour un modèle d'équations aux dérivées partielles (*e. g.* Maxwell [Be94], Euler [Hu96, DDMT02]) : une absorption d'ordre zéro dans la couche et une transmission sans réflexion entre le domaine d'intérêt et la couche pour toute fréquence et tout angle d'incidence.

Nous avons proposé un schéma de Boltzmann sur réseau (BRB) pour modéliser la couche de Béranger à l'ordre un. Dans un premier temps on a étudié les propriétés de ce schéma en regardant les équations équivalentes d'ordre deux et la stabilité. On a montré qu'il a une viscosité non isotrope et élevée pour satisfaire la contrainte de stabilité.

Ensuite on a proposé une méthode pour modéliser les termes d'absorption d'ordre zéro, cela en modifiant l'étape d'advection. Cette méthode nous donne des résultats satisfaisants (meilleure que ceux du milieu BRB) et intéressants, en atténuant l'onde transmise dans la couche et en générant une onde réfléchie en interface entre deux milieux D2Q9 (Euler / Euler avec absorption) négligeable devant une interface entre un milieu D2Q9 et un milieu BRB.

Finalement le milieu Béranger approché par BRB ne résout pas le problème de la transmission parfaite. En effet le schéma BRB génère une onde réfléchie même en incidence normale et à *fortiori* en incidence quelconque. Afin de comprendre ces difficultés on a approfondi (*c. f.* chapitre suivant) le problème d'interface entre deux schémas de Boltzmann sur réseau qui modélisent des milieux de caractéristiques différentes (*i. e.* milieux de vitesses du son ou de viscosités différentes, milieux hydrodynamiquement équivalents et à distributions d'équilibre différentes).

Chapitre 5

Onde réfléchie à l'interface entre deux milieux acoustiques

1 Introduction

Notre modèle de couche parfaitement adaptée avec la méthode de Boltzmann sur réseau présente un défaut majeur en réfléchissant une onde dans le domaine d'étude. Cela nous conduit à faire une analyse détaillée du comportement de ces modèles à l'interface entre le domaine d'étude et la couche absorbante.

Dans un premier lieu nous allons commencer par retrouver le coefficient de réflexion lorsqu'on a deux milieux continus monodimensionnels de caractères différents, en particulier lorsqu'on a un changement de la vitesse du son et de la viscosité. Puis nous calculons le coefficient de réflexion pour le schéma numérique D1Q3 et appliquons cette étude à la minimisation des ondes numériques réfléchies à l'interface. Dans la deuxième partie on fait l'analyse d'un dioptré entre deux milieux D2Q9 macroscopiquement équivalents en deux dimensions pour une incidence normale.

2 Etude monodimensionnelle continue

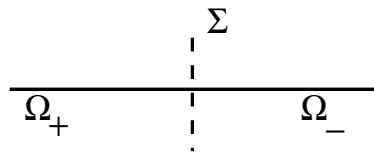


FIG. 5.1 – Domaines de propagation Ω_- et Ω_+

Soit $\Omega^+ = \{x, x > 0\}$ et $\Omega^- = \{x, x < 0\}$ deux milieux séparés par une interface $\Sigma = \{x = 0\}$ (voir Fig. 2). On considère le problème suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \end{array} \right. \quad \text{dans } \Omega^-, \quad (5.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial t} - \tilde{\nu} \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} + \tilde{c}_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \end{array} \right. \quad \text{dans } \Omega^+. \quad (5.2)$$

On recherche alors les solutions de la forme $\Phi = \Phi_0 e^{i(\omega t - kx)}$ (analyse en onde plane en une dimension). Quand une onde incidente $\Phi_i = \Phi_0^i e^{i(\omega t - kx)}$ (avec $\frac{\text{Re} k}{w} > 0$) rencontre l'interface Σ , une partie de l'onde incidente passe dans le milieu Ω^+ et donne naissance à une onde transmise $\Phi_t = \Phi_0^t e^{i(\omega t - \tilde{k}x)}$ (avec $\frac{\text{Re} \tilde{k}}{w} > 0$). Le reste de l'onde revient dans le milieu Ω^- et donne naissance à une onde réfléchie $\Phi_r = \Phi_0^r e^{i(\omega t + kx)}$ qui se propage à la vitesse opposée.

Proposition 27 Coefficient de réflexion et de transmission (formules de Fresnel).

Si J_i , J_r et J_t sont respectivement les vitesses incidente, réfléchie et transmise, on a :

$$r_{th} \equiv \frac{J_r}{J_i} = \frac{k(c_s^2 + i\nu\omega) - \tilde{k}(\tilde{c}_s^2 + i\tilde{\nu}\omega)}{k(c_s^2 + i\nu\omega) + \tilde{k}(\tilde{c}_s^2 + i\tilde{\nu}\omega)} = \frac{\tilde{k} - k}{k + \tilde{k}} \quad (5.3)$$

$$t_{th} \equiv \frac{J_t}{J_i} = \frac{2k(c^2 + i\nu\omega)}{k(c^2 + i\nu\omega) + \tilde{k}(\tilde{c}^2 + i\tilde{\nu}\omega)} = \frac{2\tilde{k}}{k + \tilde{k}}. \quad (5.4)$$

avec k et $\tilde{k}$ les vecteurs d'onde dans Ω^- et Ω^+ respectivement.

Preuve: à l'aide de la transformée de Fourier appliquée aux deux problèmes (5.1) et (5.2), on déduit les deux équations de dispersion : $\frac{\omega^2}{k^2} = (c_s^2 + i\omega\nu)$ et $\frac{\omega^2}{\tilde{k}^2} = (\tilde{c}_s^2 + i\omega\tilde{\nu})$. De plus comme on recherche les solutions de la forme $\Phi = \Phi_0 e^{i(\omega t - kx)}$, on a dans Ω^- deux solutions : $\phi_i = \phi_0^i e^{i(\omega t - kx)}$ et $\phi_r = \phi_0^r e^{i(\omega t + kx)}$ (d'après les lois de Descartes). Dans Ω^+ on a $\phi_t = \phi_0^t e^{i(\omega t - \tilde{k}x)}$. Des deux équations de continuité et de la transformée de Fourier on déduit :

$$\rho_i = \frac{k}{\omega} J_i, \quad \rho_r = -\frac{k}{\omega} J_r \quad \text{et} \quad \rho_t = \frac{\tilde{k}}{\omega} J_t. \quad (5.5)$$

A l'interface, on a la continuité des contraintes normales qui s'écrit :

$$J_1 = J_2 \quad (5.6)$$

$$-\nu \frac{\partial J_1}{\partial x} + c_s \rho = -\tilde{\nu} \frac{\partial J_2}{\partial x} + \tilde{c}_s \rho. \quad (5.7)$$

Or on a dans le milieu Ω_- : $J_1 = J_i + J_r$ et dans le milieu Ω_+ : $J_2 = J_t$. D'après les relations de passage (5.6) et (5.7), on déduit :

$$J_i + J_r = J_t \quad (5.8)$$

$$i\nu k(J_i - J_r) + c_s \frac{k}{\omega}(J_i - J_r) = i\tilde{\nu} \tilde{k}(J_t) + \tilde{c}_s \frac{\tilde{k}}{\omega}(J_t) \quad (5.9)$$

Soit $r = \frac{J_r}{J_i}$ et $t = \frac{J_t}{J_i}$, on a alors :

$$1 + r = t \quad (5.10)$$

$$i\nu k(1 - r) + c_s^2 \frac{k}{\omega}(1 - r) = i\tilde{\nu}\tilde{k}t + \tilde{c}_s^2 \frac{\tilde{k}}{\omega}t \quad (5.11)$$

d'où

$$r_{th} = \frac{k(c_s^2 + i\nu\omega) - \tilde{k}(\tilde{c}_s^2 + i\tilde{\nu}\omega)}{k(c_s^2 + i\nu\omega) + \tilde{k}(\tilde{c}_s^2 + i\tilde{\nu}\omega)} \quad (5.12)$$

$$t_{th} = \frac{2k(c_s^2 + i\nu\omega)}{k(c_s^2 + i\nu\omega) + \tilde{k}(\tilde{c}_s^2 + i\tilde{\nu}\omega)}. \quad (5.13)$$

Il suffit de remplacer $(c_s^2 + i\nu\omega) = \frac{\omega^2}{k^2}$ et $(\tilde{c}_s^2 + i\tilde{\nu}\omega)$ (relations qui découlent des équations de dispersion dans les milieux Ω_- et Ω_+) dans 5.12 et 5.13 pour retrouver les relations classiques de Fresnel (5.3) et (5.4). $\square$

Proposition 28 Développement limité des coefficients de réflexion et transmission.

Dans notre problème ω est imposé. On a alors le développement suivant des coefficients de réflexion et transmission :

$$r_{th} = \frac{c_s - \tilde{c}_s}{c_s + \tilde{c}_s} + i \frac{\tilde{c}_s^2 \nu - c_s^2 \tilde{\nu}}{(c_s + \tilde{c}_s)^2 c_s \tilde{c}_s} \omega + O(\omega^2). \quad (5.14)$$

$$t_{th} = \frac{2c_s}{c_s + \tilde{c}_s} + i \frac{\tilde{c}_s^2 \nu - c_s^2 \tilde{\nu}}{(c_s + \tilde{c}_s)^2 c_s \tilde{c}_s} \omega + O(\omega^2). \quad (5.15)$$

Preuve: Il suffit d'écrire le développement limité de k et $\tilde{k}$ en ω :

$$k = \frac{\omega}{c_s} - \frac{i}{2} \frac{\nu}{c_s^3} \omega^2 + O(\omega^3), \quad (5.16)$$

$$\tilde{k} = \frac{\omega}{\tilde{c}_s} - \frac{i}{2} \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{c}_s^3} \omega^2 + O(\omega^3). \quad (5.17)$$

On a alors les expressions (5.14) et (5.15) en remplaçant k et $\tilde{k}$ par leur développement dans les expressions (5.3) et (5.4). $\square$

3 Résolution exacte dans le cas du modèle D1Q3

On va utiliser le schéma de Boltzmann sur réseau D1Q3 introduit dans le chapitre 1. On rappelle que l'évolution en un pas de temps Δt est donnée par l'équation (1.35) :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 2. \quad (5.18)$$

où $f^* = (f_0^*, f_1^*, f_2^*)$ est égale à :

$$f^* = M^{-1}CMf,$$

où les matrices M , M^{-1} et C sont données respectivement par (1.31), (1.33) et (1.34). On sait alors d'après la proposition 5, que ce schéma modélise à l'ordre deux en Δt les équations suivantes :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta t^2), \\ \frac{\partial q}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} - \lambda \Delta x (1 - \alpha) \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = O(\Delta t^2). \end{cases} \quad (5.19)$$

On a la viscosité de volume $\zeta = \lambda \Delta x (1 - \alpha) \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right)$.

Modes propres du modèle D1Q3

Cette étude consiste à considérer les solutions de type onde plane sous la forme $f_i(x, t) = \phi_i e^{i(\omega t - kx)}$. L'algorithme D1Q3 (5.18) s'écrit dans l'espace de Fourier d'après la proposition 1.83 :

$$zf = G(p)f \quad \text{avec} \quad z = e^{i\omega \Delta t} \quad \text{et} \quad p = e^{ik\Delta x}. \quad (5.20)$$

On rappelle ici l'expression de la matrice globale $G(p)$ donnée par la proposition 12 :

$$G(p) = \begin{pmatrix} 1 - \alpha s & s(1 - \alpha) & s(1 - \alpha) \\ \frac{\alpha s}{2} p & \left(1 - \frac{s(1 - \alpha)}{2} \right) p & \frac{-s(1 - \alpha)}{2} p \\ \frac{\alpha s}{2} \frac{1}{p} & \frac{-s(1 - \alpha)}{2} \frac{1}{p} & \left(1 - \frac{s(1 - \alpha)}{2} \right) \frac{1}{p} \end{pmatrix}.$$

L'équation (5.20) nous donne la relation de dispersion entre z et k . Donc pour avoir une solution non triviale, il faut que z soit une valeur propre de G , et les solutions f sont les modes de G . Dans notre problème la fréquence ω est fixée, c'est-à-dire z est fixé. On cherche alors p tel que : $d(p) \equiv \det(G(p) - zId) = 0$ (i.e. z est valeur propre de $G(p)$).

On a

$$\begin{aligned} d(p) = & -\frac{1}{2}z \left(p + \frac{1}{p} \right) [\alpha s(z + 1) - (1 - z)(2 - s)] + \\ & + s(\alpha z(z + 1) - z + 1) - (1 - z)(z^2 + 1). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Proposition 29 Calcul des racines.

Les valeurs de p telles que z est une valeur propre sont les suivantes :

$$\begin{aligned} p_+ = & \frac{s - 1 + z(1 + s(1 - \alpha)) - z^2(1 - \alpha s) + z^3}{z[(2 - s(1 - \alpha))z + s(\alpha + 1) - 2]} + \\ & + \left(\frac{(s - 1 + z(1 + s(1 - \alpha)) - z^2(1 - \alpha s) + z^3)^2}{z^2[(2 - s(1 - \alpha))z + s(\alpha + 1) - 2]^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

$$p_- = \frac{s - 1 + z(1 + s(1 - \alpha)) - z^2(1 - \alpha s) + z^3}{z[(2 - s(1 - \alpha))z + s(\alpha + 1) - 2]} - \left(\frac{(s - 1 + z(1 + s(1 - \alpha)) - z^2(1 - \alpha s) + z^3)^2}{z^2[(2 - s(1 - \alpha))z + s(\alpha + 1) - 2]^2} - 1 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

p_+ et p_- sont les deux modes hydrodynamiques associés respectivement aux ondes progressive et régressive.

Preuve: Pour trouver p_+ et p_- il suffit de trouver les zéros du polynôme de degré deux (5.21). On va montrer que p_+ est le mode qui correspond aux ondes progressive et p_- est le mode qui correspond aux ondes régressive. En remplaçant $z = e^{(i\omega\Delta t)}$ par son développement limité en ω à l'ordre 3 et en effectuant le développement de p en ω à l'ordre 3 on obtient :

$$p_+ = 1 + i\frac{\Delta t}{\sqrt{\alpha}}\omega + \frac{(\Delta t)^2}{\alpha} \left(\frac{(2-s)(1-\alpha)}{2\sqrt{\alpha}s} - \frac{1}{2} \right) \omega^2 + O(\omega^3). \quad (5.22)$$

$$p_- = 1 - i\frac{\Delta t}{\sqrt{\alpha}}\omega - \frac{(\Delta t)^2}{\alpha} \left(\frac{(2-s)(1-\alpha)}{2\sqrt{\alpha}s} + \frac{1}{2} \right) \omega^2 + O(\omega^3). \quad (5.23)$$

Comme $p = e^{(ik\Delta x)}$, il suffit d'appliquer la fonction Log, pour avoir le développement limité de k_+ et k_- on a alors :

$$k_+ = \frac{1}{\lambda\sqrt{\alpha}}\omega - i\frac{\Delta t}{\lambda\alpha} \left(\frac{(2-s)(1-\alpha)}{2\sqrt{\alpha}s} \omega^2 - \frac{1}{2} \right) - i\frac{\Delta t}{\lambda\alpha}\omega^2 + O\left(\frac{\omega^3}{\Delta x}\right),$$

$$k_- = -\frac{1}{\lambda\sqrt{\alpha}}\omega + i\frac{\Delta t}{\lambda\alpha} \left(\frac{(2-s)(1-\alpha)}{2\sqrt{\alpha}s} \omega^2 - \frac{1}{2} \right) + i\frac{\Delta t}{\lambda\alpha}\omega^2 + O\left(\frac{\omega^3}{\Delta x}\right),$$

On déduit finalement :

$$k_+ = \frac{1}{\lambda\sqrt{\alpha}}\omega - i\frac{\lambda^2\Delta t}{\lambda^3\alpha\sqrt{\alpha}}\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\right)(1-\alpha)\omega^2 + O(\omega^3), \quad (5.24)$$

$$k_- = -\frac{1}{\lambda\sqrt{\alpha}}\omega + i\frac{\lambda^2\Delta t}{\lambda^3\alpha\sqrt{\alpha}}\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\right)(1-\alpha)\omega^2 + O(\omega^3). \quad (5.25)$$

p_+ et p_- correspondent aux deux modes hydrodynamiques associés respectivement aux ondes progressive et régressive car $\text{Re}(k_+) > 0$ et $\text{Re}(k_-) < 0$ d'après (5.24) et (5.25). $\square$

• **Remarque :** Dans ce modèle on a

- la vitesse du son $c_s = \alpha^{\frac{1}{2}}\lambda$. (éq. aux dimensions $c_s = L T^{-1}$).
- la viscosité $\zeta = (1-\alpha)\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\right)\lambda\Delta x$. (éq. aux dimensions $\zeta = L^2 T^{-1}$).

On conclut alors :

$$k_+ = \frac{1}{c_s}\omega - i\frac{\zeta}{2c_s^3}\omega^2 + O(\omega^3),$$

$$k_- = -\frac{1}{c_s}\omega + i\frac{\zeta}{2c_s^3}\omega^2 + O(\omega^3).$$

L'expression précédente est bien homogène. En effet l'unité de ω est T^{-1} et celle de k est L^{-1} . D'où dans le membre de droite de l'équation de k_- , on s'attend à trouver l'inverse d'une longueur. Or

$$\frac{1}{c_s}\omega = \frac{1}{LT^{-1}}T^{-1} = L^{-1}$$

$$\frac{\zeta}{c_s^3}\omega^2 = \frac{L^2T^{-1}}{L^3T^{-3}}T^{-2} = L^{-1},$$

ce qui montre que le développement est bien homogène.

Vecteurs propres

On cherche ϕ tel que $G\phi - z\phi = 0$. On fixe la première composante de ϕ à ϕ_0 et à l'aide de la méthode de Cramer on trouve la forme générale de ϕ .

$$\phi = \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \\ \phi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_0 \\ \frac{\alpha sp(1-zp)}{-2p(1-2s(1-\alpha)) + (2-s(1-\alpha))(p^2+1)z - 2pz^2} \phi_0 \\ \frac{\alpha s(p-z)}{-2p(1-2s(1-\alpha)) + (2-s(1-\alpha))(p^2+1)z - 2pz^2} \phi_0 \end{bmatrix}, \quad (5.26)$$

qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\phi = \left(\phi_0, \phi_1, \frac{1 - \frac{z}{p}}{1 - pz} \phi_1 \right)^t.$$

• **Remarque** : Les deux solutions p_+ et p_- sont inverses l'une de l'autre (*i. e.* $p_+p_- = 1$). On pose alors $p \equiv p_+ = \frac{1}{p_-} = e^{ik_+\Delta x}$, pour alléger les notations.

Soit ϕ^+ le vecteur propre de la matrice $G(p)$ associé à la valeur propre $z = e^{i\omega\Delta t}$. On a alors :

$$\phi^+ = \left(\phi_0, \phi_1^+, \frac{1 - \frac{z}{p}}{1 - pz} \phi_1^+ \right)^t. \quad (5.27)$$

Soit ϕ^- le vecteur propre de la matrice $G(p_-) = G(\frac{1}{p})$ associé à la valeur propre $z = e^{i\omega\Delta t}$. On a alors :

$$\phi^- = \left(\phi_0, \phi_1^-, \frac{1 - pz}{1 - \frac{z}{p}} \phi_1^- \right)^t. \quad (5.28)$$

Coefficient de réflexion

On étudie ici le passage d'une onde d'un milieu Ω_- de viscosité ν qui vérifie le problème (5.1) de vitesse c_s vers un milieu Ω_+ de viscosité $\tilde{\nu}$ et de vitesse $\tilde{c}_s$ qui vérifie le problème (5.2). Ce qui s'interprète pour le schéma de Boltzmann par le changement des paramètres s et α vers $\tilde{s}$ et $\tilde{\alpha}$.

Proposition 30 Coefficient de réflexion entre deux milieux de Boltzmann (Fresnel discret).

Soient Ω_- et Ω_+ deux milieux Boltzmann, de vitesses du son c_s , $\tilde{c}_s$ et de viscosités ν , $\tilde{\nu}$, respectivement. On considère une onde incidente f_i de vecteur d'onde k_+ dans le milieu Ω_- . On a alors une onde réfléchie f_d de vecteur d'onde k_- et une onde transmise f_t de vecteur d'onde k_2^+ dans le milieu Ω_+ . Le coefficient de réflexion discret est donné par :

$$r_B \equiv \frac{J_r}{J_i} = \frac{p - \tilde{p}}{1 - p\tilde{p}} = \frac{e^{ik_+\Delta x} - e^{i\tilde{k}_+\Delta x}}{1 - e^{i(k_+ + \tilde{k}_+)\Delta x}}. \quad (5.29)$$

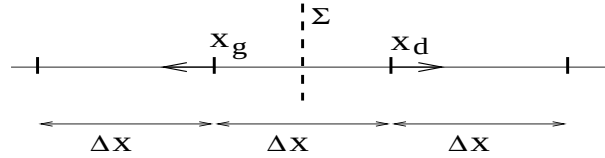


FIG. 5.2 – Points de calculs x_g et x_d à gauche et à droite de l'interface Σ .

Preuve: A gauche de l'interface Σ , on a une onde incidente et une onde réfléchie :

$$f^g = e^{i(\omega t - k_+ x)} \phi^+ + \beta e^{i(\omega t - k_- x)} \phi^-.$$

A droite de l'interface Σ , on a une onde transmise :

$$f^d = \gamma e^{i(\omega t - \tilde{k}_+ x)} \tilde{\phi}_+.$$

avec $\tilde{\phi}^+$ le vecteur propre de la matrice $G(\tilde{p})$ associé à la valeur propre $z = e^{i\omega\Delta t}$:

$$\tilde{\phi}^+ = \left(\phi_0, \tilde{\phi}_1^+, \frac{1 - \frac{z}{\tilde{p}}}{1 - \tilde{p}z} \tilde{\phi}_1^+ \right)^t. \quad (5.30)$$

On considère les deux points de part et d'autre de l'interface de coordonnées $x_g \equiv -\frac{\Delta x}{2}$ et $x_d \equiv \frac{\Delta x}{2}$ (voir Fig. 5.2).

- En $x_g = -\frac{\Delta x}{2}$ on écrit l'algorithme $f_i(x_j, t + \Delta t) = f_i^*(x_j - v_i \Delta t, t)$, pour $i \in \{0, 1, 2\}$:

$$e^{i\omega\Delta t} \left(e^{i(\omega t + k_+ \frac{\Delta x}{2})} \phi_0^+ + \beta e^{i(\omega t + k_- \frac{\Delta x}{2})} \phi_0^- \right) =$$

$$\begin{aligned}
&= e^{i(\omega t + k + \frac{\Delta x}{2})} (\phi_0^+)^* + \beta e^{i(\omega t + k - \frac{\Delta x}{2})} (\phi_0^-)^* , \\
e^{i\omega \Delta t} \left(e^{i(\omega t + k + \frac{\Delta x}{2})} \phi_1^+ + \beta e^{i(\omega t + k - \frac{\Delta x}{2})} \phi_1^- \right) &= \\
&= e^{ik + \Delta x} \left(e^{i(\omega t + k + \frac{\Delta x}{2})} (\phi_1^+)^* \right) + e^{ik - \Delta x} \left(\beta e^{i(\omega t + k - \frac{\Delta x}{2})} (\phi_1^-)^* \right) , \\
e^{i\omega \Delta t} \left(e^{i(\omega t + k + \frac{\Delta x}{2})} \phi_2^+ + \beta e^{i(\omega t + k - \frac{\Delta x}{2})} \phi_2^- \right) &= e^{-i\tilde{k} + \Delta x} \gamma e^{i(\omega t + \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \left(\tilde{\phi}_+^2 \right)^* .
\end{aligned}$$

• De même en $x_d = \frac{\Delta x}{2}$ on a :

$$\begin{aligned}
e^{i\omega \Delta t} \gamma \left(e^{i(\omega t - \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \tilde{\phi}_0^+ \right) &= \gamma e^{i(\omega t - \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \left(\tilde{\phi}_0^+ \right)^* \\
e^{i\omega \Delta t} \gamma \left(e^{i(\omega t - \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \tilde{\phi}_1^+ \right) &= e^{ik + \Delta x} \left(e^{i(\omega t - k + \frac{\Delta x}{2})} (\phi_1^+)^* \right) + \\
&+ e^{ik - \Delta x} \left(\beta e^{i(\omega t - k - \frac{\Delta x}{2})} (\phi_1^-)^* \right) , \\
e^{i\omega \Delta t} \gamma \left(e^{i(\omega t - \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \tilde{\phi}_2^+ \right) &= \gamma e^{-i\tilde{k} + \Delta x} e^{i(\omega t - \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \left(\tilde{\phi}_2^+ \right)^* .
\end{aligned}$$

On utilise le fait qu'on a des vecteurs propres :

$$\begin{aligned}
z\phi^+ &= A (\phi^+)^* , \\
z\phi^- &= A (\phi^-)^* , \\
z\tilde{\phi}^+ &= A (\tilde{\phi}^+)^* .
\end{aligned}$$

On remplace alors les $(\phi_i)^*$ dans les six équations. Il ne reste alors que les deux équations utiles suivantes :

$$\begin{aligned}
e^{i\omega \Delta t} \left(e^{i(\omega t + k + \frac{\Delta x}{2})} \phi_2^+ + \beta e^{i(\omega t + k - \frac{\Delta x}{2})} \phi_2^- \right) &= \\
&= e^{-i\tilde{k} + \Delta x} \gamma e^{i(\omega t + \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \left(e^{i\tilde{k} + \Delta x} e^{i\omega \Delta t} \tilde{\phi}_+^2 \right) , \\
e^{i\omega \Delta t} \gamma \left(e^{i(\omega t - \tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \tilde{\phi}_1^+ \right) &= e^{ik + \Delta x} \left(e^{i(\omega t - k + \frac{\Delta x}{2})} e^{-ik + \Delta x} e^{i\omega \Delta t} \phi_1^+ \right) + \\
&+ e^{ik - \Delta x} \left(\beta e^{i(\omega t - k - \frac{\Delta x}{2})} e^{-ik - \Delta x} e^{i\omega \Delta t} \phi_1^- \right) .
\end{aligned}$$

Après simplification on obtient :

$$\begin{aligned}
e^{i(k + \frac{\Delta x}{2})} \phi_2^+ + \beta e^{i(k - \frac{\Delta x}{2})} \phi_2^- &= \gamma e^{i(\tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \tilde{\phi}_+^2 , \\
\gamma e^{-i(\tilde{k} + \frac{\Delta x}{2})} \tilde{\phi}_1^+ &= e^{-i(k + \frac{\Delta x}{2})} \phi_1^+ + \beta e^{-i(k - \frac{\Delta x}{2})} \phi_1^- .
\end{aligned}$$

On multiplie le système précédent par $e^{i(k+\frac{\Delta x}{2})}$ d'où :

$$e^{i(k+\Delta x)}\phi_2^+ + \beta\phi_2^- = \gamma e^{i(\tilde{k}+k+)\frac{\Delta x}{2}}\tilde{\phi}_2^+,$$

$$e^{-i(k+\Delta x)}\phi_1^+ + \beta\phi_1^- = \gamma e^{-i(\tilde{k}+k+)\frac{\Delta x}{2}}\tilde{\phi}_1^+.$$

On remplace alors $p = e^{ik+\Delta x}$ et $\tilde{p} = e^{i\tilde{k}+\Delta x}$, soit :

$$p\phi_2^+ + \beta\phi_2^- = \gamma\sqrt{p\tilde{p}}\tilde{\phi}_2^+,$$

$$\frac{1}{p}\phi_1^+ + \beta\phi_1^- = \frac{\gamma}{\sqrt{p\tilde{p}}}\tilde{\phi}_1^+.$$

En utilisant les expressions des vecteurs propres (5.27), (5.28) et (5.30), on obtient :

$$p\phi_2^+ + \beta\frac{1-\frac{z}{p}}{1-pz}\phi_1^- = \gamma\sqrt{p\tilde{p}}\frac{1-\frac{z}{\tilde{p}}}{1-\tilde{p}z}\tilde{\phi}_1^+,$$

$$\frac{1-pz}{p(1-\frac{z}{p})}\phi_2^+ + \beta\phi_1^- = \frac{\gamma}{\sqrt{p\tilde{p}}}\tilde{\phi}_1^+.$$

On multiplie la première équation par $\frac{1-\tilde{p}z}{p\tilde{p}}$ et la deuxième par $(1-\frac{z}{p})$ et on prend la différence des deux. On obtient alors :

$$\left(\frac{1-\tilde{p}z}{\tilde{p}} - \frac{(1-\frac{z}{p})(1-pz)}{p(1-\frac{z}{p})}\right)\phi_2^+ + \beta\left(\frac{(1-pz)(1-\tilde{p}z)}{p\tilde{p}(1-\frac{z}{p})} - (1-\frac{z}{\tilde{p}})\right)\phi_1^- = 0$$

On réduit au même dénominateur :

$$\begin{aligned} &\left(\frac{(1-\tilde{p}z)(p-z) - (\tilde{p}-z)(1-pz)}{(p-z)\tilde{p}}\right)\phi_2^+ + \\ &+ \beta\left(\frac{(1-pz)(1-\tilde{p}z) - (\tilde{p}-z)(p-z)}{(p-z)\tilde{p}}\right)\phi_1^- = 0. \end{aligned}$$

On a alors :

$$\beta = \left(\frac{(\tilde{p}-z)(1-pz) - (1-\tilde{p}z)(p-z)}{(1-pz)(1-\tilde{p}z) - (\tilde{p}-z)(p-z)}\right)\frac{\phi_2^+}{\phi_1^-} = \left(\frac{\tilde{p}-p}{1-p\tilde{p}}\right)\frac{\phi_2^+}{\phi_1^-}.$$

D'après l'expression de ϕ^+ et ϕ^- , on a $\phi_1^+ = \phi_2^-$ et $\phi_2^+ = \phi_1^-$.

Le coefficient de réflexion est donné par

$$r_B = \frac{J_r}{J_i}.$$

Comme $J_i = \phi_1^+ - \phi_2^+$ et $J_r = \beta(\phi_1^- - \phi_2^-) = -\beta(\phi_1^+ - \phi_2^+)$, on conclut :

$$r_B = -\beta = \frac{p-\tilde{p}}{1-p\tilde{p}}. \quad (5.31)$$

□

Proposition 31 Développement de r_B en ω à l'ordre 1 relativement à la pulsation ω .

On a

$$r_B = \frac{c_s - \tilde{c}_s}{c_s + \tilde{c}_s} + \frac{i(\nu\tilde{c}_s^2 - \tilde{\nu}c_s^2)}{c_s\tilde{c}_s(c_s + \tilde{c}_s)^2} \omega + O(\omega^2). \quad (5.32)$$

On retrouve bien le développement du coefficient de réflexion théorique donné par (5.14). Notons que les termes du second ordre des expressions (5.3) et (5.29) diffèrent.

Preuve: Il suffit de remplacer p et $\tilde{p}$ dans l'expression de r par leur développement (5.22) en ω , et de faire le développement de r . $\square$

4 Vers l'annulation de l'onde réfléchie

On se propose de modifier l'étape d'advection à l'interface. En effet on a *a priori* $f_1(x_d, t + \Delta t) = f_1^*(x_g, t)$. Nous proposons ici que f_1 au point $x_d = \frac{\Delta x}{2}$ soit une combinaison de f_1^* en $x_g = -\frac{\Delta x}{2}$ et de f_1^* en $x = x_g - \Delta x = -\frac{3\Delta x}{2}$ (voir Fig. 5.3). Par contre on ne change pas l'étape d'advection pour f_2 qui va dans la direction opposée. Ainsi on obtient le schéma d'interface suivant :

$$\begin{aligned} f_1(t + \Delta t, x) &= \delta_1 f_1^*(t, x - \Delta x) + \delta_2 f_1^*(t, x - 2\Delta x), & \text{en } x = \frac{\Delta x}{2}, \\ f_2(t + \Delta t, x) &= f_2^*(t, x + \Delta x), & \text{en } x = -\frac{\Delta x}{2}, \end{aligned}$$

avec δ_1 et δ_2 deux scalaires à déterminer pour annuler la réflexion.

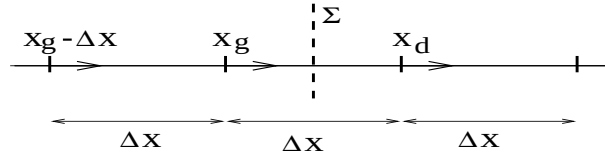


FIG. 5.3 – Connexion à l'interface.

Proposition 32 Annulation du coefficient de réflexion à l'ordre 1 en ω .

Pour le modèle de Boltzmann D1Q3 monodimensionnel à trois vitesses pour l'acoustique, on peut trouver des coefficients δ_1 et δ_2 afin d'annuler les termes d'ordre 0 et 1 en ω du coefficient de réflexion.

$$\delta_1 = \frac{\lambda\tilde{c}(\lambda - \tilde{c})(\lambda + \tilde{c})\nu - \lambda c(\lambda - c)(\lambda + c)\tilde{\nu} + \lambda\Delta t\tilde{c}(\lambda - \tilde{c})(\lambda + \tilde{c})(\lambda - c)(\lambda + c)}{\Delta t\lambda\tilde{c}(\lambda - \tilde{c})^2(\lambda + c)^2},$$

$$\delta_2 = \frac{-\lambda\tilde{c}(\lambda - \tilde{c})(\lambda + \tilde{c})\nu + \lambda c(\lambda - c)(\lambda + c)\tilde{\nu}}{\Delta t\lambda\tilde{c}(\lambda - \tilde{c})^2(\lambda + c)^2}.$$

Preuve: on utilise la même technique d'analyse dans un cas harmonique que pour la proposition 30, on trouve alors l'expression suivante du coefficient de réflexion :

$$r_B = -\frac{p^2(z - \tilde{p})(zp - 1)\delta_2 + p(z - \tilde{p})(zp - 1)\delta_1 + p(z\tilde{p} - 1)(p - z)}{(z - \tilde{p})(p - z)\delta_2 + p(z - \tilde{p})(p - z)\delta_1 + p(z\tilde{p} - 1)(zp - 1)}.$$

On cherche alors δ_1 et δ_2 tels que $r_B = O(\omega^2)$. On retrouve alors δ_1 et δ_2 . $\square$

Tests numériques

On discrétise Ω_+ et Ω_- par des sommets x_i avec $1 \leq i \leq 1000$ pour Ω_+ et $1001 \leq i \leq 2000$ pour Ω_- . Les paramètres acoustiques correspondants sont respectivement $(c_s = 0.577, \nu = 0.001)$ et $(\tilde{c}_s = 0.479, \tilde{\nu} = 0.2)$. On se donne une onde acoustique de fréquence $\omega = \frac{2\pi}{100}$ à l'entrée ($x_i = 0$) et on arrête la simulation au temps $T = n\Delta t = 1500\Delta t$, avant que cette onde n'ait atteint la sortie du domaine (voir Fig. 5.4).

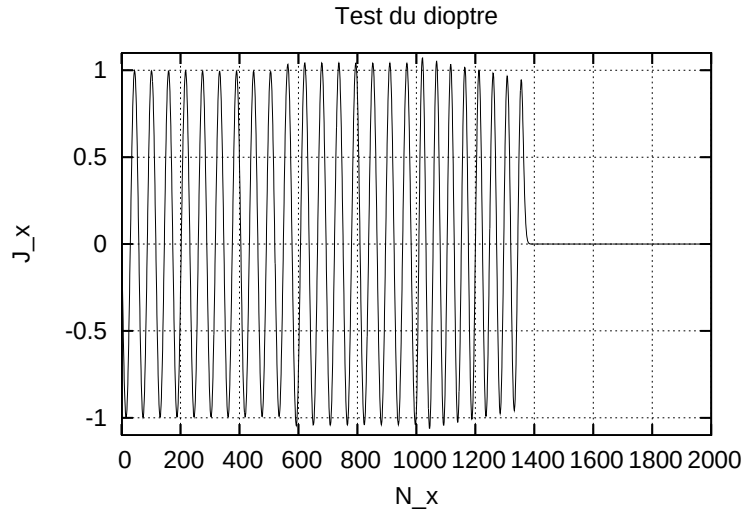


FIG. 5.4 – Onde acoustique, dioptré en $x_i = 1000$ et $T = 1500$.

Pour déterminer l'onde réfléchie on réalise une autre simulation dans un domaine $\Omega_R = \{x_i, 0 < i < 2000\}$ qui a la même configuration que le domaine Ω_+ . Cette simulation nous fournit la solution de référence. Pour voir l'onde réfléchie on trace la différence entre le flux J_x obtenu dans le cas test et le flux J_x obtenu par la solution de référence. La figure ((a) 5.5) montre qu'on a une onde réfléchie de l'ordre de 10^{-1} lorsqu'on ne change pas l'étape d'advection à l'interface. Dans la figure ((b) 5.5), où on change l'étape d'advection via δ_1 et δ_2 , on a une onde réfléchie d'ordre 10^{-4} .

Conclusion

On a utilisé une méthode théorique basée sur l'analyse des modes du schéma de Boltzmann et l'étude détaillée de l'équation dynamique à l'interface. Ainsi dans le

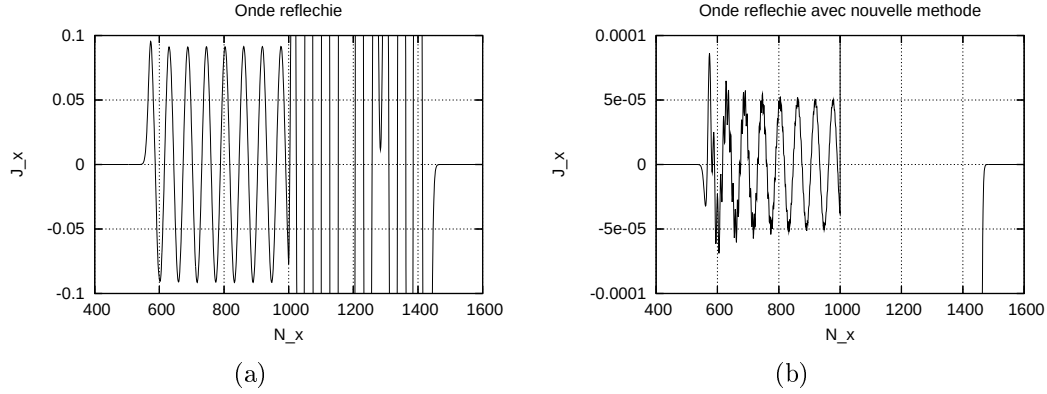


FIG. 5.5 – J_x en fonction de N_x , différence entre le cas test et le cas de référence. (a) sans changement de l'étape d'advection, (b) avec modification de l'étape d'advection.

cas monodimensionnel, on obtient la formule de connexion qui est la généralisation des formules de Fresnel où on remplace le nombre d'onde k par le facteur de phase $p = e^{ik\Delta x}$. On a aussi proposé une méthode basée sur la modification de l'étape d'advection à l'interface pour annuler la réflexion à l'ordre 2 en ω . On peut par ailleurs avoir une réflexion nulle à l'ordre 3 en ω en utilisant une interpolation à trois points à l'interface.

5 Interface numérique entre deux milieux D2Q9*

Introduction

Dans cette partie on va étudier la transmission monodimensionnelle d'une onde acoustique entre deux milieux fluides. Ces deux milieux sont équivalents du point de vue hydrodynamique mais différent par leur distribution d'équilibre. L'étude théorique du schéma pour une incidence normale à l'interface nous conduit à mettre en évidence l'existence d'une onde réfléchie et des modes de Knudsen localisés à l'interface. Finalement on retrouve numériquement le même phénomène.

Interface entre deux domaines D2Q9

Soit $\Omega_1 \equiv \{(x, y); x < 0\}$, $\Omega_2 \equiv \{(x, y); x > 0\}$ deux domaines séparés par l'interface $\Sigma \equiv \{(x, y); x = 0\}$. On suppose qu'on a le même problème acoustique

*Article soumis "On numerical reflected waves in lattice Boltzmann schemes" avec Mah'med Bouzidi, François Dubois et Pierre Lallemand.

suivant dans les deux milieux Ω_1 et Ω_2 :

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} j & = 0, \\ \frac{\partial j_x}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} - \zeta \frac{\partial(\operatorname{div} j)}{\partial x} - \nu \Delta j_x & = 0, \\ \frac{\partial j_y}{\partial t} + c_s^2 \frac{\partial \rho}{\partial y} - \zeta \frac{\partial(\operatorname{div} j)}{\partial y} - \nu \Delta j_y & = 0, \end{cases} \quad (5.33)$$

où c_s est la vitesse du son et ζ, ν sont respectivement les viscosités cinématiques de volume et de cisaillement. Pour modéliser le problème (5.33), on va utiliser le schéma D2Q9 de Boltzmann sur réseau (voir la proposition 9). On fixe alors comme suit les moments d'équilibre et les paramètres de relaxation : $m_3^{eq} = -2\rho$, $m_4^{eq} = \alpha_\epsilon \rho$, $m_5^{eq} = -\frac{j_x}{\lambda}$, $m_6^{eq} = -\frac{j_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = 0$, $m_8^{eq} = 0$ et $s_7 = s_8$. Ainsi on a la vitesse du son $c_s^2 = \frac{\lambda^2}{3}$, la viscosité de volume $\zeta = \frac{\lambda^2 \Delta t}{3}(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2})$ et la viscosité de cisaillement $\nu = \frac{\lambda^2 \Delta t}{3}(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2})$. On remarque ici que le coefficient α_ϵ de la valeur d'équilibre du moment m_4 (qui est le moment associé au carré de l'énergie cinétique) n'apparaît pas dans les équations hydrodynamiques (*i.e* au moins à l'ordre deux il ne joue pas de rôle). Pour mieux comprendre le rôle de α_ϵ , on va étudier la transmission d'une onde acoustique entre les deux milieux Ω_1 et Ω_2 qui n'ont pas le même coefficient α_ϵ . Intuitivement on n'aura pas d'onde réfléchie par le dioptré Σ . On prend alors $m_4^{eq} = \alpha_\epsilon \rho$ dans le milieu Ω_1 et $\tilde{m}_4^{eq} = \tilde{\alpha}_\epsilon \rho$ dans le milieu Ω_2 .

Pour analyser le dioptré, on va utiliser la même méthode qu'on a utilisée dans la section 3 de ce chapitre pour les modèles D1Q3 en 1-D. Cette méthode consiste à trouver les mode propres et vecteurs propres du schéma D2Q9. Ensuite on écrit un pas de temps de l'algorithme Boltzmann sur réseau à gauche et à droite de l'interface. Cela nous fournit un système d'équations qui nous permet de calculer les différentes amplitudes des différentes ondes à gauche et à droite de l'interface.

Etude modale du modèle D2Q9

On va faire la même étude que celle qui a été utilisée pour le modèle D1Q3. Pour simplifier l'étude on ne considèrera que le cas de l'incidence normale sur l'interface Σ . Ainsi le vecteur d'onde k est parallèle à l'axe des x (*i.e* $k = (k_x, 0)$). Soit $f(x, t) = e^{i(\omega t - k \cdot x)} \phi$ solution du schéma de Boltzmann. On a alors d'après la proposition 15 : l'équation d'évolution de l'algorithme D2Q9 (1.84) :

$$f_j(x_i, t + \Delta t) = f_j^*(x_i - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq 8,$$

s'écrit sous la forme :

$$z f(x, t) = G(p) f(x, t) \quad \text{où} \quad z = e^{(i\omega \Delta t)}, \quad p = e^{(ik_x \Delta x)}, \quad (5.34)$$

et

$$G(p) = A(I + M^{-1}CM)$$

est la matrice globale du schéma. La matrice A est donnée par (1.87), soit en remplaçant k par $(k_x, 0)$:

$$A = \operatorname{diag}(1, p, 1, \frac{1}{p}, 1, p, \frac{1}{p}, \frac{1}{p}, p),$$

la matrice M est donnée par (1.45) :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda & \lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda & -\lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

et la matrice C est donnée par (1.86) :

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2s_3 & 0 & 0 & 1-s_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s_4\alpha_\epsilon & 0 & 0 & 0 & 1-s_4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{s_5}{\lambda} & 0 & 0 & 1-s_5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{s_6}{\lambda} & 0 & 0 & 1-s_6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1-s_8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1-s_8 & 0 \end{pmatrix}.$$

De plus d'après la proposition 16, l'équation de dispersion s'écrit :

$$\det[G(p) - zId] = 0, \quad \text{avec } z = e^{i\omega\Delta t}. \quad (5.35)$$

A l'inverse du problème de stabilité où à k (*i. e.* p) donné, on cherche ω (*i. e.* z) solution de l'équation de dispersion (5.35), dans notre problème la fréquence ω est imposée pour les deux milieux et on cherche alors k (*i. e.* p) solution de l'équation de dispersion (5.35).

On se donne alors une fréquence ω , et on résout en p l'équation (5.35) qui est un polynôme de degré 3 en $(p + \frac{1}{p})$. On note que si on utilise la matrice des moments suivante :

$$\tilde{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda & \lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda & -\lambda \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.36)$$

alors la matrice $\widetilde{M}(G(p) - zI)\widetilde{M}^{-1}$ est digonale par blocs de la forme :

$$\widetilde{M}(G(p) - zI)\widetilde{M}^{-1} = \left(\begin{array}{ccc|ccc} & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 \\ & & D_1(p) & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & & D_2(p) & \end{array} \right).$$

Sachant que :

$$\det(G(p) - zI) = \det(\widetilde{M}(G(p) - zI)\widetilde{M}^{-1}) = \det(D_1(p))\det(D_2(p)), \quad (5.37)$$

résoudre l'équation (5.35) revient à résoudre $\det(D_1(p)) = 0$ (équation polynômiale de degré 2 en $(p + \frac{1}{p})$) et $\det(D_2(p)) = 0$ (équation polynômiale de degré 1 en $(p + \frac{1}{p})$).

• Modes du modèle D2Q9 : On trouve six solutions (les zéros de l'équation de dispersion (5.37)) en p qui sont fonctions de z , et des différents paramètres d'équilibre et des taux de relaxation s_i . On va seulement donner les développements asymptotiques en ω de ces solutions :

$$p_+ = 1 + i\frac{\omega}{c_s} + O(\omega^2), \quad (5.38)$$

$$p_- = 1 - i\frac{\omega}{c_s} + O(\omega^2), \quad (5.39)$$

$$p_{K,1} = \alpha_1 + \beta_1\omega + O(\omega^2), \text{ avec } \alpha_1 < -1, \quad (5.40)$$

$$p_{K,2} = \alpha_2 + \beta_2\omega + O(\omega^2), \text{ avec } -1 < \alpha_2 < 0, \quad (5.41)$$

$$p_{t,1} = 1 + (\alpha_{t,1} + i\beta_{t,1})\sqrt{\omega} + i\gamma_{t,1}\omega + O(\omega\sqrt{\omega}), \quad (5.42)$$

$$p_{t,2} = 1 + (\alpha_{t,2} + i\beta_{t,2})\sqrt{\omega} + i\gamma_{t,2}\omega + O(\omega\sqrt{\omega}). \quad (5.43)$$

On remarque que p_+ et p_- correspondent aux modes hydrodynamiques associés respectivement aux ondes acoustiques qui se propagent avec une vitesse $\pm c_s$, $p_{k,1}$ et $p_{k,2}$ sont associés aux modes de Knudsen [CdHL91]. Les deux solutions $p_{t,1}$ et $p_{t,2}$ sont associées aux ondes transverses, de plus on a :

$$(\alpha_{t,1} + i\beta_{t,1}) = \frac{1}{\sqrt{\nu}} \frac{(1+i)}{\sqrt{2}} \quad \text{et} \quad (\alpha_{t,2} + i\beta_{t,2}) = -\frac{1}{\sqrt{\nu}} \frac{(1+i)}{\sqrt{2}}.$$

Les expressions de α_1 et α_2 , termes d'ordre zéro dans le développement des facteurs de phase de Knudsen $p_{k,1}$ et $p_{k,2}$, sont des fonctions complexes des taux de relaxation s_i et α_ϵ . Dans le cas particulier BGK où on a le même taux de relaxation (*i. e.* $s_i = s$), on a une expression simple de $p_{k,1}$ et de $p_{k,2}$:

$$p_{K,1} = \frac{1-s}{z} = (1-s) - i(1-s)\omega + O(\omega^2),$$

$$p_{K,2} = \frac{z}{1-s} = \frac{1}{1-s} + i\frac{1}{1-s}\omega + O(\omega^2).$$

• Vecteurs propres : Comme dans notre problème on ne considère que le cas d'une incidence normale à l'interface Σ , alors les modes transverses n'apparaissent pas

(i. e. ne sont pas excités). Pour cela on ne va pas considérer ces modes transverses dans notre analyse.

Remarque 19 On note que pour une incidence quelconque sur l'interface on perd la séparation entre les modes longitudinaux et transverses. C'est-à-dire on n'aura plus la factorisation du polynôme $\det(G(p) - zI)$ à l'aide de la matrice $\widetilde{M}$ (5.36) qui simplifie le calcul des valeurs propres.

On cherche alors les ϕ_p vecteurs propres de la matrice $G(p)$. Soient ϕ_+ , ϕ_- les vecteurs propres associés à $p_{\pm}$ et $\phi_{k,1}$, $\phi_{k,2}$ les vecteurs propres associés à $p_{k,1}$ et $p_{k,2}$.

Analyse du problème de l'interface

Dans le milieu Ω_1 à gauche de l'interface, on a une onde incidente et une onde réfléchie. On écrit la solution f_g sous la forme :

$$f_g = z^n p_+^m \phi_+ + \beta_1 z^n p_-^m \phi_- + \eta_1 z^n p_{K,1}^m \phi_{K,1} + \delta_1 z^n p_{K,2}^m \phi_{K,2}. \quad (5.44)$$

A droite de l'interface, dans le milieu Ω_2 on écrit la solution sous la forme :

$$f_d = \gamma_2 z^n \widetilde{p}_+^m \widetilde{\phi}_+ + \eta_2 z^n \widetilde{p}_{K,1}^m \widetilde{\phi}_{K,1} + \delta_2 z^n \widetilde{p}_{K,2}^m \widetilde{\phi}_{K,2}. \quad (5.45)$$

avec seulement une onde transmise. Comme on s'intéresse localement à l'interface $\Sigma = \{(x, y); x = 0\}$, on fixe $\eta_2 = 0$ et $\delta_1 = 0$ pour annuler les modes de Knudsen croissant exponentiellement à gauche et à droite de l'interface. Car ces modes n'ont pas de sens physique.

On a quatre coefficients inconnus : les deux scalaires β_1 et γ_2 qui déterminent les coefficients de réflexion $r = \beta_1 \frac{\langle \phi_-, \mathbf{j}_x \rangle}{\langle \phi_+, \mathbf{j}_x \rangle}$ et de transmission $t = \gamma_2 \frac{\langle \widetilde{\phi}_+, \mathbf{j}_x \rangle}{\langle \phi_+, \mathbf{j}_x \rangle}$, avec $\mathbf{j}_x \equiv (0, 1, 0, -1, 0, 1, -1, 1)$ et le symbole $\langle ., . \rangle$ est le produit scalaire dans $\mathbb{R}^9$. Les deux scalaires η_1 et δ_2 qui déterminent les amplitudes des modes de Knudsen. Pour déterminer ces coefficients, on va écrire un pas de temps du schéma Boltzmann sur réseau dans les nœuds voisins de l'interface Σ ($x_g = -\frac{\Delta x}{2}$ le nœud à gauche de l'interface et $x_d = \frac{\Delta x}{2}$ le nœud à droite de l'interface). En effet on écrit le schéma de Boltzmann :

$$f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \Delta t), \quad 0 \leq j \leq 8,$$

pour $f = f_g$ (5.44) et $f = f_d$ (5.45) et en utilisant :

$$z\phi = G(p)\phi = A\phi^*,$$

propriété des vecteurs propres qui découle de (5.34). On obtient :

- pour $j = 3$ et $j = 6$ en $x_g = -\frac{\Delta x}{2}$:

$$\sqrt{p_+} \phi_3^+ + \beta_1 \sqrt{p_-} \phi_3^- + \eta_1 \sqrt{p_{K,1}} \phi_3^{K,1} = \gamma_2 \sqrt{\widetilde{p}_+} \widetilde{\phi}_3^+ + \delta_2 \sqrt{\widetilde{p}_{K,2}} \widetilde{\phi}_3^{K,2}, \quad (5.46)$$

$$\sqrt{p_+} \phi_6^+ + \beta_1 \sqrt{p_-} \phi_6^- + \eta_1 \sqrt{p_{K,1}} \phi_6^{K,1} = \gamma_2 \sqrt{\widetilde{p}_+} \widetilde{\phi}_6^+ + \delta_2 \sqrt{\widetilde{p}_{K,2}} \widetilde{\phi}_6^{K,2}. \quad (5.47)$$

- pour $j = 1$ et $j = 5$ en $x_d = \frac{\Delta x}{2}$:

$$\frac{1}{\sqrt{p_+}}\phi_1^+ + \beta_1 \frac{1}{\sqrt{p_-}}\phi_1^- + \eta_1 \frac{1}{\sqrt{p_{K,1}}}\phi_1^{K,1} = \gamma_2 \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}_+}}\tilde{\phi}_1^+ + \delta_2 \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}_{K,2}}}\tilde{\phi}_1^{K,2}, \quad (5.48)$$

$$\frac{1}{\sqrt{p_+}}\phi_5^+ + \beta_1 \frac{1}{\sqrt{p_-}}\phi_5^- + \eta_1 \frac{1}{\sqrt{p_{K,1}}}\phi_5^{K,1} = \gamma_2 \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}_+}}\tilde{\phi}_5^+ + \delta_2 \frac{1}{\sqrt{\tilde{p}_{K,2}}}\tilde{\phi}_5^{K,2}. \quad (5.49)$$

Le système d'équations (5.46), (5.47), (5.48) et (5.49) nous fournit les coefficients inconnus β_1 , γ_2 , η_1 et δ_2 qui sont fonctions des différents vecteurs propres et des facteurs de phase p . Dans le cas général on ne peut pas calculer le développement limité en ω des différents coefficients β_1 , γ_2 , η_1 et δ_2 sauf pour des cas particuliers (*e.g.* BGK ou dans le cas du schéma D1Q3 voir la proposition 30). Par contre on peut avoir les développements en ω en fixant les différents paramètres du schéma (*i.e.* taux de relaxation s_i , moments d'équilibres, ...) et en utilisant un logiciel de calcul symbolique. Finalement pour valider nos calculs théoriques on les compare aux résultats numériques obtenus par le schéma D2Q9.

Comparaison entre les résultats théoriques et les résultats numériques

Dans cette partie on va comparer d'une part les résultats obtenus par l'analyse modale du schéma D2Q9 décrite dans la partie précédente et d'autre part les résultats obtenus par les tests numériques de l'automate D2Q9.

Résultats numériques

On va simuler la transmission monodimensionnelle entre deux milieux qui ont le même système d'équations équivalentes (5.33) et des distributions d'équilibre différentes à l'aide du schéma de Boltzmann su réseau D2Q9.

Soit le domaine discret $\Omega = [0, l] \times [0, h] = \{x_{i,j}, 1 \leq i \leq 4000, 1 \leq j \leq 5\}$ composé du milieu $\Omega_- = [0, \frac{l}{2}] \times [0, h]$ et de milieu $\Omega_+ = [\frac{l}{2}, l] \times [0, h]$.

- Dans le milieu Ω_- composé par les sommets $x_{i,j}$ avec $1 \leq i \leq 2000$ et $1 \leq j \leq 5$. On utilise le schéma D2Q9 avec la configuration suivante pour les moments d'équilibre : $m_3^{eq} = -2\rho$, $m_4^{eq} = \alpha_\epsilon \rho$, $q_x = -\frac{j_x}{\lambda}$, $q_y = -\frac{j_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = 0$, $m_8^{eq} = 0$.

- Dans Ω_+ milieu composé par les sommets $x_{i,j}$ avec $2000 < i \leq 4000$ et $1 \leq j \leq 5$, on utilise le schéma D2Q9 avec la configuration suivante : $m_3^{eq} = -2\rho$, $m_4^{eq} = \tilde{\alpha}_\epsilon \rho$, $q_x = -\frac{j_x}{\lambda}$, $q_y = -\frac{j_y}{\lambda}$, $m_7^{eq} = 0$, $m_8^{eq} = 0$.

Dans un premier temps on va prendre les mêmes paramètres de relaxations s_i dans les deux milieux Ω_- et Ω_+ (*i.e.* $s_s = \tilde{s}_3$, $s_4 = \tilde{s}_4$, $s_5 = s_6 = \tilde{s}_5 = \tilde{s}_6$ et $s_7 = s_8 = \tilde{s}_7 = \tilde{s}_8$). Pour les conditions aux limites on prend des conditions périodiques en y et des conditions de rebond pur (dites "bounce-back", voir chapitre 1 section 6) sur les nœuds de sortie du domaine (*i.e.* l'ensemble des nœuds $\{x_{i,j}, i = 4000, 1 \leq j \leq 5\}$). A l'entrée du domaine Ω , (*i.e.* l'ensemble des nœuds $\{x_{i,j}, i = 1, 1 \leq j \leq 5\}$), on impose une onde harmonique $J_x = \sin(\omega \Delta t)$ avec $\omega = \frac{2\pi}{100}$ (voir chapitre 1 section 6 pour l'implémentation). On prend comme condition initiale

le fluide à l'état de repos, et on laisse l'onde se propager jusqu'au temps $T = n\Delta t$ avant que l'onde n'ait atteint la sortie du milieu Ω_+ en $x = l$. (voir Fig. 5.6). Pour déterminer l'onde réfléchie et les modes de Knudsen, on réalise une autre

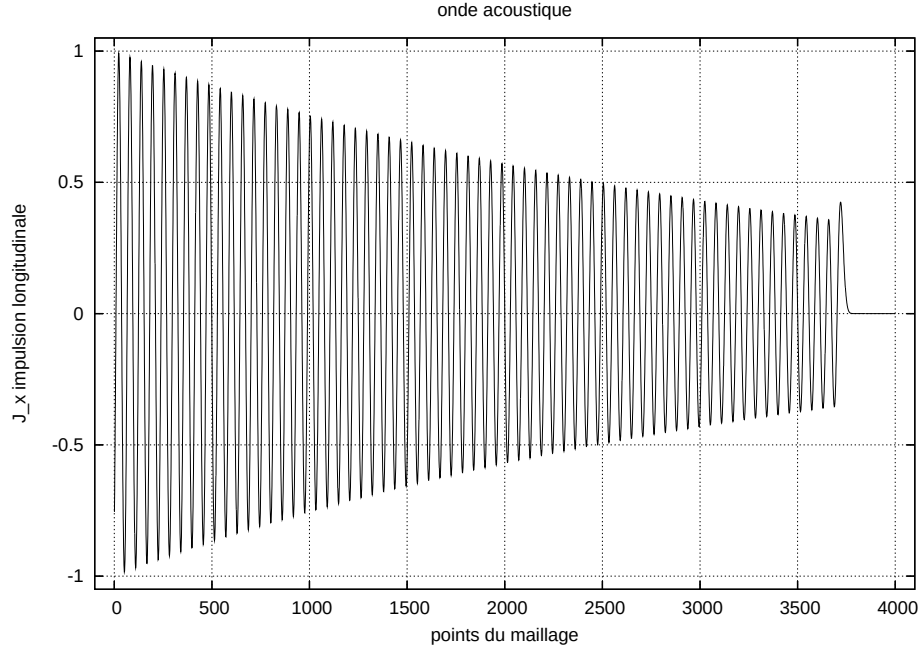


FIG. 5.6 – J_x en fonction de N_x , transmission d'onde entre $\Omega_- = \{x_i, i \in (0 \dots 2000)\}$ avec $\alpha_\epsilon = 1$ et $\Omega_+ = \{x_i, i \in (2000 \dots 4000)\}$ avec $\tilde{\alpha}_\epsilon = \frac{1}{2}$. Au temps $T = 6464$.

simulation dans un domaine $\Omega_R = [0, l] \times [0, h]$ qui a la même configuration que le domaine Ω_- en gardant les mêmes conditions aux limites. Cette simulation nous fournit la solution de référence. Pour voir l'onde réfléchie et les modes de Knudsen on trace la différence entre le flux J_x obtenu dans $\Omega = \Omega_- \cup \Omega_+$ (le cas test) et le flux J_x obtenu dans Ω_R (la solution de référence) après le même nombre d'itérations $T = 6464$. La figure (5.7) montre qu'on a une onde réfléchie de l'ordre de 10^{-6} . On note que cette onde hydrodynamique réfléchie a une petite amplitude ($x_i, i \leq 2000$).

Remarque 20 La quantité $J_x^{ref} - J_x^{test}$ n'est pas nulle pour les nœuds $x_i, i > 2000$. Car on a un changement à l'ordre ω^2 de la vitesse de son du milieu Ω_+ qui est due au changement du coefficient d'équilibre α_ϵ du moment m_4 . Ainsi on a une différence entre la période spatiale de J_x^{ref} et celle de J_x^{test} qu'on peut voir pour les nœuds $x_i, i > 2000$ dans la figure 5.7.

Remarque 21 On a le même ordre de grandeur d'onde réfléchie entre deux milieux qui ont une différence de vitesse de son $\Delta c = (c_s - \tilde{c}_s) = 1.6 \cdot 10^{-5}$ ou qui ont une différence de viscosité de cisaillement $\Delta \nu = (\nu - \tilde{\nu}) = 1.75 \cdot 10^{-4}$.

Pour mettre en évidence les modes de Knudsen, on s'intéresse à l'interface (x_{2000}). On remarque alors que ces modes de Knudsen sont localisés à gauche et à droite de

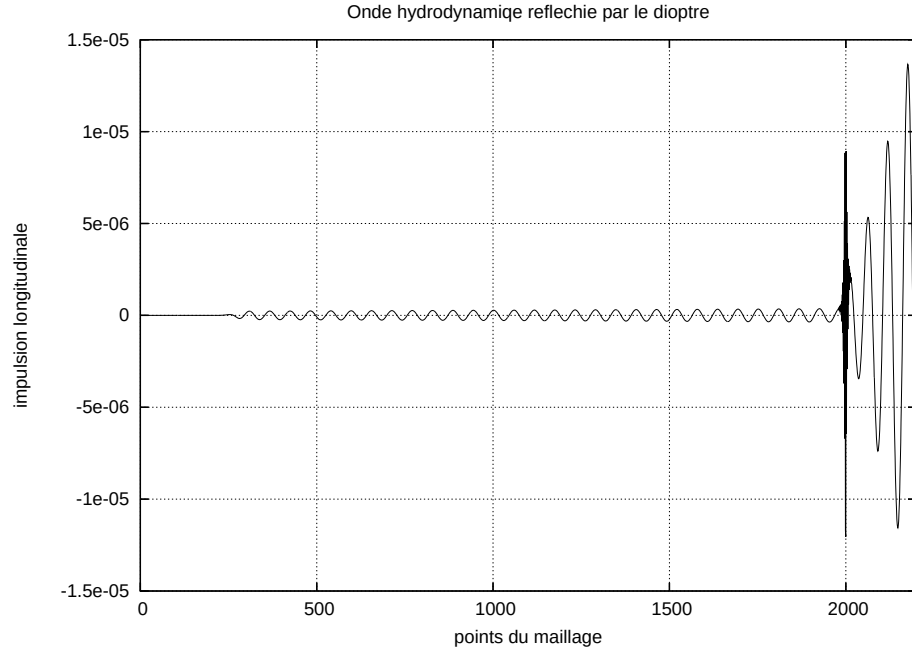


FIG. 5.7 – $J_x^{ref} - J_x^{test}$ en fonction de N_x , la différence entre le cas test et la solution de référence.

l'interface. De plus ils sont décroissants pour des pas succesifs Δx . En effet cette propriété est due aux premiers termes α_1 et α_2 du développement asymptotique (5.40) et (5.41) de $p_{K,1}$ et $p_{K,2}$.

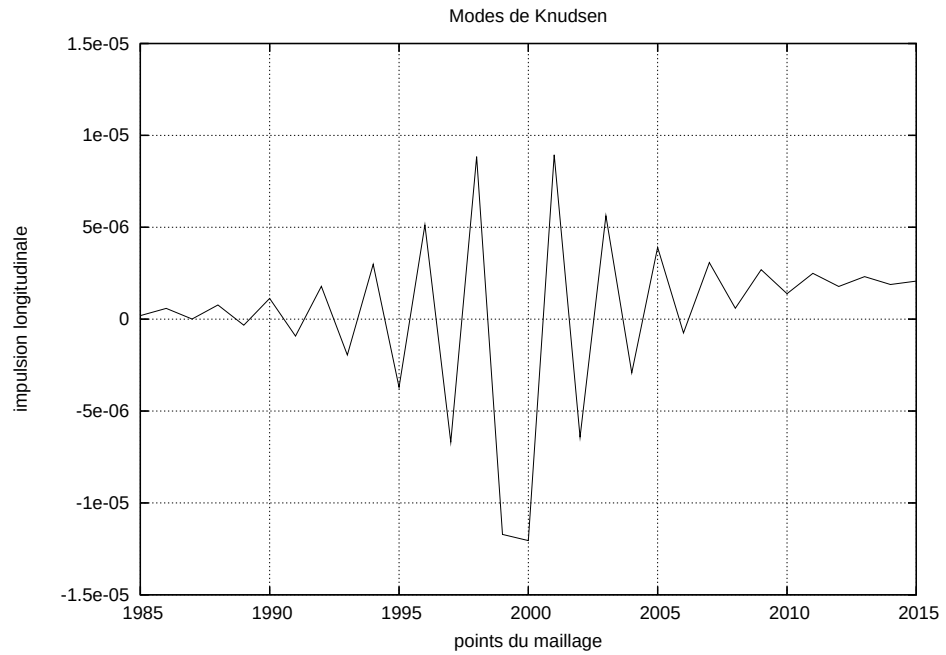


FIG. 5.8 – Détail de la Fig. 5.7. Modes de Knudsen localisés à l'interface.

Comparaison entre les résultats théoriques et numériques

Grâce à la méthode d'analyse modale introduite dans la section précédente “Analyse de l'interface”, on dispose d'une estimation des différents coefficients de réflexion, de transmission et des modes de Knudsen. On compare alors ces résultats théoriques aux résultats obtenus numériquement.

Dans la figure 5.9, on a l'amplitude du mode de Knudsen en fonction du coefficient $\tilde{\alpha}_\epsilon$ du moment d'équilibre $\tilde{m}_4^{eq}$ dans le milieu Ω_+ , en gardant fixe le coefficient $\alpha_\epsilon = 1$ dans le milieu Ω_- (i. e. $m_4^{eq} = \rho$ dans le milieu Ω_-). Les courbes nous montrent que la méthode théorique nous donne des résultats en accord avec les tests numériques.

Remarque 22 On retrouve que l'amplitude η des modes de Knudsen est une fonction linéaire en $\Delta\alpha_\epsilon \equiv (\alpha_\epsilon - \tilde{\alpha}_\epsilon)$, comme le montre la figure 5.9. De plus, dans la cas particulier où les taux de relaxation sont égaux (i. e. $s_i = s$), l'analyse modale de l'équation (5.35) nous donne le développement en ω de l'amplitude des modes de Knudsen :

$$\eta_1 = \sqrt{1-s}(\alpha_\epsilon - \tilde{\alpha}_\epsilon)\Delta t\omega + O(\omega^2) \quad \text{and} \quad \delta_2 = -\sqrt{1-s}(\alpha_\epsilon - \tilde{\alpha}_\epsilon)\Delta t\omega + O(\omega^2).$$

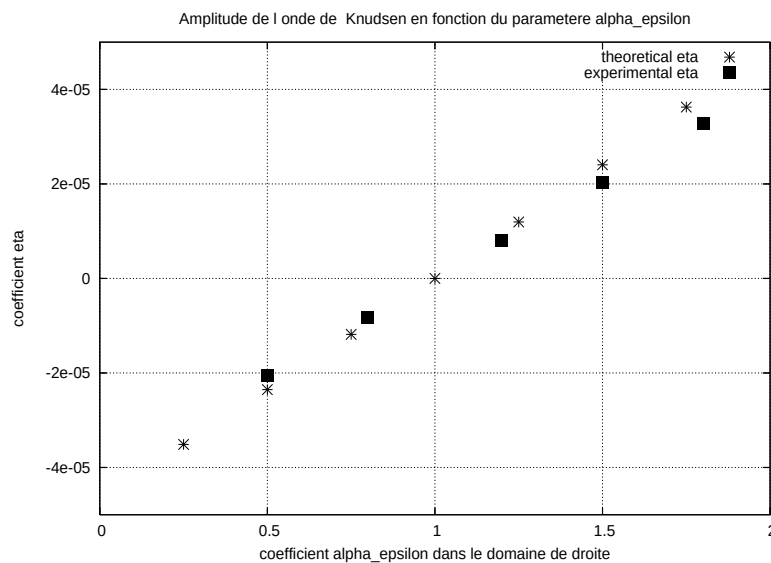


FIG. 5.9 – Amplitude de Knudsen η en fonction $\tilde{\alpha}_\epsilon$ coefficient du moment d'équilibre de $\tilde{m}_4^{eq}$ dans le milieu Ω_+ , calculée par les deux méthodes.

On a aussi étudié la dépendance des premiers termes α_1 et α_2 du développement asymptotique en ω (5.40) et (5.41) de $p_{K,1}$ et $p_{K,2}$ en fonction du taux de relaxation s_4 du moment m_4 . Sur la figure 5.10, on a α_1 , α_2 en fonction de s_4 dans le cas où $m_4^{eq} = \rho$ (i. e. $\alpha_\epsilon = 1$) dans le milieu Ω_- et $\tilde{m}_4^{eq} = \frac{1}{2}\rho$ (i. e. $\alpha_\epsilon = \frac{1}{2}$) dans le milieu Ω_+ . Les courbes nous montrent que la méthode théorique nous donne une bonne estimation des coefficients α_1 et α_2 .

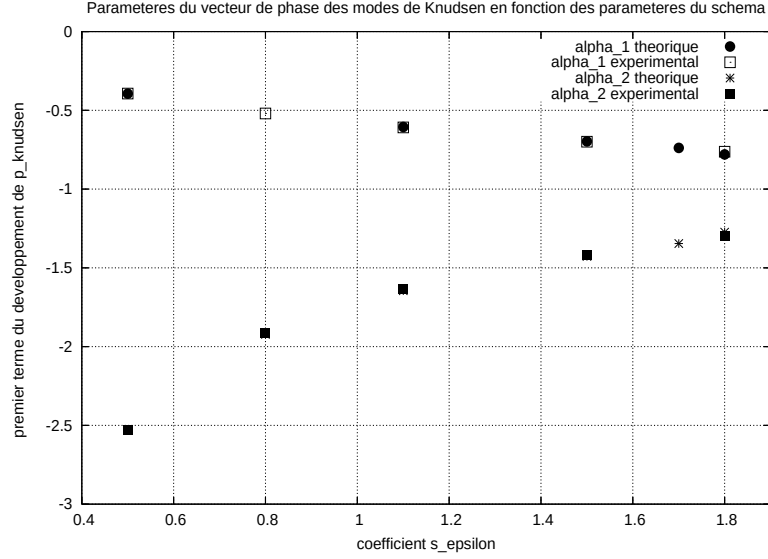


FIG. 5.10 – α_1 , α_2 en fonction du taux de relaxation s_ϵ pour $\epsilon^{eq} = \rho$ dans Ω_- et $\tilde{\epsilon}^{eq} = \frac{1}{2}\rho$ dans Ω_+ calculé par les deux méthodes.

6 Conclusion

Dans ce chapitre on a analysé différents types d'interfaces entre deux milieux de Boltzmann sur réseau D1Q3 et D2Q9. Pour une interface entre deux milieux D1Q3 de viscosité ou de vitesses de son différentes, on peut calculer exactement les différentes ondes générées par l'interface. Cela grâce à la formule de connexion qui est la généralisation des formules de Fresnel où on remplace le nombre d'onde k par le facteur de phase $p = e^{ik\Delta x}$. De plus on a proposé une méthode basée sur la modification de l'étape d'advection à l'interface pour annuler la réflexion à l'ordre deux en ω .

Pour les interfaces entre deux milieux D2Q9, on a utilisé la même méthode modale d'analyse. On a un problème "réel" plus complexe à cause des modes de Knudsen, des ondes transverses (ondes qui n'existaient pas pour le modèle monodimensionnel D1Q3) et du nombre de paramètres du schéma D2Q9 (qui est beaucoup plus important que celui du D1Q3). On a seulement étudié et analysé les interfaces D2Q9 pour une incidence normale (pour simplifier le problème). On a mis en évidence l'existence d'une onde réfléchie et des modes de Knudsen entre deux milieux hydrodynamiquement équivalents. Finalement en D2Q9 on peut aussi modifier l'étape d'advection pour annuler la réflexion, par contre on n'a pas réussi à trouver une relation générale pour prédire les bons coefficients d'interpolation vu la complexité du système et le nombre d'inconnues. Pour le schéma BRB, on conclut que la cause principale de l'onde réfléchie par une interface entre un milieu D2Q9 et un milieu BRB, est la différence de viscosité entre ces deux milieux. De plus comme on a m_4^{eq} dans le milieu D2Q9 différent du m_4^{eq} dans le milieu BRB, cela génère aussi une onde réfléchie (d'amplitude beaucoup moins importante que celle générée par le gradient de viscosité).

Conclusion générale et perspectives

C'est dans le cadre de mathématiques appliquées à la mécanique des fluides que s'inscrit ce travail. Tout d'abord nous avons étudié en détail la méthode de Boltzmann sur réseau. En effet nous avons utilisé la méthode de l'équation équivalente pour retrouver les équations macroscopiques modélisées par le schéma dans le cas mono et bidimensionnel. Ensuite nous avons étudié de façon expérimentale la stabilité du schéma dans le cas linéaire et nonlinéaire. Nous remarquons alors l'efficacité de la méthode de Boltzmann pour des petites vitesses d'advection et la simplicité de la mise en œuvre. Par contre la méthode est instable dès qu'il y a des grandes vitesses d'advection ou des écoulements à petite viscosité. Cela est dû à l'approximation polynomiale dans l'espace des moments de la distribution d'équilibre, très différente d'une Maxwellienne pour les grandes vitesses.

Dans la deuxième partie nous avons développé un algorithme adjoint de Boltzmann sur réseau (ALBE) pour l'assimilation de paramètres relatifs à la méthode. Cet algorithme utilise la méthode du gradient qui découle des méthodes de contrôle optimal. Dans un premier temps nous avons validé notre méthode en la comparant à une approche aux différences finies. Ensuite nous avons testé l'algorithme ALBE pour l'identification de un et deux paramètres sur un écoulement de type linéaire Poiseuille, puis sur un écoulement nonlinéaire de type Navier-Stokes. Cela nous a donné des résultats encourageants qui devront être étendus à des paramètres en nombres plus importants. Dans le futur, la suite logique de ces travaux est de rendre le modèle plus physique avec des conditions aux limites qui modélisent l'entrée et la sortie du fluide et pour des bords de géométries quelconques. Nous suggérons aussi l'utilisation de l'algorithme ALBE pour l'identification des paramètres inconnus d'un écoulement au voisinage du bord ou pour l'identification de la viscosité locale pour un écoulement turbulent.

Dans la troisième partie nous avons construit le schéma de Boltzmann sur réseau pour une couche de Béranger (BRB avec un terme d'atténuation d'ordre zéro). Les tests numériques montrent l'existence d'une onde réfléchie dans le domaine. Cette réflexion qui est due à la viscosité importante et non isotrope de ce schéma nous a amené à analyser en détail l'interface entre deux milieux de Boltzmann. Nous avons ainsi développé une méthode d'analyse d'interface pour calculer les différents types d'ondes générées par un dioptré. Nous avons validé théoriquement cette méthode dans le cas du schéma monodimensionnel D1Q3 et

nous l'avons validé numériquement dans le cas D2Q9.

Nous avons aussi adapté la modélisation d'une absorption d'ordre zéro au cas du modèle D2Q9 usuel, ce qui fournit une façon simple de réaliser l'absorption à l'extérieur de la zone de calcul. En étudiant l'interface entre un milieu d'intérêt très peu visqueux où se trouve l'onde incidente et un milieu absorbant, nous avons trouvé que le modèle D2Q9 avec le terme d'atténuation σ d'ordre zéro est beaucoup plus intéressant que le BRB car il n'est pas affecté par une très forte viscosité. La méthode de l'élimination de l'onde réfléchie doit être encore étudiée et développée pour pouvoir l'utiliser entre milieux D2Q9 afin de faire sortir les ondes sans générer d'onde réfléchie dans le milieu d'intérêt. Enfin il est possible que les équations aux dérivées partielles de type Bérénger ne soient pas indispensable pour traiter des domaines non bornés avec les schémas de Boltzmann sur réseau ! Finalement, l'extension au cas de trois dimensions d'espace ne pose aucun problème de principe. L'extension du schéma BRB au modèle D3Q19 par exemple représente un travail raisonnable à envisager, l'adaptation de la condition de sortie par élimination de l'onde réfléchie reste d'approche monodimensionnelle et l'introduction d'un terme d'atténuation reste inchangée.

Bibliographie

- [AGH99] Abarbanel S., Gottlieb D., Hesthaven J.S., Well-posed perfectly matched layers for advective acoustics, *Journal of Computational Physics*, vol. 154, p. 266–283, (1999).
- [Al03] Alinhac S., Lois de conservations hyperboliques, cours de DEA, Université Paris XI Orsay, (2003).
- [AK00] Ansumali S., Karlin I. V., Stabilization of the Lattice Boltzmann Method by the H Theorem, *Physical Review E*, vol. 62, p. 7999–8003, (2000).
- [BT80] Bayliss A., Turkel E., Radiation boundary conditions for wave-like equations, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 33, p. 707–725, (1980).
- [BT82] Bayliss A., Turkel E., Far field boundary conditions for compressible flows, *Journal of Computational Physics*, vol. 48, p. 182–199, (1982).
- [BSV92] Benzi R., Succi s., Vergassola M., The lattice Boltzmann equation : theory and applications, *Physics Reports*, vol. 222, p. 145–197, (1992).
- [Be94] Bérénger J.-P., A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *Journal of Computational Physics*, vol. 114, n° 2, p. 185–200, (1994).
- [Be05] Berthon C., Inégalités d’entropie pour un schéma de relaxation, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences*, vol. 340, p. 63–68, (2005).
- [BGK54] Bhatnagar P.L., Gross E.P., Krook M., A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical Review*, vol. 94, p. 511–525, (1954).
- [Bi76] Bird G. A., *Molecular gas dynamics*, Clarendon Press, Oxford, (1976).
- [Bo87] Bony J.-M., Solutions globales bornées pour les modèles discrets de l’équation de Boltzmann, en dimension 1 d’espace, *Journées “Équations aux dérivées partielles” (Saint Jean de Monts, 1987)*, Exp. No. XVI, 10, École Polytech., Palaiseau, (1987).
- [Bo87] Bony J.-M., Problème de Cauchy et diffusion à données petites pour les modèles discrets de la cinétique des gaz, *Journées “Équations aux Dérivées Partielles” (Saint Jean de Monts, 1990)*, Exp. No. I, 12, École Polytech., Palaiseau, (1990).
- [BFL01] Bouzidi M., Firdaouss M., Lallemand P., Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries, *Physics of Fluids*, vol. 13, p. 3452–3459, (2001).

- [Br64] Broadwell J.E., Shock Structure in a Simple Discrete Velocity Gas, *Physics of Fluids* vol. 7, p. 1243–1247, (1964).
- [Ca77] Cabannes H., Solution globale d'un problème de Cauchy en théorie cinétique discrète. Modèle plan, *Comptes Rendus des Séances de l'Académie des Sciences. Série A-B.*, vol. 284, p. A269–A272, (1977).
- [Ca78] Cabannes H., Solution globale du problème de Cauchy en théorie cinétique discrète, *Journal de Mécanique Théorique et Appliquée. Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, vol. 17, p. 1–22, (1978).
- [Ca80] Cabannes H., Global solution of the discrete Boltzmann equation, *Mathematical problems in the kinetic theory of gases (Oberwolfach, 1979)*, vol. 19, p. 25–44, Frankfurt, (1980).
- [Ca91] Cabannes H., On the initial value problem in discrete kinetic theory, *European Journal of Mechanics. B Fluids*, vol. 10, p. 207–224, (1991).
- [CGL03] Cabannes H., Gatignol R., Luo L.-S., *The discrete Boltzmann equation (theory and applications)*, Henri Cabannes, Paris, (2003).
- [CT94] Cabannes H., Tiem D.H., Exact solutions for semi-continuous model of the Boltzmann equation, *Comptes Rendus des Séances de l'Académie des Sciences. Série II.*, vol. 318, p. 1583–1790, (1994).
- [CC70] Chapman S., Cowling T.G., *Mathematical theory of non uniform gases. Kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*, 3rd ed., Cambridge university press (Cambridge), (1970).
- [Ce88] Cercignani C., *The Boltzmann Equation and Its Applications*, Applied Mathematical Sciences, 67, Springer-Verlag, New York, (1988).
- [CCM92] Chen H., Chen S., Matthaeus W.H., Recovery of the Navier-Stokes equations using a lattice-gas Boltzmann method, *Physical Review*, vol. 45, p. 5339–5342, (1992).
- [CD98] Chen S., Doolen G.D., Lattice Boltzmann methods for fluid flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*, vol. 30, p. 3289–364, (1998).
- [Co95] Collino F., Boundary Conditions and Layer technique for the simulation of Electromagnetic Waves above a Lossy Medium, *INRIA Report*, n° 2698, (1995).
- [CP98] Coquel F., Perthame B., Relaxation of energy and approximate Riemann solvers for general pressure laws in fluid dynamics, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, vol. 35, p. 2223–2249, (1998).
- [CGP01] Coquel, F., Godlewski E., Perthame B., In A., Rascle P., Some new Godunov and relaxation methods for two-phase flow problems, *Godunov methods (Oxford, 1999)*, p. 179–188, Kluwer/Plenum, New York, (2001).
- [Co87] Cornille H., Exact solutions of the Broadwell model in 1 + 1 dimensions, *Journal of Physics. A. Mathematical and General*, vol. 20, p. 1973–1988, (1987).
- [CdHL91] Cornubert R., d'Humières D., and Levermore D., A Knudsen layer theory for lattice gases, *Physica D*, vol. 47, p. 241–259, (1991).

- [Cu94] Culioli J.L., *Introduction à l'Optimisation*. Ellipses, Paris, (1994).
- [Du07] Dubois F., Une introduction à l'équation de Boltzmann sur réseau, *ESAIM Proceeding*, vol. 28, p. 181–215, (2007).
- [Du08] Dubois F., Equivalent partial differential equations of a lattice Boltzmann scheme, *Computers and Mathematics with Applications*, à paraître (2008).
- [DDMT02] Dubois F., Duceau E., Maréchal F., Terrasse I., Lorentz Transform and Staggered Finite Differences for Advective Acoustics, *Rapport de recherche non publié*, (2002).
- [DL08] Dubois F., Lallemand P., On lattice Boltzmann scheme, finite volumes and boundary conditions, à paraître, (2008).
- [ELR90] Elton B. H., Levermore C. D., Rodrigue G. H., Lattice Boltzmann methods for some 2-D nonlinear diffusion equations : computational results, *Asymptotic analysis and the numerical solution of partial differential equations (Argonne, IL, 1990)*, Lecture Notes in Pure and Appl. Math., vol. 130, p. 197–214, Dekker, New York, (1991).
- [EM77] Engquist B., Majda A., Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves, *Mathematics of computation*, vol. 31, p. 629–651, (1977).
- [EM79] Engquist B., Majda A., Radiation boundary conditions for acoustic and elastic wave calculations, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 32, p. 314–358, (1979).
- [FHP86] Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y., Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, *Physical Review Letters*, vol. 56, p. 1505–1508, (1986).
- [FdH87] Frisch U., d'Humières D., Hasslacher B., Lallemand P., Pomeau Y., Rivet J.-P., Lattice gas hydrodynamics in two and three dimensions, *Complex Systems*, vol. 1, p. 649–707, (1987).
- [Ga75] Gatignol R., Théorie cinétique des gaz à répartition discrète de vitesses, *Lecture Notes in Phys.*, vol. 36, Springer-Verlag, New York, (1975).
- [GA94] Ginzburg I., Adler, P., Boundary flow condition analysis for the three-dimensional lattice Boltzmann model, *Journal of Physics II France*, vol. 4, p. 191–214, (1994).
- [GdH96] Ginzburg I., d'Humières D., Local second order boundary methods for lattice Boltzmann models, *Journal of Statistical Physics*, vol. 84, p. 927–971, (1996).
- [GdH03] Ginzburg I., d'Humières D., Multireflection boundary conditions for lattice Boltzmann models, *Physical Review E*, vol. 68, p. 6614–6644, (2003).
- [Gi90] Givoli D., Nonreflecting boundary conditions, *Journal of Computational Physics*, vol. 94, p. 1–29, (1991).
- [HT88] Halpern L., Trefethen L. N., Wide-angle one-way wave equations, *Acoustical Society of America. Journal*, vol. 84, p. 1397–1404, (1988).
- [HPP73] Hardy J., Pomeau Y., de Pazzis O., Time evolution of a two-dimensional model system. I. Invariant states and time correlation functions, *J. Mathematical Phys.*, vol. 14, p. 1746–1759, (1973).

- [HCZ99] He X., Chen S., Zhang R., A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability, *Journal of Computational Physics*, vol. 152, p. 642–663, (1999).
- [HL97] He X., Luo L.-S., A priori derivation of the lattice Boltzmann equation, *Physical Review E*, vol. 55, p. 6333–6336, (1997).
- [HJ89] Higuera F.J., Jiménez J., Boltzmann approach to lattice gas simulation, *Europhys. Lett.*, vol. 9, p. 663–668, (1989).
- [HSB89] Higuera F.J., Succi S., Benzi R., Lattice gas dynamics with enhanced collisions, *Europhys. Lett.*, vol. 9, p. 345–349, (1989).
- [HCB54] Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B., *Molecular Theory of Gases and Liquids*, Wiley, New York, (1945).
- [Hu96] Hu F.Q., On absorbing boundary conditions for linearized Euler equations by a perfectly matched layer, *Journal of Computational Physics*, vol. 129, p. 201–219, (1996).
- [dH92] d’Humières D., in *Rarefied Gas Dynamics : Theory and Simulations*, Prog. Astronaut. Vol. 159, edited by Shizgal B.D. and Weaver D.P. AIAA, Washington, D.C, (1992).
- [dHGM02] d’Humières D., Ginzburg I., Krafczyk M., Lallemand P., Luo L.-S., Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three-dimensions, *Philosophical Transactions of Royal Society of London A*, vol. 360, p. 437–451, (2002).
- [IO81] Israeli M., Orszag S.A., Approximation of radiation boundary conditions, *Journal of Computational Physics*, vol. 41, p. 115–135, (1981).
- [JN80] Johnson C., Nédélec J.-C., On the coupling of boundary integral and finite element methods, *Mathematics of Computation*, vol. 35, p. 1063–1079, (1980).
- [JM89] Joly P., Mercier B., Une nouvelle condition transparente d’ordre 2 pour les équations de Maxwell en dimension 3, *INRIA Report*, (1989).
- [Kr70] Kreiss H.-O., Initial boundary value problems for hyperbolic systems, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, vol. 23, p. 277–298, (1970).
- [LV01] Ladd, A. J. C., Verberg, R., Lattice-Boltzmann simulations of particle-fluid suspensions, *Journal of Statistical Physics*, vol. 104, p. 1191–1251, 2001.
- [LL00] Lallemand P., Luo L.-S., Theory of the lattice Boltzmann method : Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability, *Physical Review E*, vol. 61, p. 6546–6562, (2000).
- [LP74] Lerat A., Peyret R., Noncentered schemes and shock propagation problems, *Computers & Fluids. An International Journal*, vol. 2, p. 35–52, (1974).
- [Li68] Lions J.L., *Contrôle optimal de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles*. Dunod, Paris, (1968).

- [LLM02] Lockard D. P., Luo L.-S., Milder S. D., Singer B. A., Evaluation of PowerFLOW for aerodynamic applications, *Journal of Statistical Physics*, vol. 107, p. 423–478, (2002).
- [MZ88] McNamara G., Zanetti, Use of the Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata, *Physical Review Letters*, vol. 61, p. 2332–2335, (1988).
- [Na83] Nanbu K., Interrelations between various direct simulation methods for solving the Boltzmann equation, *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 52, p. 3382–3388, (1983).
- [Or76] Orlanski, I. A simple boundary condition for unbounded hyperbolic flows, *Journal of Computational Physics*, vol. 21, p. 251–269 (1976).
- [PLM06] Pan C., Luo L.-S., Miller C. T., An evaluation of lattice Boltzmann schemes for porous medium flow simulation, *Computers & Fluids. An International Journal*, vol 35, p. 898–909, (2006).
- [Pe94] Perthame B., Introduction to the theory of random particle Methods for Boltzmann Equation, Rapport de recherche N. 2218, INRIA, (1994).
- [Pi88] Pironneau, O., *Méthodes des éléments finis pour les fluides*, Masson, Paris, (1988).
- [QdHL92] Qian Y.H., d’Humières D. and Lallemand P., Lattice BGK models for Navier-Stokes equation, *Europhys. Lett.*, vol. 17, p. 479–484, (1992).
- [Ra99] Rahmouni A.N., Des modèles PML bien posés pour divers problèmes hyperboliques, *Université Paris Nord*, Paris, (1999).
- [Ra01] Rahmouni A.N., A well posed unsplit model for linearized Euler Equation, *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences*, (2001).
- [Ra91] Rauch J., *Partial Differential Equations*, Springer Verlag, (1991).
- [RM67] Richtmyer R. D., Morton K. W., *Difference methods for initial-value problems*, Interscience Publishers John Wiley & Sons, Inc., New York-London-Sydney, (1967).
- [So64] Sommerfeld A., *Lectures on Theoretical Physics*, Academic Press, New York, (1964).
- [St86] Strang G., *An introduction to applied mathematics*, Wellesley-Cambridge press, Wellesley, (1986).
- [Ta98] Tafløve A., *Advances in computational electrodynamics : The finite difference time-domain method*, Artech House, Boston, (1998).
- [Ta76] Tartar L., Existence globale pour un système hyperbolique semi linéaire de la théorie cinétique des gaz, Séminaire Goulaouic-Schwartz (1975/1976), *Equations aux dérivées partielles et analyse fonctionnelle*, Exp. No. 1, École Polytech., Palaiseau, (1987).
- [Ta80] Tartar L., Some existence theorems for semi-linear hyperbolic systems in one space variable. Report No. 2164, Mathematics Research Center, University of Wisconsin, Madison, (1980).
- [TH86] Trefethen L. N., Halpern L., Well-posedness of one-way wave equations and absorbing boundary conditions, *Mathematics of Computation*, vol. 47, p. 421–435, (1986).

- [WH74] Warming R. F., Hyett B. J., The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite-difference methods, *Journal of Computational Physics*, vol. 14, p. 159–179, (1974).
- [Wo86] Wolfram S., Cellular automaton fluids. I. Basic theory, *Journal of Statistical Physics*, vol. 45, p. 471–526, (1986).

Résumé

Cette thèse comporte trois parties : étude du schéma de Boltzmann sur réseau, schéma adjoint de Boltzmann sur réseau pour l'identification de paramètres et construction d'une couche parfaitement absorbante pour ce schéma. La première partie introduit et analyse la méthode. La deuxième partie décrit une approche variationnelle pour l'assimilation de paramètres relatifs à la méthode du gaz de Boltzmann sur réseau. Une méthode adjointe discrète en temps est développée. L'algorithme est d'abord testé sur un écoulement de type Poiseuille linéaire (problème de Stokes), puis il est appliqué à un problème non linéaire. Des résultats encourageants sont obtenus pour un et deux paramètres inconnus. Finalement la troisième partie décrit une adaptation des couches absorbantes de Bérenger. Il en résulte un modèle d'automate de Boltzmann à neuf vitesses discrètes. Une analyse des ondes réfléchies est ensuite réalisée entre deux milieux de Boltzmann à une dimension, ce qui permet d'obtenir un équivalent des formules de Fresnel pour les schémas de Boltzmann et de proposer des modifications du schéma à l'interface pour annuler les ondes réfléchies. En deux dimensions, la même analyse d'ondes réfléchies met en évidence l'apparition de modes de Knudsen et des ondes transverses qui rendent l'analyse complexe.

Abstract

This thesis is composed of three parts. Firstly a study of Lattice Boltzmann scheme (LBE) is performed. Then Adjoint Lattice Boltzmann scheme (ALBE) is introduced for parameters identification. Finally a new Lattice Boltzmann scheme (BRB) is proposed to modelise Bérenger's Perfectly Matched Layer (PML) method. The first part introduces and analyzes the LBE method. The second part describes a variational approach for parameters identification adapted to LBE. A time discrete adjoint method is developed. At first the ALBE method is applied to Stokes' problem and then to a nonlinear problem. Good results have been obtained in the cases of one or two unknown parameters. Finally the third part describes an adaptation of PML for LBE. The LB scheme is obtained with 9 discrete velocities. An analysis of reflected waves between two one dimensional LB media is performed. It provides us an equivalent for the Fresnel formula for LBE interface. That gives us same ideas to modify the LB scheme at the interface to vanish reflected waves. In the two dimensional case, the same analysis of reflected waves shows the existence of Knudsen modes and transverse waves, which make the analysis more difficult.