
Laboratoire de Mécanique des Structures
et des Systèmes Couplés
Conservatoire National des Arts et Métiers
Paris, 27 octobre 2006

Une introduction aux gaz de Boltzmann sur réseau

François Dubois

CNAM Paris et Université Paris Sud, Orsay

travail conjoint avec

Mahmed Bouzidi, Pierre Lallemand, Mahdi Tekitek

Plan de l'exposé

- 1) Introduction : automates cellulaires pour les gaz
- 2) Un modèle unidimensionnel
- 3) Développements de Taylor et de Chapman Enskog
pour une dynamique de Boltzmann discrète
- 4) Modèle bidimensionnel à neuf vitesses
- 5) Boltzmann sur réseau et volumes finis

Fin XIX^{ième} siècle : théorie cinétique des gaz de Maxwell et Boltzmann.

Au point x à dx près et pour une vitesse v à dv près,

la masse dm de gaz présente vaut $dm = f_0(v) dx dv$.

Loi de répartition des vitesses pour trois dimensions d'espace :

$$f_0(v) = \rho \left(\frac{\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{\beta}{2} |v - u|^2 \right), \quad \beta = \frac{\mu}{kT}$$

Alors (intégrales Gaussiennes)

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^3} f_0(v) dv \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}^3} v f_0(v) dv \quad \rho E = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 f_0(v) dv.$$

Evolution dynamique : équation de Boltzmann (1872) :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = Q(f), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0.$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \bullet \nabla_x f = Q(f), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0.$$

Terme de gauche $\partial_t + v \bullet \nabla$: transport libre à la vitesse v ,

Terme de droite $Q(f)$: collisions au sein du gaz.

Gaz dilué : collisions “à deux points” :

$Q(f)$ est une fonction quadratique de la distribution f .

Analyse des collisions moléculaires : conservation de la masse,
de l’impulsion et de l’énergie lors de chaque interaction.

Conséquence “macroscopique” :
$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f_0) \left(1, v, \frac{1}{2} |v|^2 \right)^t dv = 0.$$

On injecte cette hypothèse dans l’équation de Boltzmann :

les grandeur “conservées” $W = (W_0 \equiv \rho, q \equiv W_\alpha \equiv \rho u, W_5 \equiv \varepsilon \equiv \rho E)^t$
satisfont aux équations d’Euler de la dynamique des gaz.

Equations d'Euler :
$$\frac{\partial W}{\partial t} + \operatorname{div} F(W) = 0.$$

$$F_{0\alpha} = \int_{\mathbb{R}^3} v_\alpha f_0(v) dv, \quad F_{\alpha\beta} = \int_{\mathbb{R}^3} v_\alpha v_\beta f_0(v) dv, \quad F_{5\alpha} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 v_\alpha f_0(v) dv$$

L'équilibre thermodynamique parfait n'est qu'une première approximation
Libre parcours moyen entre deux collisions

“petit paramètre” ε :
$$\varepsilon = \frac{\text{libre parcours moyen}}{\text{dimension macroscopique typique}}$$

Développement asymptotique en ε :

$$f(v) = f_0(v) + \varepsilon f_1(v) + \varepsilon^2 f_2(v) + \dots \text{ où } f_0(\bullet) \text{ est la maxwellienne.}$$

Développement au second ordre, de Chapman-Enskog (1915) :

“démontre” les équations de Navier-Stokes.

Point dur de l'équation de Boltzmann :

relier la dynamique collisionnelle et l'obtention de l'équilibre f_0 .

BGK : Bhatnagar, Gross et Krook (1954)

(i) on injecte *a priori* une représentation de l'équilibre $f_0(v)$

(ii) l'opérateur de collision

$$Q_{\text{BGK}}(f) = S(f - f_0(v))$$

Interaction de f avec un champ moyen.

Noyau $Q_{\text{BGK}}(f)$ linéaire.

Simulateurs discrets faciles à programmer.

Espace, temps, vitesses discrètes

Nombre de molécules

présentes à un instant donné en un point donné sont discrets.

Première idée (Hardy, de Pazzis, Pomeau, 1976) :

réseau carré à deux dimensions d'espace (entiers de Gauss)

Pas d'espace unité et pas de temps égaux à 1

L'état du réseau : champ de variables binaires valant 0 ou 1.

La valeur 0 indique que le site (i, j) est libre

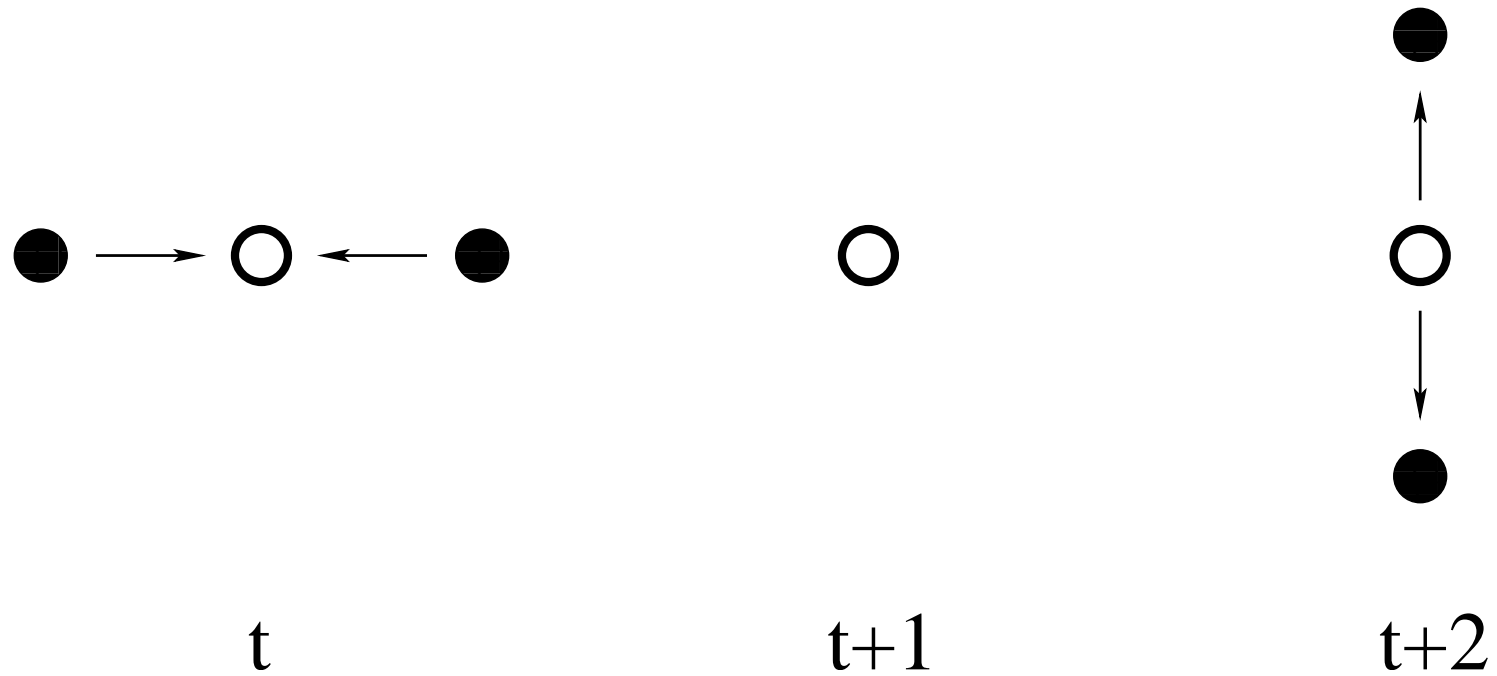
Evolution du réseau :

vitesses discrètes liant un sommet (i, j) à ses quatre voisins $(i \pm 1, j \pm 1)$.

Vitesses possibles à valeurs dans l'ensemble $(1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1)$.

Règles de collision

lorsqu'il y a conflit pour occuper un site à un instant ultérieur.



Dynamique d'une collision frontale

Passage “physique” à la limite : blocs de plus en plus grands

Densité macroscopique ρ :

rapport du nombre de sites occupés au nombre de sites de l'échantillon
impulsion macroscopique q .

Echelle de temps “grande” devant le pas de temps élémentaire (égal à 1 !)

Echelle spatiale “grande” devant le pas du réseau (toujours égal à 1 !).

Equations limites de la forme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} q = 0 \quad \frac{\partial q}{\partial t} + \operatorname{div} P(\rho, q) = 0 .$$

conservation de la masse et de l'impulsion.

Attention ! Le “tenseur des pressions” P n'est pas isotrope !!

Réseau hexagonal,

i.e. points de la forme $a + bj$, avec $a, b \in \mathbb{Z}$ et $1 + j + j^2 = 0$.

Dynamique des collisions plus complexe : un tirage au hasard est nécessaire

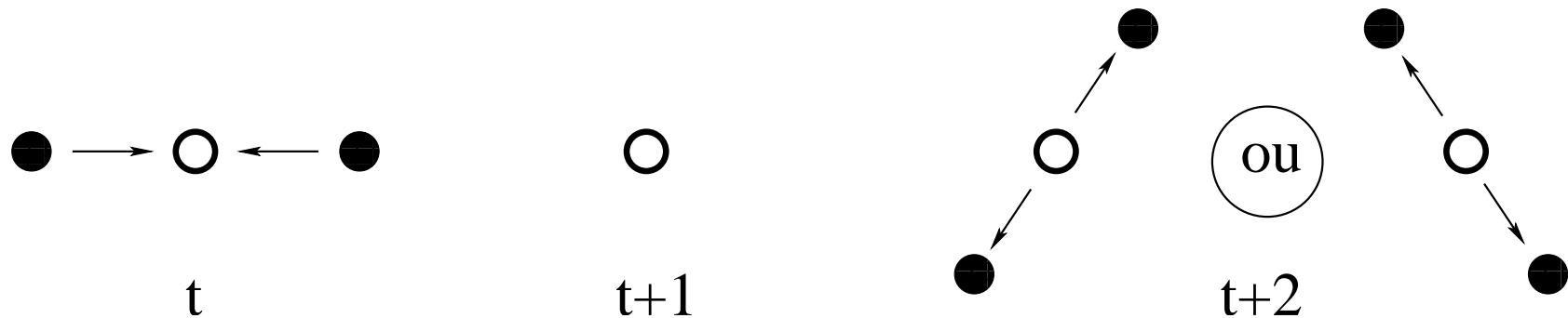


Figure 2. Collision frontale dans le modèle FHP (1986)

Limite hydrodynamique isotrope, *i.e.* recevable physiquement.

Extension à trois dimensions d'espace : réseau cubique à faces centrées
d'Humières, Lallemand et Frisch (1986).

Défauts des automates cellulaires : bruit intrinsèque,
valeur imposée des coefficients de transport,
non respect de l'invariance de Galilée.

Idée nouvelle (Mac Namara, Zanetti, 1988) :

réseau discret, vitesses discrètes imposées par la géométrie,

chercher une variable **continue** f

qui décrit la population moyenne sur un site donné du réseau,

Forme discrète de l'équation de Boltzmann

via un opérateur de collision discret.

Higuera, Succi, Benzi (1989) : distribution d'équilibre $f_j^{\text{eq}}(x, t)$

Opérateur de collision $Q_i(f)$ paramétré par une matrice de collision S_{ij}

$$Q_i(f) = \sum_{j=0}^b S_{ij} (f_j - f_j^{\text{eq}}).$$

Evolution discrète entre les instants t et $t + 1$:

$$f_i(x + v_i, t + 1) = f_i(x, t) + Q_i(f)(x, t)$$

où x désigne un site du réseau.

Difficultés :

détermination de la distribution d'équilibre f_j^{eq} ($0 \leq j \leq b$)

détermination de la matrice de collision S_{ij} ($0 \leq i, j \leq b$).

invariance de Galilée encore en défaut ;

la loi de pression $p(\rho)$ prend la forme typique

$$p(\rho) = \xi^2 \rho \left(1 - g(\rho) \frac{|u|^2}{\xi^2} + \dots \right)$$

$g(\rho)$ est un facteur correctif du modèle, dit “de Galilée”.

Qian, d’Humières, Lallemand (1992) :

distribution polynomiale en vitesse pour la distribution d'équilibre f^{eq}

opérateur de relaxation S_{ij} diagonal.

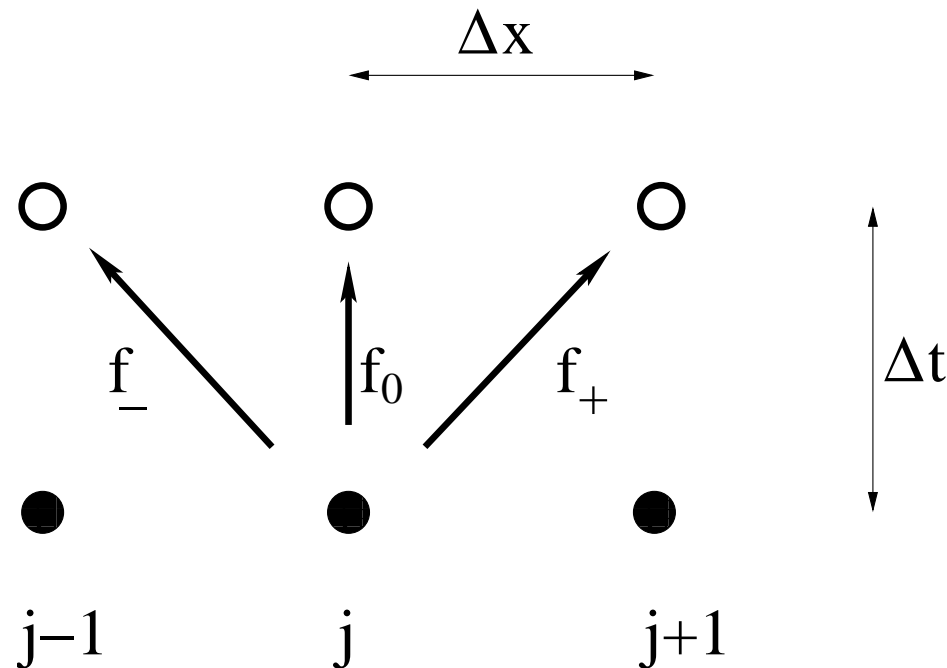
D’Humières (1992)

opérateur de relaxation diagonal dans des variables (“moments”)

transformées linéairement à partir des f

Grille de pas d'espace Δx , pas de temps Δt , $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ fixé.

En $x_j = j \Delta x$ et $t^n = n \Delta t$ ($n \in \mathbb{N}$), on cherche $(f_0)_j^n$, $(f_+)_j^n$ et $(f_-)_j^n$.



Transport libre pour le modèle à trois vitesses.

Deux phases : transport libre et collision.

Transport libre, on résout l'équation d'advection $\frac{\partial f}{\partial t} + a \frac{\partial f}{\partial x} = 0$

pour les trois vitesses $a \in \{-\lambda, 0, \lambda\}$ et les champs inconnus $f \in \{f_-, f_0, f_+\}$

La méthode des caractéristiques est **exacte**.

Après la phase de propagation,

$$(\widetilde{f}_-)_j = (f_-)_j^n, \quad (\widetilde{f}_0)_j = (f_0)_j^n, \quad (\widetilde{f}_0)_{j+1} = (f_+)_j^n.$$

La phase de collision est **locale** en espace.

Variables conservées $W = (\rho, q)$ de densité ρ et d'impulsion q :

$$\rho = \widetilde{f}_- + \widetilde{f}_0 + \widetilde{f}_+ \quad q = -\lambda \widetilde{f}_- + \lambda \widetilde{f}_+$$

Etat d'équilibre $f^{\text{eq}} \equiv \phi = \Phi(W)$ fonction des variables conservées

L'état final f^* est une combinaison de \widetilde{f} et de l'état d'équilibre $\Phi(W)$

$$f^* = \widetilde{f} - S(\widetilde{f} - \Phi(W))$$

S : opérateur de collision

tel que les nouvelles variables conservées

$$\rho^* = f_-^* + f_0^* + f_+^* \quad q^* = -\lambda f_-^* + \lambda f_+^*$$

sont **invariantes** dans la phase de collision : $W^* = W$.

Schéma $\{f^n\} \rightarrow \{f^{n+1}\}$:

première étape d'advection A , seconde étape de collision C .

$$\tilde{f} = A \bullet f^n \quad f^{n+1} = f^* \equiv C(\tilde{f}).$$

Passage du temps discret : $f^{n+1} = C(A \bullet f^n)$.

Autre point de vue : un pas de temps se compose

d'une phase de collision, suivie d'une phase d'advection.

La collision $f \mapsto f^* = C(f)$ est non linéaire, locale en espace

L'advection $f \mapsto A \bullet f$ est linéaire, couple les points voisins.

Le schéma s'écrit alors

$$f^{n+1} = A \bullet C(f)$$

$$(f_-)_j^{n+1} = (f_-)_{j+1}^n, \quad (f_0)_j^{n+1} = (f_0)_j^n, \quad (f_+)_j^{n+1} = (f_+)_{j-1}^n.$$

Energie (cinétique) : $\varepsilon = \frac{\lambda^2}{2} f_- + \frac{\lambda^2}{2} f_+ .$

Au cours de l'étape de collision, l'énergie relaxe vers une valeur d'équilibre ε^{eq} qui n'est fonction **que** des variables conservées W :

$$\varepsilon^{\text{eq}} \equiv \psi(W) .$$

Un pas de temps d'un schéma d'Euler explicite pour intégrer l'équation de relaxation de l'écart à l'équilibre :

$$\frac{d}{dt}(\varepsilon - \psi(W)) + \frac{1}{\tau}(\varepsilon - \psi(W)) = 0 .$$

id est
$$\frac{\varepsilon(\Delta t) - \varepsilon(0)}{\Delta t} + \frac{1}{\tau}(\varepsilon(0) - \psi(W)) = 0$$

Le schéma de Boltzmann écrit cette relaxation $\varepsilon \mapsto \varepsilon^*$ sous la forme

$$\varepsilon^* = \varepsilon - s(\varepsilon - \psi(W))$$

où $s = \frac{\Delta t}{\tau}$ est le paramètre de relaxation.

Stabilité : $0 \leq s \leq 2.$

D'Humières (1992) :

On regroupe (ρ, q, ε) en un vecteur de “moments” $m \equiv (\rho, q, \varepsilon)^t$.

Avec $f \equiv (f_-, f_0, f_+)^t$, on a $m = M f$.

On a facilement $M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\lambda & 0 & \lambda \\ \frac{\lambda^2}{2} & 0 & \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix} \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{\lambda^2} \\ 1 & 0 & -2\lambda^2 \\ 0 & \frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{\lambda^2} \end{pmatrix}$.

Collision : les variables conservées ρ et q sont inchangées :

$$\rho^* = \rho, \quad q^* = q$$

L'énergie relaxe vers l'équilibre $\varepsilon^{\text{eq}} = \psi(W)$ $\varepsilon^* = (1 - s)\varepsilon + s\psi(W)$,

Vecteur m^* des moments **après** la collision : $m^* \equiv (\rho^*, q^*, \varepsilon^*)^t$.

Etat f^* post-collision : $f^* = M^{-1} m^*$.

(i)

Variables conservées W , ou “moments à l'équilibre” de la distribution f ,

(ii)

Matrice M de passage entre la distribution f et les moments m ,

(iii)

Valeurs d'équilibre $\psi_k(W)$ des moments qui ne sont pas à l'équilibre,

(iv)

Rapport s_k entre

le pas de temps d'évolution physique Δt

la constante de temps τ_k caractéristique du retour à l'équilibre.

Modèle à trois vitesses :

l'énergie ε relaxe vers une énergie d'équilibre $\psi(\rho, q)$: $\psi(\rho, q) = \alpha \lambda^2 2 \rho$

où $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ est la vitesse numérique de référence (fixée) et $\alpha > 0$.

Champ $f = (f_-, f_0, f_+)$ au temps discret t^n et à la position x_j

Dans l'espace des moments :

$$\rho_j^n = (f_- + f_0 + f_+)_j^n, q_j^n = -\lambda(f_-)_j^n + \lambda(f_+)_j^n, \varepsilon_j^n = \frac{\lambda^2}{2} (f_-)_j^n + \frac{\lambda^2}{2} (f_+)_j^n$$

Phase de collision simple à exprimer dans l'espace des moments :

$$(\rho^*)_j^n = \rho_j^n, \quad (q^*)_j^n = q_j^n, \quad (\varepsilon^*)_j^n = (1 - s) \varepsilon_j^n + s(\psi(W))_j^n$$

Etat f^* à l'instant t^n et à la position x_j :

$$(f_-^*)_j^n = \left(-\frac{1}{2\lambda} q^* + \frac{1}{\lambda^2} \varepsilon^* \right)_j^n,$$

$$(f_0^*)_j^n = \left(\rho^* - \frac{2}{\lambda^2} \varepsilon^* \right)_j^n,$$

$$(f_+^*)_j^n = \left(\frac{1}{2\lambda} q^* + \frac{1}{\lambda^2} \varepsilon^* \right)_j^n.$$

Itération du schéma numérique :

$$(f_-)_j^{n+1} = \left(-\frac{1}{2\lambda} q + \frac{1}{\lambda^2} \varepsilon^* \right)_{j+1}^n$$

$$(f_0)_j^{n+1} = \left(\rho - \frac{2}{\lambda^2} \varepsilon^* \right)_j^n$$

$$(f_+)_j^{n+1} = \left(\frac{1}{2\lambda} q + \frac{1}{\lambda^2} \varepsilon^* \right)_{j-1}^n.$$

Itération dans l'espace des moments :

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{1}{2\lambda} (q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) + \frac{1}{\lambda^2} (\varepsilon_{j+1}^* - 2\varepsilon_j^* + \varepsilon_{j-1}^*)^n$$

$$q_j^{n+1} = \frac{1}{2} (q_{j+1}^n + q_{j-1}^n) - \frac{1}{\lambda} (\varepsilon_{j+1}^* - \varepsilon_{j-1}^*)^n$$

$$\varepsilon_j^{n+1} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{j+1}^* + \varepsilon_{j-1}^*)^n - \frac{\lambda}{4} (q_{j+1}^n - q_{j-1}^n).$$

Méthode de l'équation équivalente (voir par exemple A. Lerat, 1981)
 Equation aux dérivées partielles “la mieux simulée par le schéma”
 à un ordre d'approximation donné.

Proposition. Equilibre.

L'énergie est à l'équilibre, au premier ordre près : $\varepsilon_j^n = \psi(\rho_j^n) + O(\Delta x)$.

Preuve

Nous tirons de $\varepsilon^* = \varepsilon - s(\varepsilon - \psi(W))$ et $s \neq 0$:

$$\varepsilon_j^{n+1} = \varepsilon_j^* + O(\Delta x),$$

et compte tenu de la formule de Taylor en temps :

$$\varepsilon_j^n + O(\Delta t) = (1 - s) \varepsilon_j^n + s \psi(\rho_j^n) + O(\Delta x).$$

Proposition. Modèle fluide Eulérien

Au premier ordre près, la densité et l'impulsion sont solutions
du système de l'acoustique relativement à la loi de pression $p(\rho)$:

$$p(\rho) = c_0^2 \rho, \quad c_0 = \lambda \sqrt{\alpha},$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta x),$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = O(\Delta x).$$

Preuve.

On utilise sans vergogne la dérivation des développements limités (!)

Calcul formel qui suppose *a priori* des approximations
dans des espaces fonctionnels “très réguliers”.

On a $(\varepsilon^*)^n_j = \psi(\rho_j^n) + O(\Delta x)$,

On dérive cette deux fois par rapport à l'espace (!) :

$$\left(\frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2}\right)_j^n = \alpha \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\right)_j^n + O(\Delta x).$$

Nous avons par ailleurs :

$$\frac{1}{2} (q_{j+1} - q_{j-1})^n = \left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)_j^n \Delta x + O(\Delta x^3)$$

$$(\varepsilon^*_{j+1} - 2\varepsilon^*_j + \varepsilon^*_{j-1})^n = \Delta x^2 \left(\frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2}\right)_j^n + O(\Delta x^4).$$

Nous déduisons de $\rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{1}{2\lambda} (q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) + \frac{1}{\lambda^2} (\varepsilon^*_{j+1} - 2\varepsilon^*_j + \varepsilon^*_{j+1})^n$

et des développements précédents :

$$\rho_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_j^n + O(\Delta t^2) = \rho_j^n - \Delta t \left(\frac{\partial q}{\partial x}\right)_j^n + O(\Delta x^2)$$

ce qui prouve la relation $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta x)$.

Nous procédons de même pour l'équation de l'impulsion :

$$\begin{aligned} q_j^n + \Delta t \left(\frac{\partial q}{\partial t} \right)_j^n + O(\Delta t^2) &= q_j^n + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \right)_j^n \Delta x^2 - \frac{2}{\Delta x} \lambda \left(\frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x} \right)_j^n + O(\Delta x^3) \\ &= q_j^n - 2\Delta t \alpha \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right)_j^n + O(\Delta x^2) \end{aligned}$$

ce qui établit $\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = O(\Delta x)$. et la loi de pression $p = \alpha \lambda^2 \rho$.

Proposition. Fluide visqueux.

Au second ordre près, la densité et l'impulsion sont solutions
d'un système de l'acoustique diffusive

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta x^2), \quad \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} - \lambda \Delta x (1 - \alpha) \left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = O(\Delta x^2)$$

avec une loi de pression donnée par $p = \alpha \lambda^2 \rho$.

Notons que la condition $0 < s < 2$ garantit que : $\frac{1}{s} - \frac{1}{2} > 0$.

x : a node of the lattice

Δt : the (small) time step

v_j : discrete celerity in the lattice, components v_j^α , $\alpha = 1, 2$

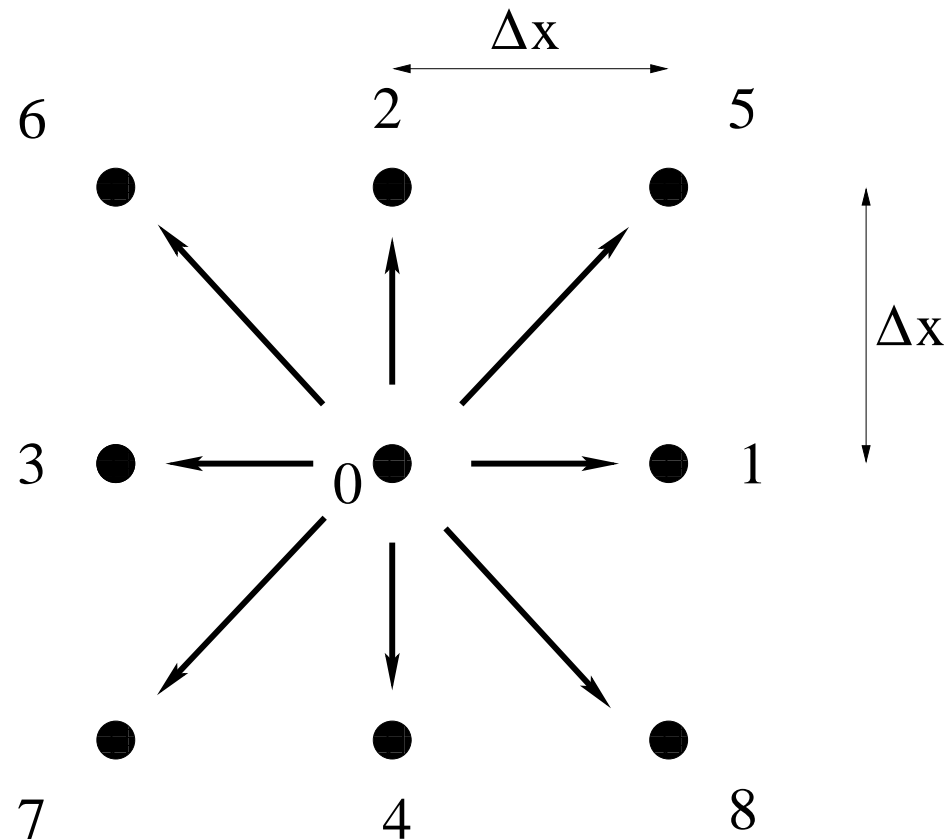
then $x + v_j \Delta t$ is an other node of the lattice

$f^j(x, t)$: density of particles having the velocity v_j
at node x and at discrete time t .

$m^0 = \rho \equiv \sum_j f^j$: density of matter

$m^\alpha = q^\alpha \equiv \sum_j v_j^\alpha f^j$: component number α of the momentum

$W \equiv (\rho, q^1, q^2)$: conserved variables



Neighbourhood of a vertex x for the D2Q9 LBE model

$$m^k \equiv \sum_j M_j^k f^j \quad (k \geq 3) : \text{other components of the momentum}$$

remark that we have $M_j^0 = 1$ and $M_j^\alpha = v_j^\alpha$

m_{eq}^k and f_{eq}^j : equilibrium momenta and velocity distribution

- **collision step**

$m_*^i \equiv m^i \equiv m_{\text{eq}}^i$: conserved momenta ($i = 0, 1, 2$) during the collision

$m_*^k = (1 - s_k) m^k + s_k m_{\text{eq}}^k$, $k \geq 3$: nonconserved momenta

Classical stability condition for the explicit Euler scheme : $0 < s_k < 2$

$f_*^j \equiv \sum_k (M^{-1})_k^j m_*^k$: particle distribution after the collision

- **advection step**

$$f^j(x, t + \Delta t) = f_*^j(x - v_j \Delta t, t)$$

$$f^j(x, t + \Delta t) \equiv f_*^j(x - v_j \Delta t, t)$$

$$f^j(x, t + \Delta t) = f^j(x, t) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$f_*^j(x - v_j \Delta t, t) = f_*^j(x, t) + \mathcal{O}(\Delta t)$$

then
$$m_*^k = \sum_j M_j^k f_*^j = m^k + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$m_*^k - m^k = \mathcal{O}(\Delta t)$$

but
$$m_*^k - m^k \equiv -s_k (m^k - m_{\text{eq}}^k) \quad \text{and } s_k > 0 \text{ if } k \geq 3$$

thus
$$m^k = m_{\text{eq}}^k + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$m_*^k = m_{\text{eq}}^k + \mathcal{O}(\Delta t)$$

coming back in the space of velocity distribution :

$$f^j = f_{\text{eq}}^j + \mathcal{O}(\Delta t)$$

$$f_*^j = f_{\text{eq}}^j + \mathcal{O}(\Delta t).$$

$$f^j(x, t + \Delta t) \equiv f_*^j(x - v_j \Delta t, t)$$

$$f^j(x, t + \Delta t) = f^j(x, t) + \Delta t \partial_t f^j + O(\Delta t^2)$$

$$f_*^j(x - v_j \Delta t, t) = f_*^j(x, t) - \Delta t v_j^\beta \partial_\beta f_*^j + O(\Delta t^2)$$

we take the moment of order k of this identity

$$m^k + \Delta t \partial_t m^k + O(\Delta t^2) = m_*^k - \Delta t \sum_j M_j^k v_j^\beta \partial_\beta f_*^j + O(\Delta t^2)$$

we use the previous Taylor expansion at the order zero

$$m^k + \Delta t \partial_t m_{\text{eq}}^k + O(\Delta t^2) = m_*^k - \Delta t \sum_j M_j^k v_j^\beta \partial_\beta f_{\text{eq}}^j + O(\Delta t^2)$$

- $k = 0$: $\partial_t \rho + \partial_\beta q^\beta = O(\Delta t)$ conservation of mass

introduce the tensor
$$F^{\alpha\beta} \equiv \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta f_{\text{eq}}^j$$

- $k = \alpha$: $\partial_t q^\alpha + \partial_\beta F^{\alpha\beta} = O(\Delta t)$ conservation of impulsion

$$m^k + \Delta t \partial_t m_{\text{eq}}^k + O(\Delta t^2) = m_*^k - \Delta t \sum_j M_j^k v_j^\beta \partial_\beta f_{\text{eq}}^j + O(\Delta t^2)$$

but $m^k - m_*^k \equiv s_k (m^k - m_{\text{eq}}^k)$ if $k \geq 3$

introduce $\theta^k = \partial_t m_{\text{eq}}^k + \sum_j M_j^k v_j^\beta \partial_\beta f_{\text{eq}}^j \equiv \sum_j M_j^k (\partial_t f_{\text{eq}}^j + v_j^\beta \partial_\beta f_{\text{eq}}^j)$

for $i = 0, 1, 2$, $\theta^i = O(\Delta t)$: Euler equations of gas dynamics

then for $k \geq 3$: $m^k = m_{\text{eq}}^k - \frac{\Delta t}{s_k} \theta^k + O(\Delta t^2)$

$$m_*^k = m_{\text{eq}}^k - \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \Delta t \theta^k + O(\Delta t^2)$$

$$\partial_\beta f_*^j = \partial_\beta f_{\text{eq}}^j - \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) (M^{-1})_k^j \partial_\beta \theta^k + O(\Delta t^2)$$

$$\begin{aligned}
 f^j(x, t + \Delta t) &\equiv f_*^j(x - v_j \Delta t, t) \\
 f^j(x, t + \Delta t) &= f^j(x, t) + \Delta t \partial_t f^j + \frac{1}{2} \Delta t^2 \partial_{tt}^2 f^j + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\
 f_*^j(x - v_j \Delta t, t) &= f_*^j(x, t) - \Delta t v_j^\beta \partial_\beta f_*^j + \frac{1}{2} \Delta t^2 v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_*^j + \mathcal{O}(\Delta t^3)
 \end{aligned}$$

we take the moment of order i ($0 \leq i \leq 2$) of this identity

$$\begin{aligned}
 m^i + \Delta t \partial_t m^i + \frac{1}{2} \Delta t^2 \partial_{tt}^2 m^i + \mathcal{O}(\Delta t^3) &= \\
 = m_*^i - \Delta t \sum_j M_j^i v_j^\beta \partial_\beta f_*^j + \frac{1}{2} \Delta t^2 \sum_j M_j^i v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_*^j + \mathcal{O}(\Delta t^3)
 \end{aligned}$$

we use the microscopic conservation $m_*^i = m^i$

and the previous Taylor expansion at the order one :

$$\begin{aligned}
 \partial_t m^i + \frac{1}{2} \Delta t \partial_{tt}^2 m^i + \mathcal{O}(\Delta t^2) &= - \sum_j M_j^i v_j^\beta \partial_\beta f_{\text{eq}}^j + \\
 + \Delta t \sum_{j, k \geq 3} M_j^i v_j^\beta \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) (M^{-1})_k^j \partial_\beta \theta^k &+ \frac{1}{2} \Delta t \sum_j M_j^i v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_{\text{eq}}^j + \mathcal{O}(\Delta t^2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_t m^i + \sum_j M_j^i v_j^\beta \partial_\beta f_{\text{eq}}^j &= \Delta t \sum_{j, k \geq 3} M_j^i v_j^\beta \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) (M^{-1})_k^j \partial_\beta \theta^k + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \left(-\partial_{tt}^2 m^i + \sum_j M_j^i v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_{\text{eq}}^j \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

- $i = 0$: conservation of mass

$M_j^0 \equiv 1$ and the first sum is null

$$\partial_{tt}^2 \rho = -\partial_{t\beta}^2 q^\beta = -\partial_\beta \partial_t q^\beta = \partial_{\beta\gamma}^2 F^{\beta\gamma} = \sum_j v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_{\text{eq}}^j$$

and the second sum is null. Then $\partial_t \rho + \partial_\beta q^\beta = \mathcal{O}(\Delta t^2)$

- $i = \alpha$: conservation of impulsions

$$\begin{aligned} \partial_t q^\alpha + \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta \partial_\beta f_{\text{eq}}^j &= \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \left[\sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (M^{-1})_k^j \right] \partial_\beta \theta^k + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \left(-\partial_{tt}^2 q^\alpha + \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_{\text{eq}}^j \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\partial_{tt}^2 q^\alpha + \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_{\text{eq}}^j &= \partial_t \partial_\beta F^{\alpha\beta} + \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta v_j^\gamma \partial_{\beta\gamma}^2 f_{\text{eq}}^j \\
&= \partial_\beta \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta \left(\partial_t f_{\text{eq}}^j + v_j^\gamma \partial_\gamma f_{\text{eq}}^j \right) \\
&= \partial_\beta \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta \sum_k (M^{-1})_k^j \theta^k \\
&= \partial_\beta \sum_{k \geq 3} \left[\sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (M^{-1})_k^j \right] \theta^k + \text{O}(\Delta t)
\end{aligned}$$

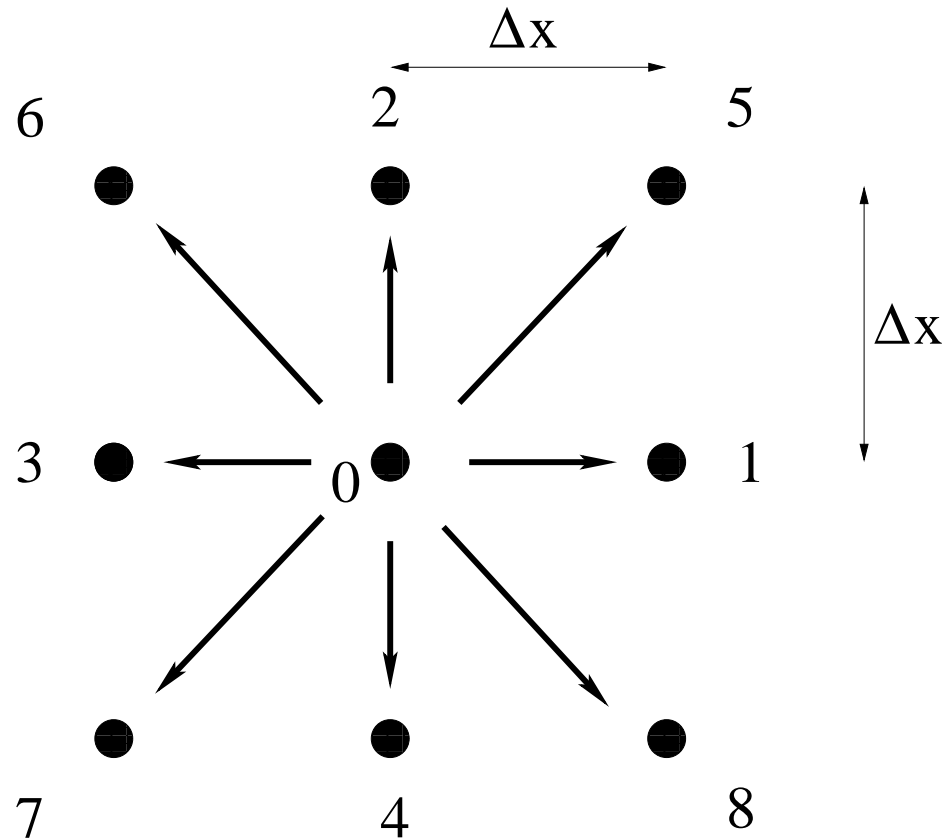
introduce the tensor $\Lambda_k^{\alpha\beta} \equiv \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (M^{-1})_k^j$

$$\partial_t q^\alpha + \partial_\beta F^{\alpha\beta} = \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - 1 \right) \Lambda_k^{\alpha\beta} \partial_\beta \theta^k + \frac{\Delta t}{2} \sum_{k \geq 3} \Lambda_k^{\alpha\beta} \partial_\beta \theta^k$$

$$\partial_t q^\alpha + \partial_\beta F^{\alpha\beta} - \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{\alpha\beta} \partial_\beta \theta^k = \text{O}(\Delta t^2) : \text{Chapman-Enskog !}$$

Réseau D_2Q_9 :

Sites voisins d'un vertex x donné : $y_j(x) = x + \Delta x e_j$, $0 \leq j \leq J \equiv 8$



Voisinage d'un vertex x avec le modèle D2Q9

Echelle de vitesse $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ associée à un pas de temps Δt

Moments à l'équilibre $W = (\rho, q^1, q^2) \equiv (m_0, m_1, m_2)$

$$m_0 = \sum_{j=0}^8 f_j, \quad m_\alpha = \sum_{j=0}^8 e_j^\alpha \frac{\Delta x}{\Delta t} f_j, \quad 1 \leq \alpha \leq 2$$

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

$$m_1 = \lambda(f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8), \quad m_2 = \lambda(f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8).$$

Moments hors équilibre

Moment m_3 est lié à l'énergie cinétique $\varepsilon = \frac{1}{2} \sum_j |v_j|^2 f_j$

qui relaxe avec une constante de temps $\frac{\Delta t}{s_3}$:

$$\varepsilon^* = (1 - s_3) \varepsilon + s_3 \varepsilon^{\text{eq}}.$$

Choix du moment m_3 ?

L'énergie cinétique ε est une forme linéaire par rapport au vecteur f ,

Idem pour la densité et les deux composantes de l'impulsion.

Toute combinaison linéaire m_3 de la forme $\varepsilon - \alpha\rho$ relaxe selon la relation

$$m_3^* = (1 - s_3) m_3 + s_3 m_3^{\text{eq}}$$

puisque ρ est un moment conservé : $\rho^* = \rho = \rho^{\text{eq}}$.

Proposition. Moment associé à l'énergie cinétique.

Si on pose

$$m_3 = \frac{6}{\lambda^2} \varepsilon - 4\rho = -4 f_0 - \sum_{j=1}^4 f_j + 2 \sum_{j=5}^9 f_j ,$$

alors les vecteurs lignes correspondants M_{3j} et M_{0j} de la matrice M

sont orthogonaux : $\sum_j M_{3j} M_{0j} = 0$.

Matrice M construite **orthogonale**

Carré de l'énergie cinétique $\chi = \sum_j \left(\frac{1}{2} |v_j|^2 \right)^2 f_j = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 f_j + \sum_{j=5}^8 f_j$

m_4 : un scalaire formé à partir de χ et des deux autres scalaires ρ et m_3

m_4 proportionnel à $\frac{4}{\lambda^2} \chi - \alpha \rho - \beta m_3$

de façon que m_4 soit orthogonal à ρ et à m_3 .

Proposition. **Moment associé au carré de l'énergie cinétique.**

Si on pose $m_4 = 4 f_0 - 2 \sum_{j=1}^4 f_j + \sum_{j=5}^8 f_j = \frac{18}{\lambda^4} \chi - 10 \rho - \frac{7}{2} m_3$,

la ligne m_4 des $(M_{4j})_{0 \leq j \leq 8}$ est orthogonale aux lignes numéros 0 et 3.

Moments d'ordre trois associés au **flux de chaleur** : $\varphi = \sum_j \frac{1}{2} |v_j|^2 v_j \bullet f_j$

soit
$$\varphi^1 = \frac{\lambda}{2} (f_1 - f_3 + 2(f_5 - f_6 - f_7 + f_8))$$

$$\varphi^2 = \frac{\lambda}{2} (f_2 - f_4 + 2(f_5 + f_6 - f_7 - f_8))$$

on retranche à φ^1 la bonne combinaison de q^1

pour avoir un vecteur orthogonal à q^1 et à q^2

m_5 proportionnel à $\frac{2}{\lambda^3} \varphi^1 - \frac{5}{3} \frac{q^1}{\lambda} = -\frac{2}{3} (f_1 - f_3) + \frac{1}{3} (f_5 - f_6 - f_7 + f_8),$

De même,

m_6 proportionnel à $\frac{2}{\lambda^3} \varphi^2 - \frac{5}{3} \frac{q^2}{\lambda} = -\frac{2}{3} (f_2 - f_4) + \frac{1}{3} (f_5 + f_6 - f_7 - f_8)$

soit
$$m_5 = \frac{6}{\lambda^3} \varphi^1 - 5 \frac{q^1}{\lambda}, \quad m_6 = \frac{6}{\lambda^3} \varphi^2 - 5 \frac{q^2}{\lambda}.$$

Proposition. Moments associés au flux de la chaleur.

Les moments m_5 et m_6 définis plus haut vérifient

$$m_5 = -2f_1 + 2f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8$$

$$m_6 = -2f_2 + 2f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8.$$

Ils sont orthogonaux à m_1 et m_2 respectivement.

Moments d'ordre deux $F_{\alpha\beta} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta f_j$, $1 \leq \alpha \leq \beta \leq 2$
nécessaires pour "fermer" les équations du fluide parfait :

$$F_{11} = \lambda^2(f_1 + f_3 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8), \quad F_{22} = \lambda^2(f_2 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8)$$

$$F_{12} = \lambda^2(f_5 - f_6 + f_7 - f_8). \quad \text{Energie cinétique } \varepsilon = \frac{1}{2} (F_{11} + F_{22}).$$

Proposition. Deux moments tensoriels d'ordre deux.

On pose
$$m_7 = \frac{1}{\lambda^2} (F_{11} - F_{22}), \quad m_8 = \frac{1}{\lambda^2} F_{12}$$

Alors les deux lignes numéros 7 et 8 de la matrice M sont données par

$$m_7 = f_1 - f_2 + f_3 - f_4, \quad m_8 = f_5 - f_6 + f_7 - f_8.$$

sont orthogonales entre elles ainsi qu'à toutes les autres lignes.

Proposition. Matrice du modèle bidimensionnel

La matrice M est donnée par

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

Ses lignes sont orthogonales.

On vérifie simplement que

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

Distribution d'équilibre $f_j^{\text{eq}} = G_j(W)$, $0 \leq j \leq 8$

Trois premiers moments m_k^{eq} ($0 \leq k \leq 3$) sont à l'équilibre thermique :

$$m_k^{\text{eq}} = \sum_{j=0}^8 M_{kj} G_j(W) = m_k^{\text{eq}}(W), \quad 0 \leq k \leq 3.$$

Choix des m_k^{eq} pour $k \geq 3$? Distribution $G_j(\bullet)$ à l'équilibre ?

Idée : partir de la répartition proposée par la Maxwellienne

Approcher les moments exacts par des polynomes de bas degré.

m_3 : distribution d'équilibre de l'énergie cinétique $\varepsilon^{\text{eq}} = \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \xi \rho$

Distribution d'équilibre du tenseur d'ordre deux $F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} \equiv \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta f_j^{\text{eq}}$:

$$F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \rho u^\alpha u^\beta + \xi \rho \delta_{\alpha\beta} .$$

Flux d'impulsion des équations d'Euler de la dynamique des gaz,
loi de pression linéaire en ρ ,

Pression linéarisée de type acoustique

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

Donc $\xi = c_0^2$.

Choix de Lallemand-Luo (2000) : $c_0 = \frac{\lambda}{\sqrt{3}}$, $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$.

Energie cinétique en fonction des variables conservées, c'est-à-dire ρ et q .

On a la relation classique $u = \frac{q}{\rho}$ qui conduit à $\varepsilon^{\text{eq}} = \frac{1}{2} \frac{|q|^2}{\rho} + c_0^2 \rho$.

Donc $m_3^{\text{eq}} = -2\rho + \frac{3}{\lambda^2 \rho_0} |q|^2$.

Carré de l'énergie cinétique χ . Relation (très) approchée

à partir de la Maxwellienne : $\chi^{\text{eq}} = 2c_0^4 \rho + \frac{5}{4} c_0^2 \rho |u|^2$

Donc $\chi^{\text{eq}} = \frac{2}{9} \lambda^4 \rho + \frac{5}{12} \frac{\lambda^2}{\rho_0} |q|^2$,

$$m_4^{\text{eq}} = \frac{1}{9} \lambda^4 \left(\frac{2}{9} \lambda^4 \rho + \frac{5}{12} \frac{\lambda^2}{\rho_0} |q|^2 \right) - 10\rho - \frac{7}{2} \left(-2\rho + \frac{3}{\lambda^2 \rho_0} |q|^2 \right)$$

et $m_4^{\text{eq}} = \rho - \frac{3}{\rho_0 \lambda^2} |q|^2$.

Flux de chaleur φ

Valeur à l'équilibre approchée pour une distribution gaussienne

$$\varphi^{\text{eq}} = 2 c_0^2 q.$$

Donc
$$m_5^{\text{eq}} = -\frac{1}{\lambda} q^1, \quad m_6^{\text{eq}} = -\frac{1}{\lambda} q^2.$$

Derniers moments m_7 et m_8 pour l'ordre deux.

“Super acoustique non linéaire” :
$$F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \frac{1}{\rho_0} q^\alpha q^\beta + \frac{\lambda^2}{3} \rho \delta_{\alpha\beta}.$$

Valeur à l'équilibre de m_7 :
$$m_7^{\text{eq}} = \frac{1}{\rho_0 \lambda^2} \left[(q_x)^2 - (q_y)^2 \right].$$

Pour m_8 , on a :
$$m_8^{\text{eq}} = \frac{1}{\rho_0 \lambda^2} q_x q_y.$$

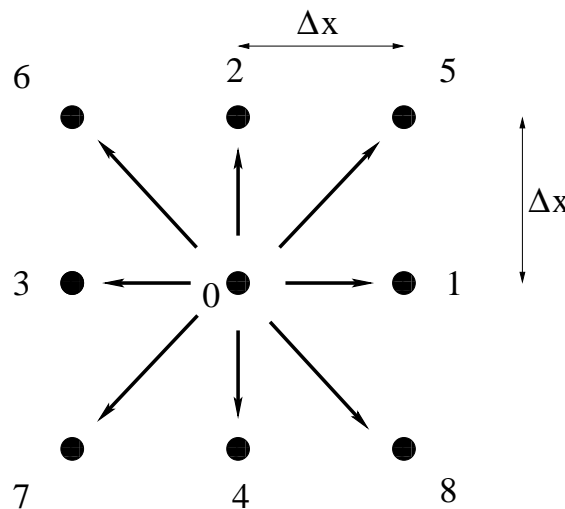
Proposition. Distribution d'équilibre.

Avec les choix faits plus haut,

la distribution à l'équilibre thermodynamique $G_j(W)$ s'écrit

$$G_j(W) = w_j \left[\rho + \frac{3}{\lambda} (e_j \cdot q) + \frac{9}{2\rho_0 \lambda^2} (e_j \cdot q)^2 - \frac{3}{2\rho_0 \lambda^2} |q|^2 \right]$$

$(e_j)_{0 \leq j \leq 8}$: vecteurs de base, $w_0 = \frac{4}{9}$; w_1 à $w_4 = \frac{1}{9}$; , w_5 à $w_8 = \frac{1}{36}$.



Cette distribution d'équilibre est classique dans les modèles de type BGK.

“Défaut de conservation” θ_k du k^0 moment

$$\theta_k \equiv \frac{\partial}{\partial t} m_k^{\text{eq}} + \sum_j M_{kj} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{\text{eq}}; \quad k \geq 3,$$

Tenseur $\Lambda_k^{\alpha\beta}$ des moments-vitesses :

$$\Lambda_k^{\alpha\beta} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (M^{-1})_{jk}, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq 2, \quad 0 \leq k \leq 2,$$

Equations de Navier-Stokes à l'ordre deux :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} q = O(\Delta t^2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q^\alpha + \partial_\beta F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{\alpha\beta} \partial_\beta \theta_k + O(\Delta t^2) \quad 1 \leq \alpha \leq 2$$

Quels sont les coefficients s_k ?

Dynamique du défaut d'équilibre $m_k \rightarrow m_k^*$ des moments non conservés ?

Viscosités de cisaillement μ et de volume ζ à deux dimensions d'espace

$$\tau_{\alpha\beta} = \frac{\mu}{\rho_0} (\partial_\alpha q^\beta + \partial_\beta q^\alpha) + \frac{-\mu + \zeta}{\rho_0} (\operatorname{div} q) \delta_\alpha^\beta, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq 2$$

Navier-Stokes dans l'approximation acoustique :

$$\frac{\partial q^\alpha}{\partial t} + \partial_\beta F_{\alpha\beta} = \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} \equiv \frac{\mu}{\rho_0} \Delta q^\alpha + \frac{\zeta}{\mu_0} \partial_\alpha (\operatorname{div} q), \quad 1 \leq \alpha \leq 2,$$

Proposition. Tenseur des moments-vitesses.

$$\Lambda_0 = \frac{2}{3} \lambda^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_3 = \frac{\lambda^2}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_7 = \frac{\lambda^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_8 = \lambda^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_1 = \Lambda_2 = \Lambda_4 = \Lambda_5 = \Lambda_6 = 0.$$

Proposition. Défauts de conservation.

On a : $\theta_3 = 2 \operatorname{div} q + O(|q|^2) + O(\Delta t)$,

$$\theta_7 = \frac{2}{3} (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + O(|q|^2), \quad \theta_8 = \frac{1}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) + O(|q|^2).$$

Théorème.

Equation équivalente au second ordre du modèle D_2Q_9 .

Sous l'hypothèse $s_7 = s_8$,

l'équation équivalente au second ordre du modèle D_2Q_9

linéarisée en ce qui concerne les effets visqueux, s'écrit

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} q = O(\Delta t^2), \quad \frac{\partial q^\alpha}{\partial t} + \partial_\beta F_{\alpha\beta} = \frac{\mu}{\rho_0} \Delta q^\alpha + \frac{\zeta}{\mu_0} \partial_\alpha (\operatorname{div} q),$$

$$\mu = \rho_0 \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right), \quad \zeta = \rho_0 \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right),$$

qui constituent les “relations de D’Humières” (1992)

Preuve

Il suffit d'expliciter le membre de droite de la relation

$$\frac{\partial}{\partial t} q^\alpha + \partial_\beta F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = x \Delta t \sum_{k \geq 3} \left(\frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{\alpha\beta} \partial_\beta \theta_k + \mathcal{O}(\Delta t^2) \quad 1 \leq \alpha \leq 2$$

On a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} q^\alpha + \partial_\beta F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = & \Delta t \left\{ \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x (2 \operatorname{div} q) \\ \partial_x (2 \operatorname{div} q) \end{pmatrix} \right. \\ & + \left(\frac{1}{s_7} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \left[\frac{2}{3} (\partial_x q_x - \partial_y q_y) \right] \\ \partial_y \left[\frac{2}{3} (\partial_x q_x - \partial_y q_y) \right] \end{pmatrix} \\ & \left. + \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \lambda^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \left[\frac{1}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \right] \\ \partial_y \left[\frac{1}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \right] \end{pmatrix} \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \Delta t \left\{ \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3} \nabla(\operatorname{div} q) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{\lambda^2}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \begin{pmatrix} \partial_x (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + \partial_y (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \\ -\partial_y (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + \partial_x (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \end{pmatrix} \right\} \\
&= \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \nabla(\operatorname{div} q) + \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \Delta q
\end{aligned}$$

On rapproche l'expression précédente et la relation

$$\frac{\partial q^\alpha}{\partial t} + \partial_\beta F_{\alpha\beta} = \frac{\mu}{\rho_0} \Delta q^\alpha + \frac{\zeta}{\mu_0} \partial_\alpha (\operatorname{div} q).$$

D'où le résultat.

Plan détaillé de cette partie

- 1) Symmetry hypothesis
- 2) Conservation laws
- 3) 1D case
- 4) Finite volume boundary conditions for an acoustic wave
- 5) Finite volumes for 2D lattice Boltzmann scheme ?
- 6) Towards 2D finite volumes boundary conditions
- 7) Conclusion

\mathcal{L} a lattice

Δx typical space scale of this lattice,

Δt time step

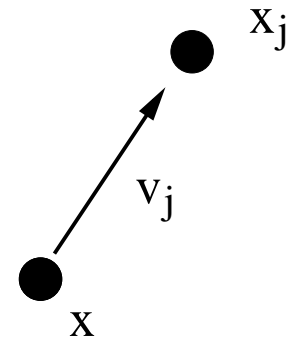
$\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ typical celerity

x a vertex of the lattice,

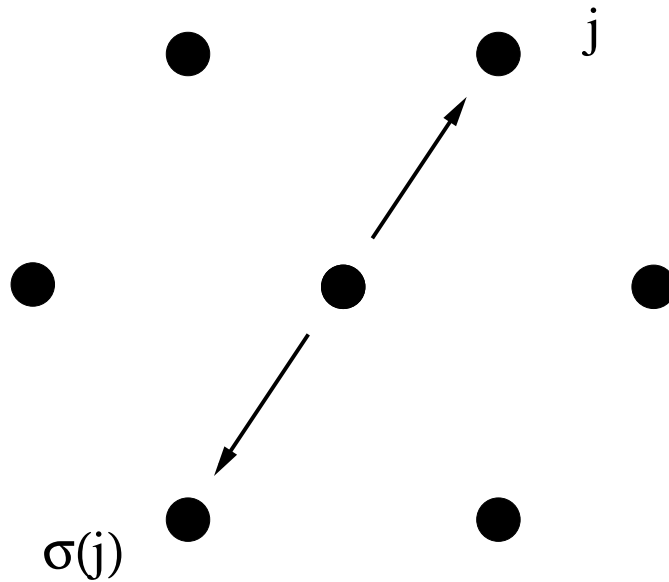
$$x_j \equiv x + \Delta t v_j, \quad (0 \leq j \leq J)$$

neighbouring nodes around the vertex x .

v_j celerity between vertices x and x_j



Central symmetry hypothesis :



$$\forall j \in \{0, \dots, J\}, \quad \exists ! \sigma(j) \in \{0, \dots, J\}, \quad v_j + v_{\sigma(j)} = 0.$$

Distribution $f_j(x, t)$ of particles
on the lattice \mathcal{L} at the vertex x and discrete time t .

$$\text{Density : } \rho \equiv \sum_j f_j \quad \text{momentum } q \equiv \sum_j v_j f_j$$

Conservation during the collision step :

$$\rho = \sum_j f_j = \sum_j f_j^* = \rho^*, \quad q = \sum_j v_j f_j = \sum_j v_j f_j^* = q^*.$$

Dynamics of the lattice Boltzmann scheme :

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

Density : $\rho \equiv \sum_j f_j$

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

Then
$$\begin{aligned} \rho(x, t + \Delta t) &= \sum_j f_j^*(x - v_j \Delta t, t) = \sum_j f_{\sigma(j)}^*(x - v_{\sigma(j)} \Delta t, t) = \\ &= \sum_j f_{\sigma(j)}^*(x + v_j \Delta t, t) = \sum_j f_{\sigma(j)}^*(x_j, t) \end{aligned}$$

We have also $\rho(x, t) = \sum_j f_j^*(x, t)$

We make the difference : $\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) = \sum_j (f_{\sigma(j)}^*(x_j, t) - f_j^*(x, t))$

New way for writing the mass conservation :

$$\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) + \sum_j (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

Same story for momentum $q(x, t) \equiv \sum_j v_j f_j$

$$\begin{aligned} q(x, t + \Delta t) &= \sum_j v_j f_j^*(x - v_j \Delta t, t) = \\ &= \sum_j v_{\sigma(j)} f_{\sigma(j)}^*(x - v_{\sigma(j)} \Delta t, t) = \\ &= - \sum_j v_j f_{\sigma(j)}^*(x + v_j \Delta t, t) = - \sum_j v_j f_{\sigma(j)}^*(x_j, t) \end{aligned}$$

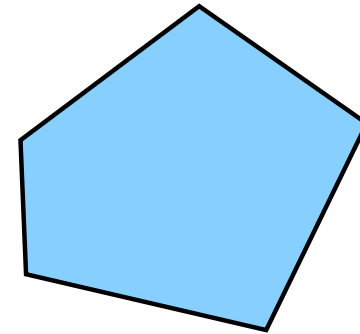
We have also : $q(x, t) = \sum_j v_j f_j^*$

By difference, a new writing for the conservation of momentum :

$$q(x, t + \Delta t) - q(x, t) + \sum_j v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

Finite volume conservation law :

$$\frac{1}{\Delta t} \left[W(x, t + \Delta t) - W(x, t) \right] + \frac{1}{|K(x)|} \int_{\partial K} \Phi \cdot n = 0,$$



Introduce a cell $K(x)$ around the vertex x

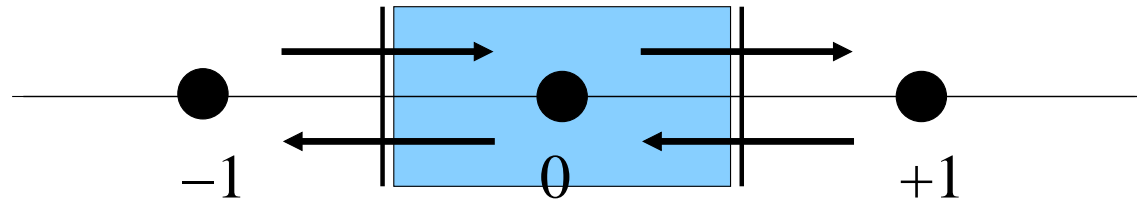
The boundary $\partial K(x)$ is composed by edges $a_j(x) : \partial K(x) = \bigcup_j a_j(x)$,

separating the nodes x and $x_j : a_j(x) = \partial K(x) \cap \partial K(x_j) = a_{\sigma(j)}(x_j)$.

Denote by $|K(x)|$ and $|a_j(x)|$ the measures of $K(x)$ and $a_j(x)$

Discrete form for the conservation of mass and momentum

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} (x, t + \Delta t) - \begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} (x, t) \right] + \frac{1}{|K(x)|} \sum_j |a_j(x)| \begin{pmatrix} \psi_j \\ \zeta_j \end{pmatrix} (x) = 0$$



Cell $K(x)$ around the vertex x ; $|K(x)| = \Delta x$

Its boundary $\partial K(x)$ is composed by 2 “punctual edges”

$a_1(x)$ and $a_2(x)$ such that $|a_j(x)| = 1$

We have

$$\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) + \sum_j (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t)) + \frac{1}{\Delta x} \sum_j \lambda (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

For the momentum :

$$q(x, t + \Delta t) - q(x, t) + \sum_j v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (q(x, t + \Delta t) - q(x, t)) + \frac{1}{\Delta x} \sum_j \lambda v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

id est

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} (x, t + \Delta t) - \begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} (x, t) \right] + \frac{1}{|K(x)|} \sum_j |a_j(x)| \begin{pmatrix} \psi_j \\ \zeta_j \end{pmatrix} (x) = 0$$

$$\text{Mass flux} \quad \psi_j(x) = \lambda (f_j^*(x) - f_{\sigma(j)}^*(x_j))$$

$$\text{Momentum flux} \quad \zeta_j(x) = \lambda v_j (f_j^*(x) + f_{\sigma(j)}^*(x_j))$$

Conservation property :

$$\begin{aligned}\psi_j(\mathbf{x}) + \psi_{\sigma(j)}(\mathbf{x}_j) &= \\ &= \left(f_j^*(\mathbf{x}) - f_{\sigma(j)}^*(\mathbf{x}_j) \right) - \left(f_{\sigma(j)}^*(\mathbf{x}_j) - f_{\sigma(\sigma(j))}^*(\mathbf{x}) \right) = 0\end{aligned}$$

analogous for the momentum :

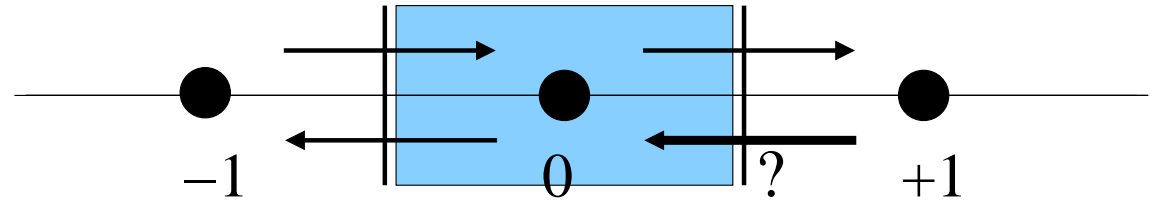
$$\begin{aligned}\zeta_j(\mathbf{x}) + \zeta_{\sigma(j)}(\mathbf{x}_j) &= \\ &= \left(v_j \left(f_j^*(\mathbf{x}) + f_{\sigma(j)}^*(\mathbf{x}_j) \right) \right) + \left(v_{\sigma(j)} \left(f_{\sigma(j)}^*(\mathbf{x}_j) + f_{\sigma(\sigma(j))}^*(\mathbf{x}) \right) \right) \\ &= \left(v_j \left(f_j^*(\mathbf{x}) + f_{\sigma(j)}^*(\mathbf{x}_j) \right) \right) - \left(v_j \left(f_{\sigma(j)}^*(\mathbf{x}_j) + f_j^*(\mathbf{x}) \right) \right) = 0\end{aligned}$$

The method is conservative :

the lattice Boltzmann scheme is a finite volume method !

D1Q3 model

x : boundary vertex



$f_0^*(x)$: particle transfer of null velocity at the vertex x

$f_-^*(x)$: particle transfer of celerity $-\lambda$ from vertex x to point $x - \Delta x$

$f_+^*(x - \Delta x)$: particle transfer of celerity λ
from point $x - \Delta x$ towards vertex x

$f_+^*(x)$: particle transfer of celerity λ from vertex x towards the boundary

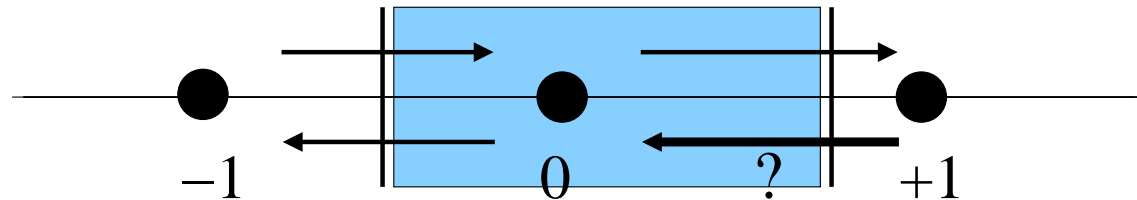
$\Phi_-(x)$: unknown particle transfer of celerity $-\lambda$
from the boundary towards the vertex x

Solid boundary : the **mass flux** is equal to zero at the boundary :

$\psi_+(x) \equiv \lambda(f_+^*(x) - \Phi_-(x))$ is equal to zero

$\Phi_-(x) = f_+^*(x)$: bounce back boundary condition

D1Q3 model : how to take into account an irregular geometry ?



1) Bounce Back : $\Phi_{-}(x) = f_{+}^{*}(x)$

2) more efficient interpolation :

see M. Bouzidi, M. Firdaouss, P. Lallemand (2001)

3) Finite volume boundary condition :

the boundary is located at a distance $\xi\Delta x$ from the vertex x

Make a mass balance in a mesh $K(x)$

that takes into account the boundary : $|K(x)| = (\xi + \frac{1}{2})\Delta x$

Left mass flux : $\psi_{-}(x) = \lambda(f_{-}^{*}(x) - f_{+}^{*}(x - \Delta x))$

Right mass flux : $\psi_{+}(x) = \lambda(f_{+}^{*}(x) - \Phi_{-}(x))$

Write the time evolution scheme by two ways :

$$\begin{aligned} \rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) + (f_+^*(x) - \Phi_-(x)) + (f_-^*(x) - f_+^*(x - \Delta x)) &= 0 \\ \frac{1}{\Delta t} (\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t)) + \\ &+ \frac{1}{(\xi + \frac{1}{2})\Delta x} \left[\psi_+(x) + \lambda(f_-^*(x) - f_+^*(x - \Delta x)) \right] = 0 \end{aligned}$$

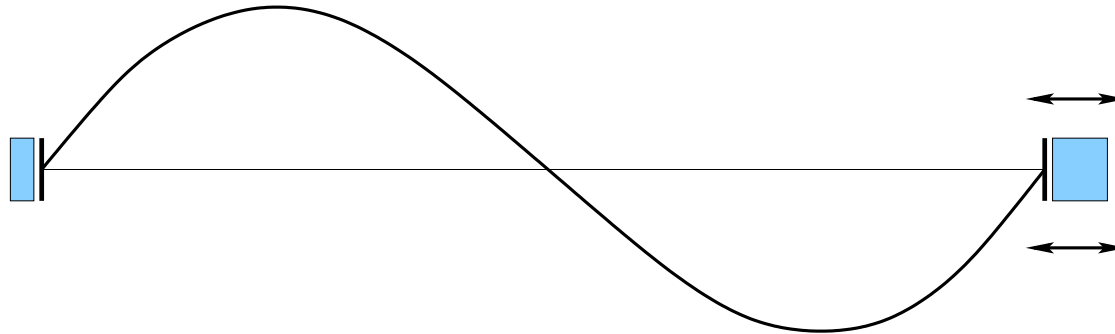
Note that the mass flux $\psi_+(x)$ is equal to zero on the boundary !

After algebraic elimination of the term $(\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t))$ between these two relations, we obtain :

$$(f_+^*(x) - \Phi_-(x)) + (f_-^*(x) - f_+^*(x - \Delta x)) = \frac{1}{\xi + \frac{1}{2}} (f_-^*(x) - f_+^*(x - \Delta x))$$

New formula for the unknown input particle number :

$$\Phi_-(x) = f_+^*(x) + \frac{\xi - \frac{1}{2}}{\xi + \frac{1}{2}} (f_-^*(x) - f_+^*(x - \Delta x)).$$

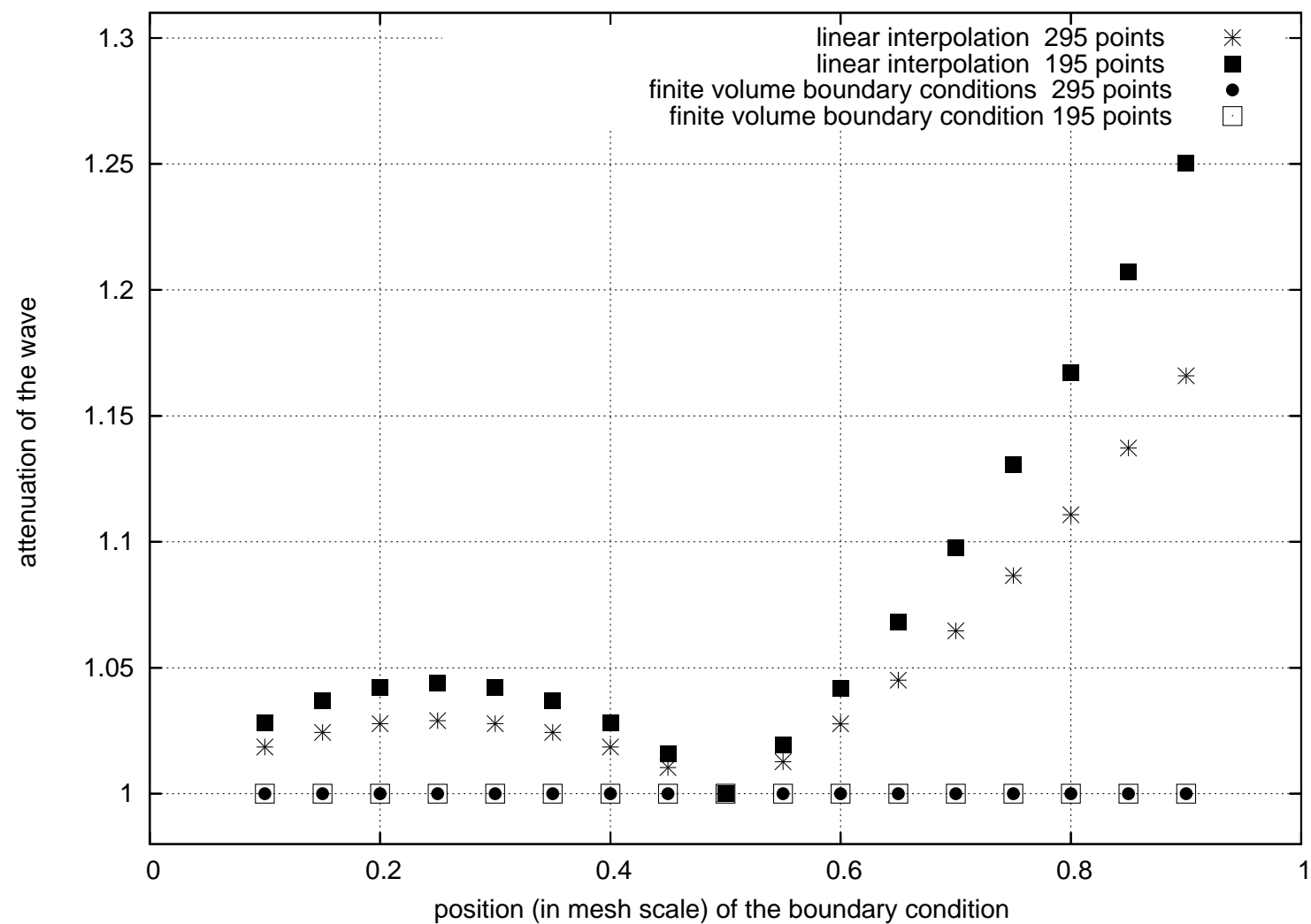


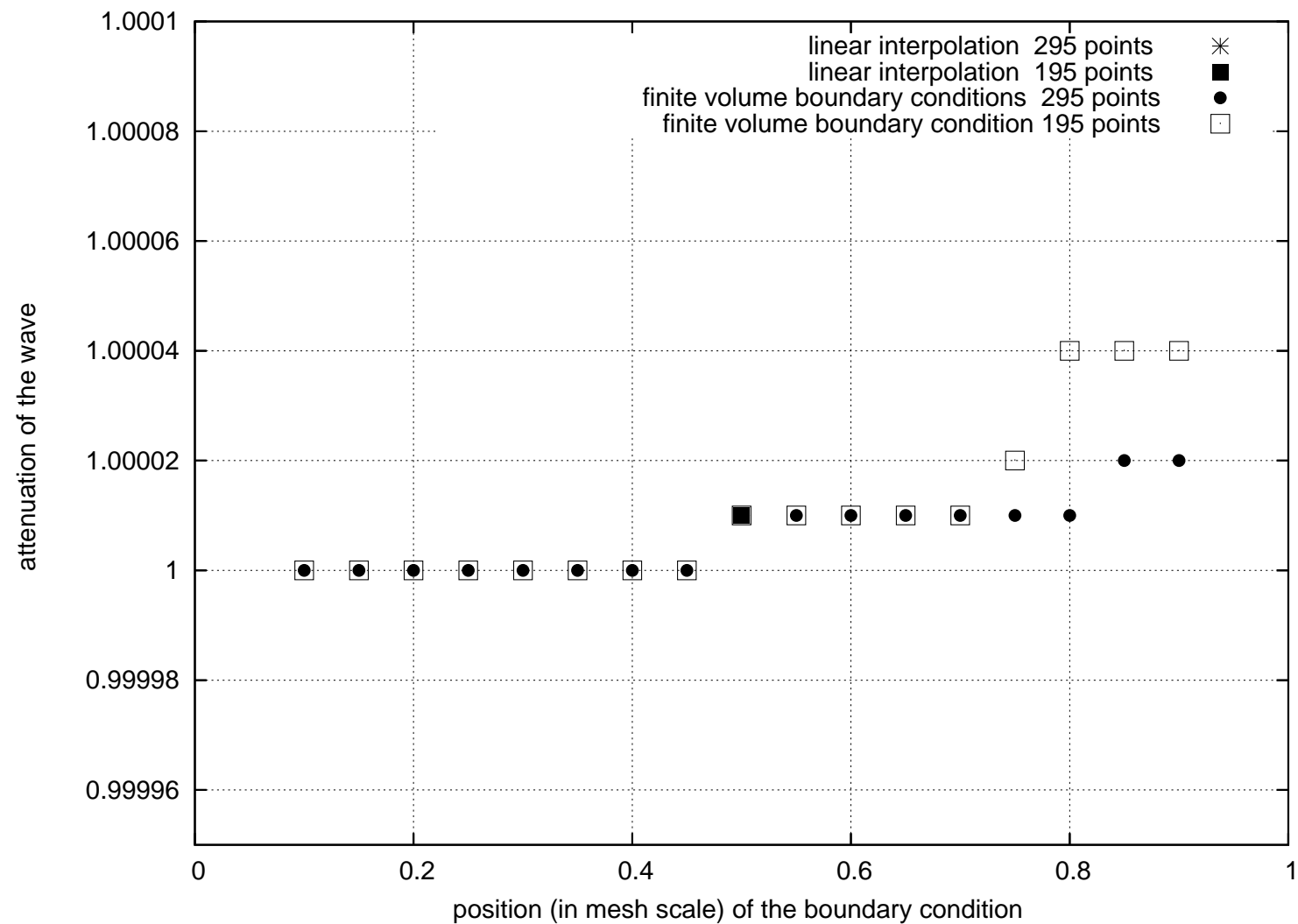
Variation of the boundary condition by a fraction of the mesh Δx

Attenuation of a stationary acoustic wave $\simeq e^{-\Gamma t} e^{i\omega t}$

$$\Gamma_{\text{theoretic}} = \frac{1}{2} \mu k^2$$

The ratio $\frac{\Gamma_{\text{observed}}}{\Gamma_{\text{theoretic}}}$ is function of the numerical scheme.





Two formulae for the time evolution of the conserved momenta :

(i) Lattice Boltzmann scheme

$$\rho(x, t + \Delta t) - \rho(x, t) + \sum_j (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$q(x, t + \Delta t) - q(x, t) + \sum_j v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

(ii) Finite volumes

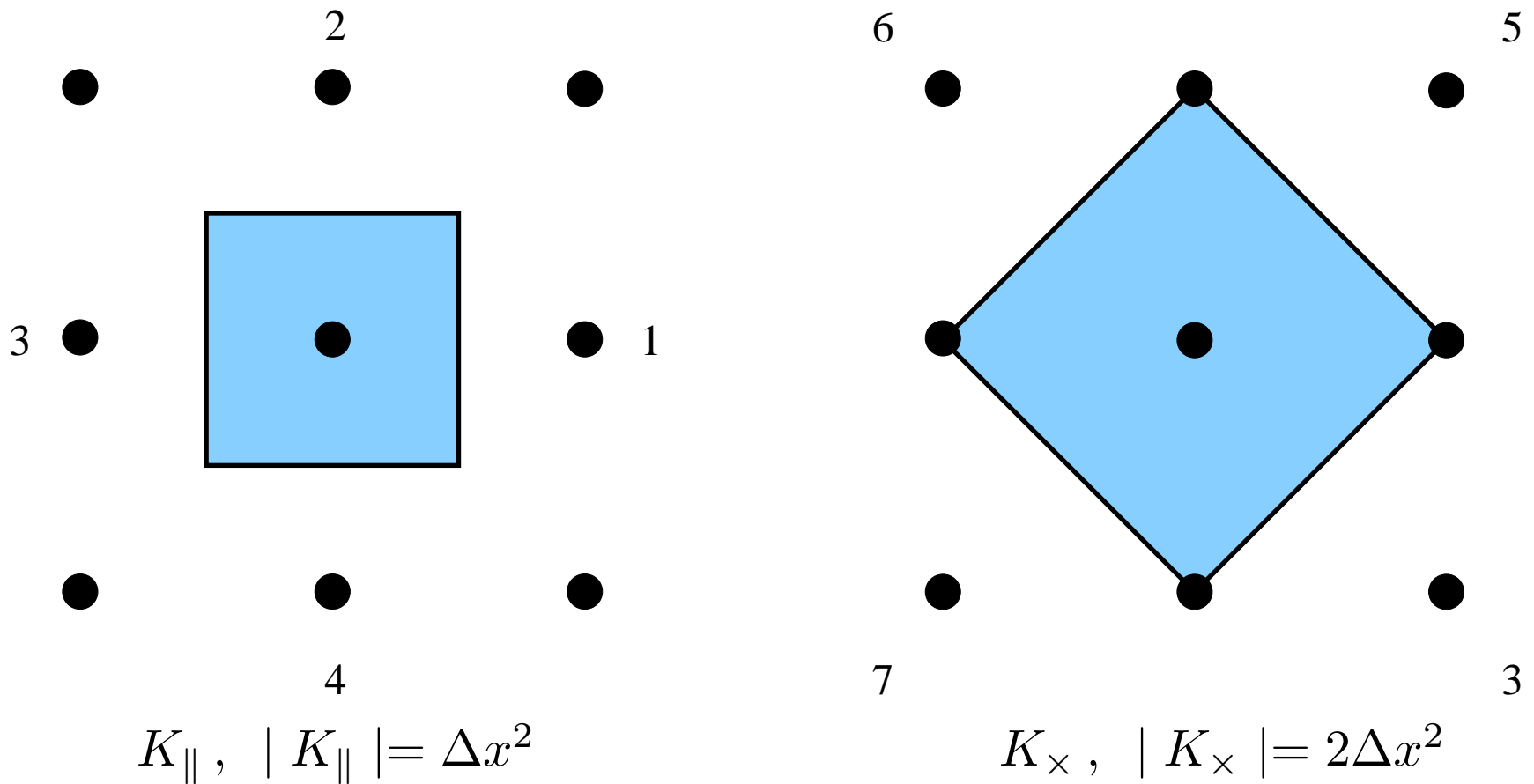
$$\frac{1}{\Delta t} \left[\begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} (x, t + \Delta t) - \begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} (x, t) \right] + \frac{1}{|K(x)|} \sum_j |a_j(x)| \begin{pmatrix} \psi_j \\ \zeta_j \end{pmatrix} (x) = 0$$

Natural questions :

- (i) Where is the (?) finite volume $K(x)$? Geometrically !!
- (ii) What formula for the mass flux ψ_j and the momentum flux ζ_j ?

No satisfying response to the above questions !

Two different finite volumes K_{\parallel} and K_{\times}



Partial sums :

$$\rho_{\parallel}(x, t) = \sum_{j=1}^4 f_j(x, t), \quad q_{\parallel}(x, t) = \sum_{j=1}^4 v_j f_j(x, t)$$

$$\rho_{\times}(x, t) = \sum_{j=5}^8 f_j(x, t), \quad q_{\times}(x, t) = \sum_{j=5}^8 v_j f_j(x, t)$$

We have

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho_{\parallel}(x, t + \Delta t) - \rho_{\parallel}^*(x, t)) + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=1}^4 \lambda (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (q_{\parallel}(x, t + \Delta t) - q_{\parallel}^*(x, t)) + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=1}^4 \lambda v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho_{\times}(x, t + \Delta t) - \rho_{\times}^*(x, t)) + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=5}^8 \lambda (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (q_{\times}(x, t + \Delta t) - q_{\times}^*(x, t)) + \frac{1}{\Delta x} \sum_{j=5}^8 \lambda v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

Surfaces $|K_{\parallel}|$ and $|K_{\times}|$ of K_{\parallel} and K_{\times}

Lenghts of edges $|a_j| = \Delta x$ if $j \leq 4$, $|a_j| = \sqrt{2} \Delta x$ if $j \geq 5$,

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho_{\parallel}(x, t + \Delta t) - \rho_{\parallel}^*(x, t)) + \frac{1}{|K_{\parallel}|} \sum_{j=1}^4 |a_j| \lambda (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (q_{\parallel}(x, t + \Delta t) - q_{\parallel}^*(x, t)) + \frac{1}{|K_{\parallel}|} \sum_{j=1}^4 |a_j| \lambda v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho_{\times}(x, t + \Delta t) - \rho_{\times}^*(x, t)) + \frac{1}{|K_{\times}|} \sum_{j=5}^8 |a_j| \lambda \sqrt{2} (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (q_{\times}(x, t + \Delta t) - q_{\times}^*(x, t)) + \frac{1}{|K_{\times}|} \sum_{j=5}^8 |a_j| \lambda \sqrt{2} v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

Exact equivalence between the two expressions of page 18 if and only if :

Mass flux

$$\psi_j = \lambda (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)), \quad 1 \leq j \leq 4$$

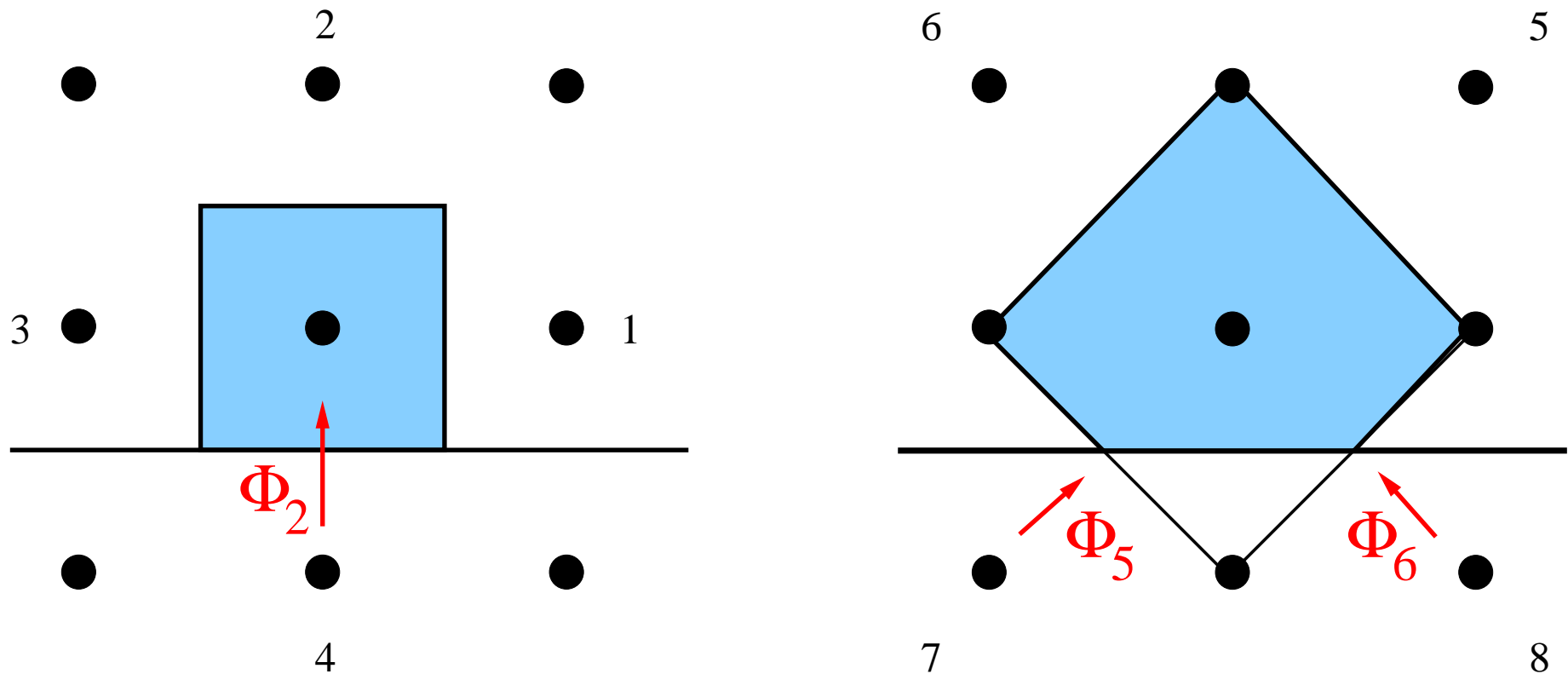
$$\psi_j = \lambda \sqrt{2} (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)), \quad 5 \leq j \leq 8$$

Momentum flux

$$\zeta_j = \lambda v_j (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)), \quad 1 \leq j \leq 4$$

$$\zeta_j = \lambda v_j \sqrt{2} (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)), \quad 5 \leq j \leq 8$$

Example of an horizontal solid boundary (regular geometry)



Three unknown particle distributions Φ_2 , Φ_5 , Φ_6
coming from the outside of the domain

Mass conservation inside the volume K_{\parallel}

$$\rho_{\parallel}(x, t + \Delta t) - \rho_{\parallel}^*(x, t) + \sum_{j=1}^3 (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) + (f_4^*(x, t) - \Phi_2) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho_{\parallel}(x, t + \Delta t) - \rho_{\parallel}^*(x, t)) + \frac{1}{|K_{\parallel}|} \sum_{j=1}^3 |a_j| \lambda (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) = 0$$

with $|K_{\parallel}| = \Delta x^2$ and $|a_j| = \Delta x$

Replace $\rho_{\parallel}(x, t + \Delta t) - \rho_{\parallel}^*(x, t)$ from the first equation inside the second :

$\Phi_2 = f_4^*(x, t)$: classical bounce back

Mass conservation inside the volume K_\times

$$\rho_\times(x, t + \Delta t) - \rho_\times^*(x, t) + \sum_{j=5}^6 (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) + \\ + (f_7^*(x, t) - \Phi_5) + (f_8^*(x, t) - \Phi_6) = 0$$

$$\frac{1}{\Delta t} (\rho_\times(x, t + \Delta t) - \rho_\times^*(x, t)) + \frac{1}{|K_\times|} \sum_{j=5}^6 |a_j| \lambda (f_j^*(x, t) - f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) + \\ + \frac{1}{|K_\times|} \left(|a_7| (f_7^*(x, t) - \Phi_5) + |a_8| (f_8^*(x, t) - \Phi_6) \right) = 0$$

$$\text{with } |K_\times| = \frac{7}{4} \Delta x^2, \quad |a_5| = |a_6| = \sqrt{2} \Delta x \quad \text{and} \quad |a_7| = |a_8| = \frac{\sqrt{2}}{2} \Delta x$$

Then by elimination of $(\rho_\times(x, t + \Delta t) - \rho_\times^*(x, t))$,

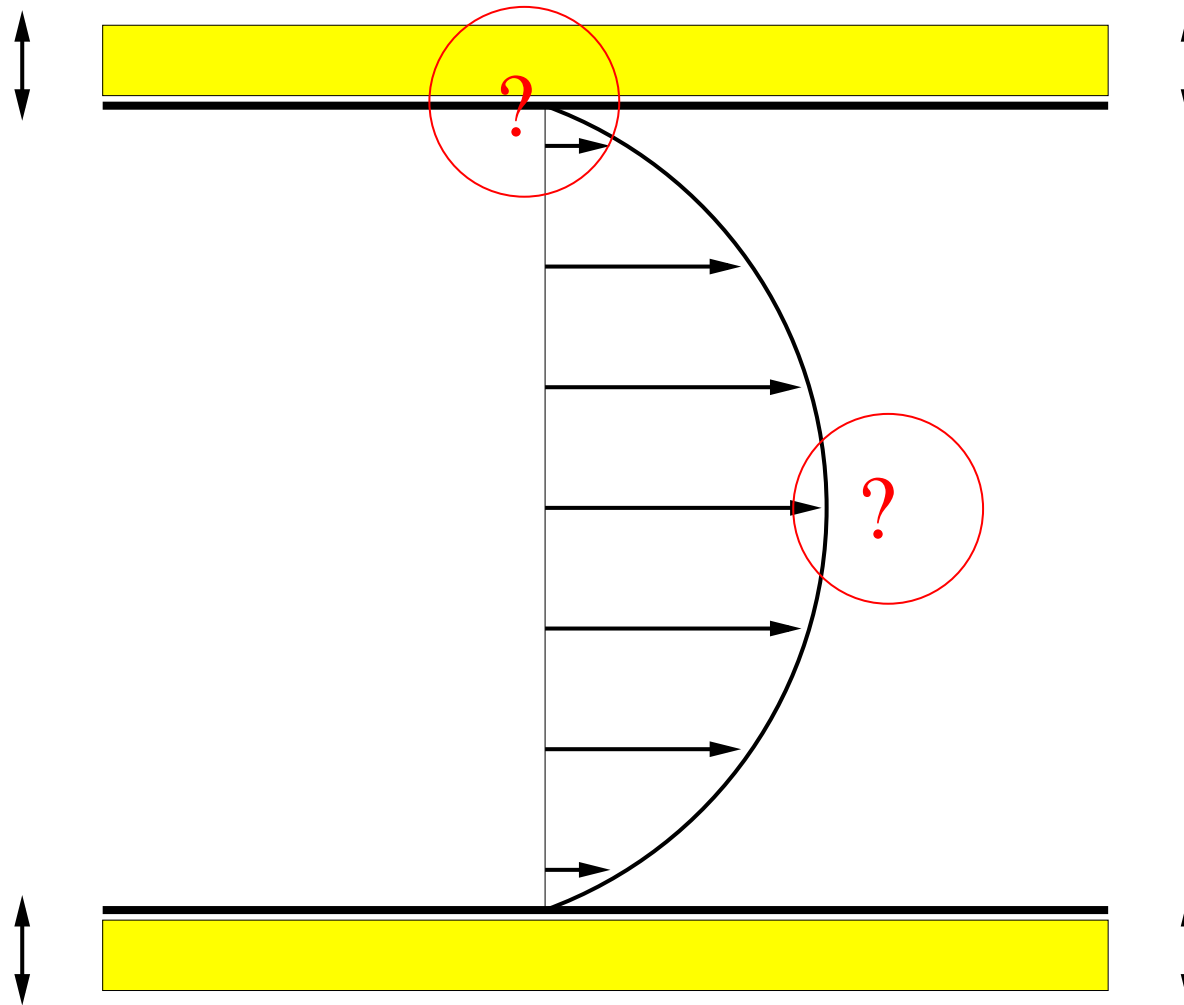
$$\Phi_5 + \Phi_6 = f_7^* + f_8^* - \frac{1}{3} (f_5^* + f_6^* - f_7^*(x_5) - f_8^*(x_6))$$

Tangential momentum inside the volume K_{\times}

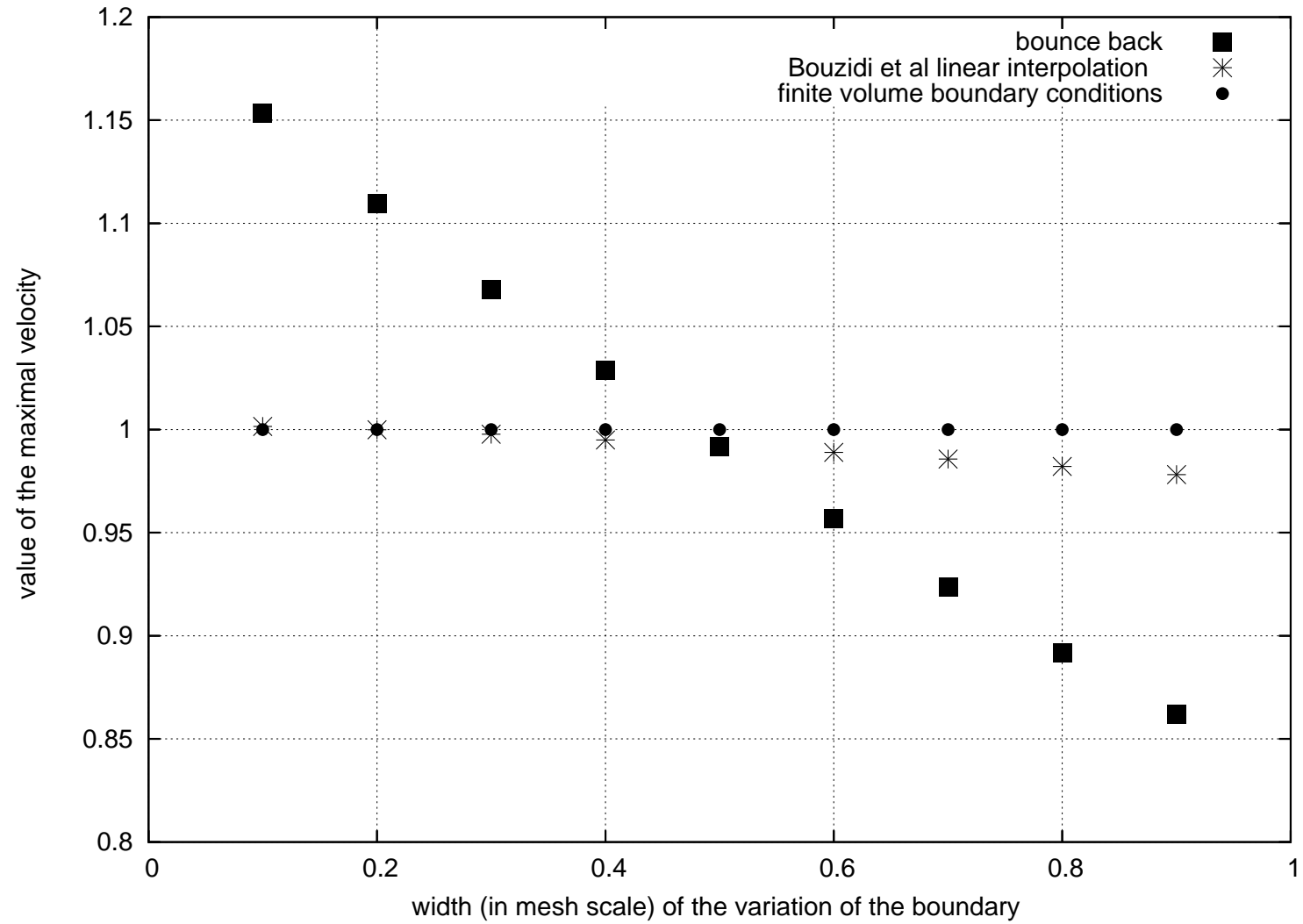
$$q_{\times, x}(x, t + \Delta t)^x - q_{\times, x}^*(x, t) + \sum_{j=5}^6 v_{j, x} (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) + \\ + v_{7, x} (f_7^*(x, t) - \Phi_5) + v_{8, x} (f_8^*(x, t) - \Phi_6) = 0$$

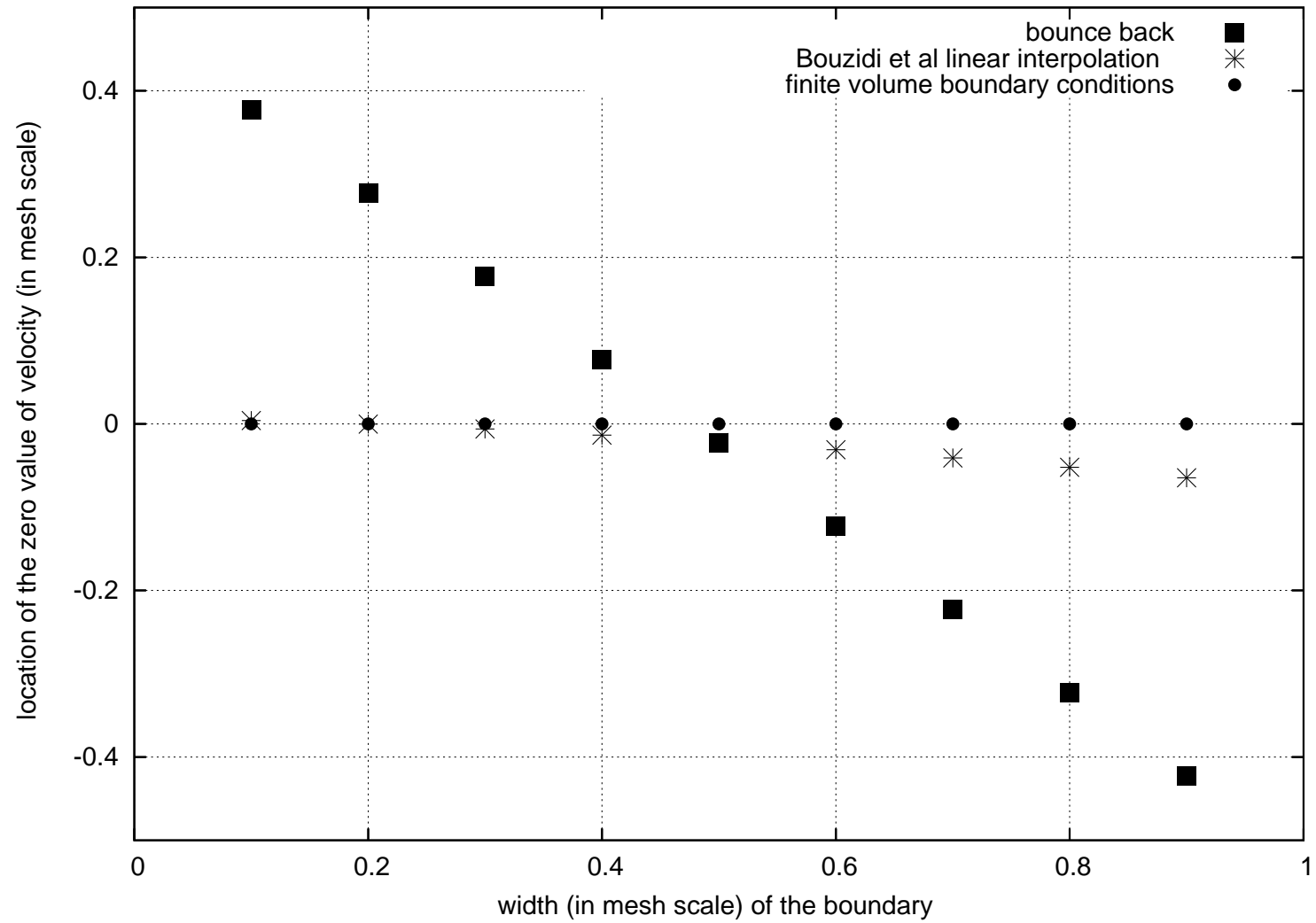
$$\frac{1}{\Delta t} (q_{\times, x}(x, t + \Delta t)^x - q_{\times, x}^*(x, t)) + \\ + \frac{1}{|K_{\times}|} \sum_{j=5}^6 v_{j, x} \sqrt{2} |a_j| \lambda (f_j^*(x, t) + f_{\sigma(j)}^*(x_j, t)) + \\ + \frac{1}{|K_{\times}|} \left(v_{7, x} \sqrt{2} |a_7| (f_7^*(x, t) + \Phi_5) + v_{8, x} \sqrt{2} |a_8| (f_8^*(x, t) + \Phi_6) \right) + \\ + \frac{1}{|K_{\times}|} \frac{\Delta x}{\sqrt{2}} \frac{2}{\Delta x} \frac{\mu}{\rho_0} (q_x(x) - q_{\text{imposed}}) = 0$$

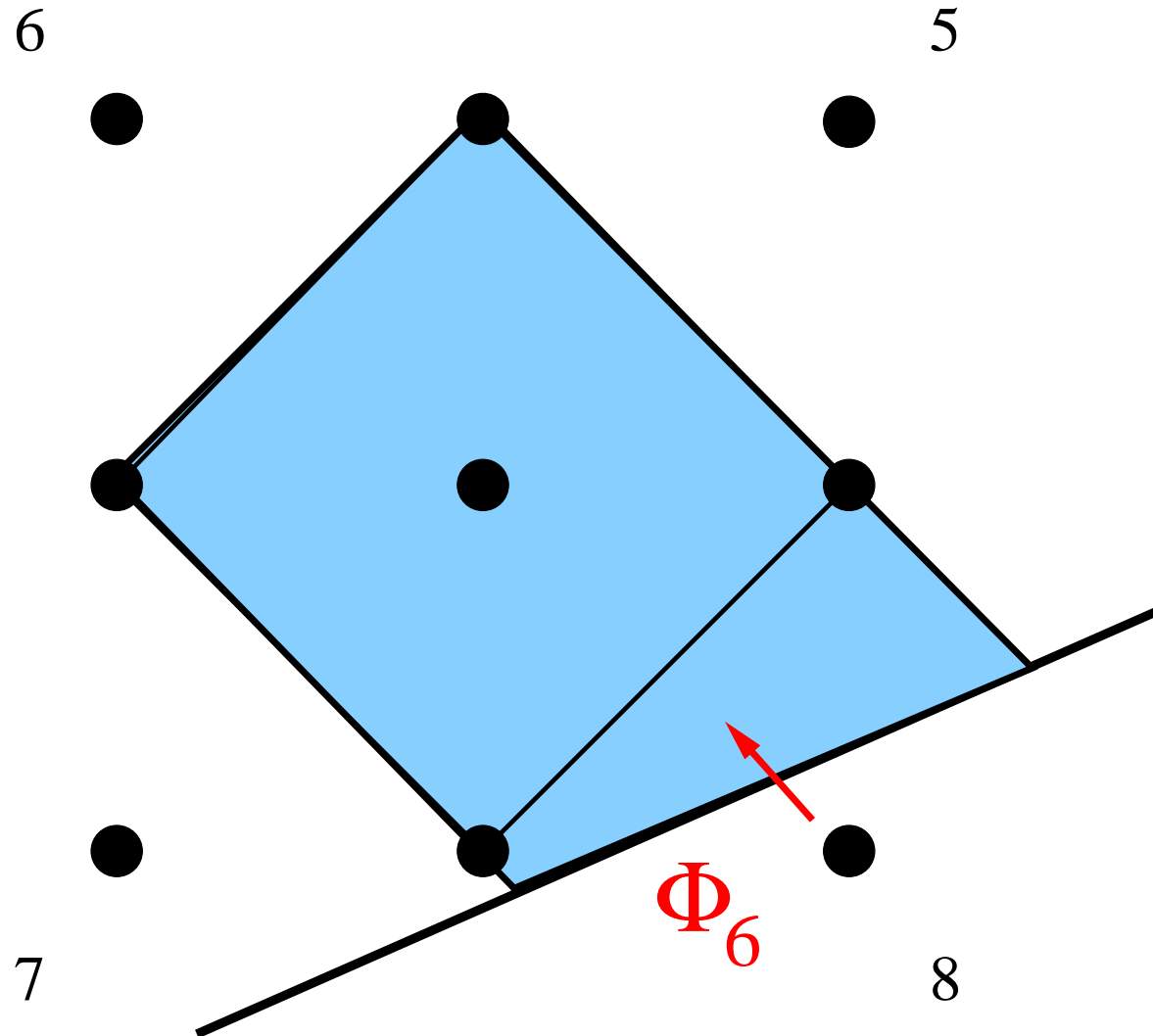
$$\Phi_5 - \Phi_6 = -f_7^* + f_8^* - \frac{1}{3} (f_5^* - f_6^* + f_7^*(x_5) - f_8^*(x_6)) + \frac{8}{3} \frac{\mu}{\rho_0} \frac{q_x(x) - q_{\text{imposed}}}{\lambda^2 \Delta x}$$

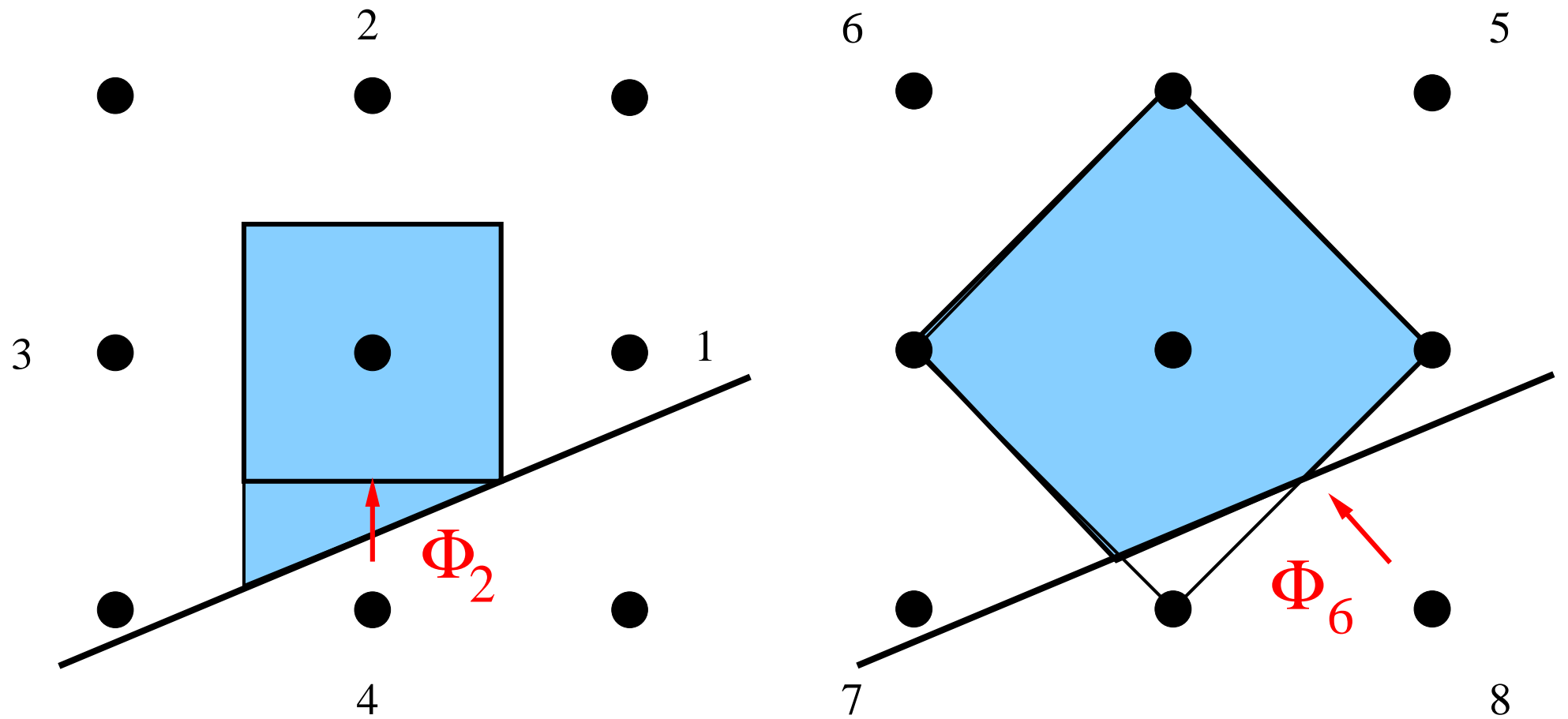


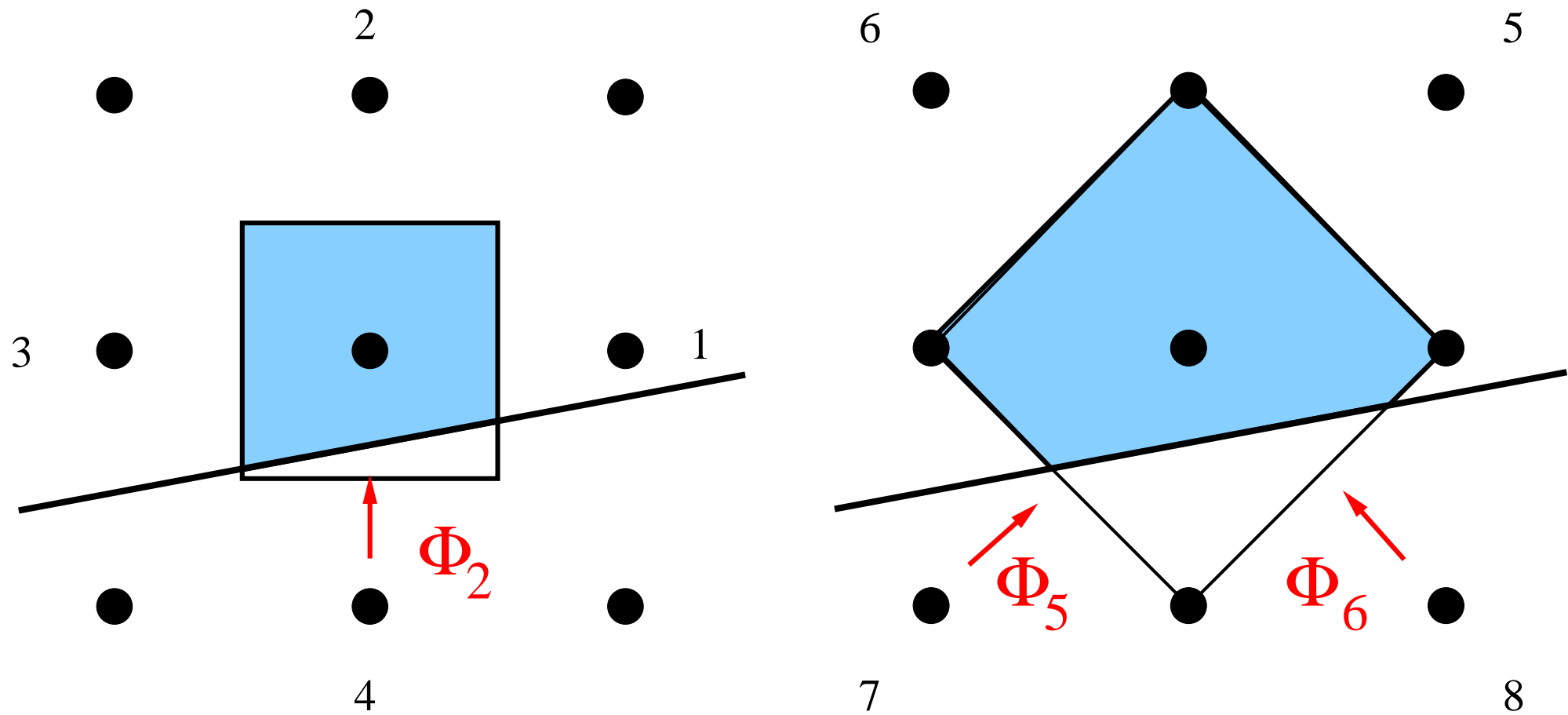
Maximum value of the velocity field ?
Location of the “zero point” of the parabola ?

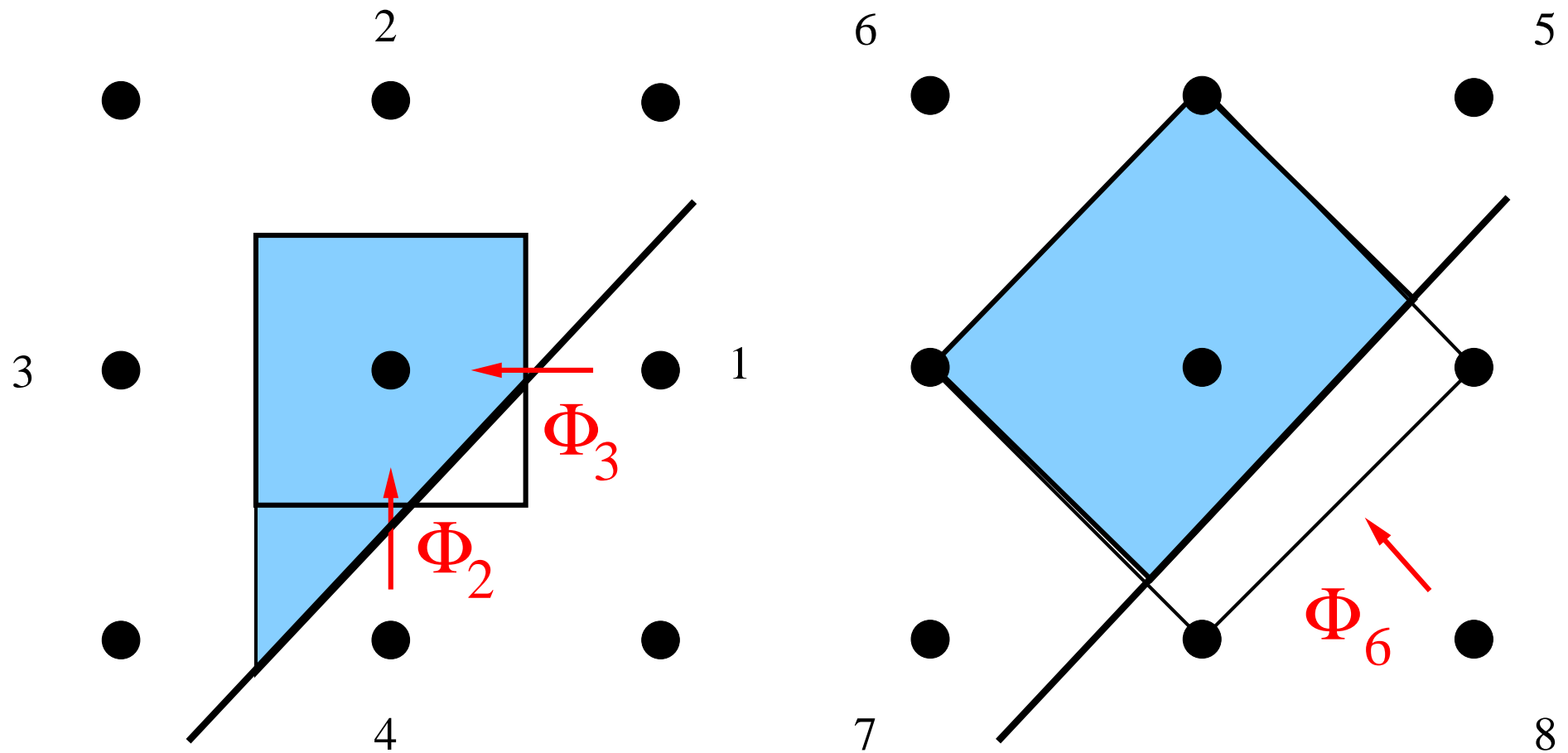


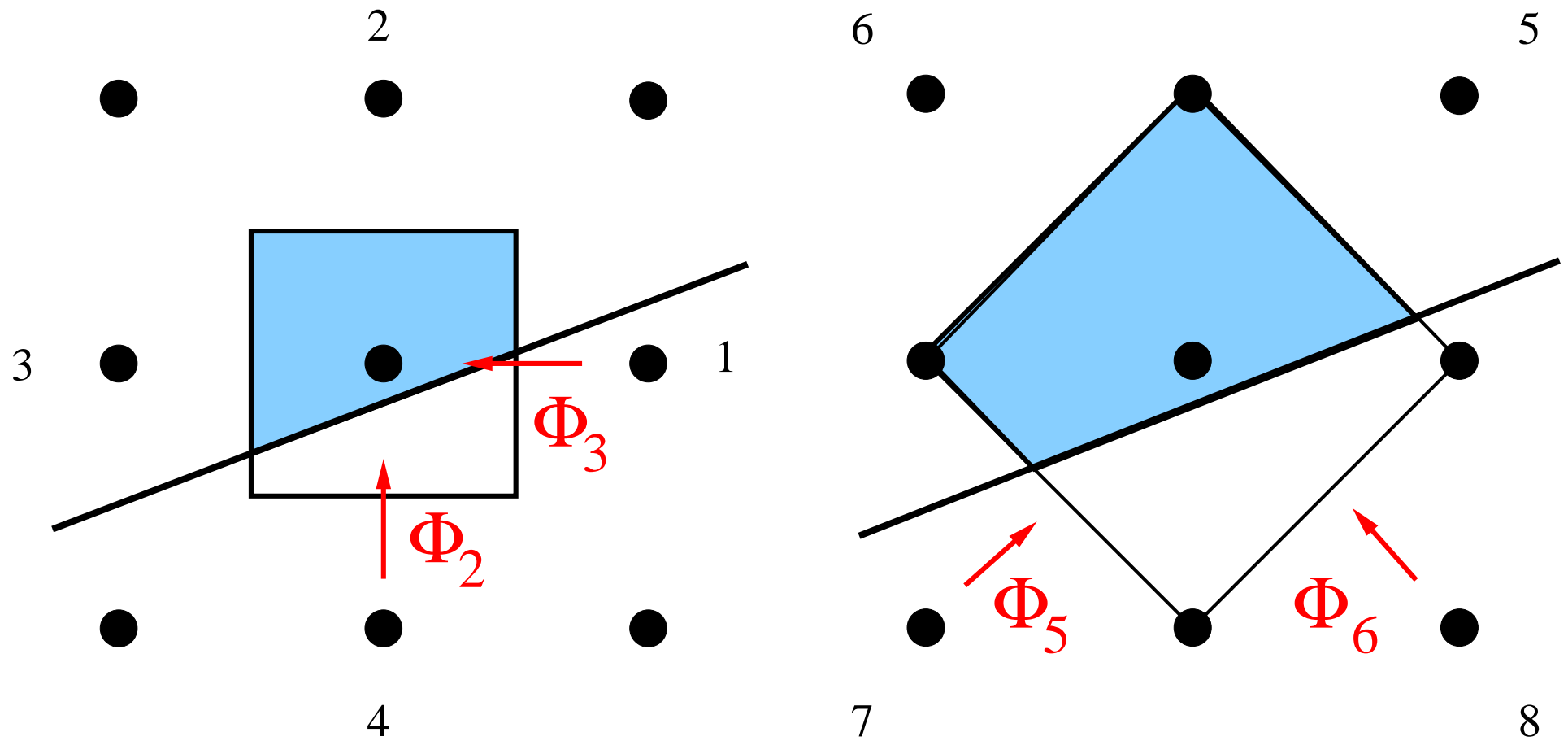






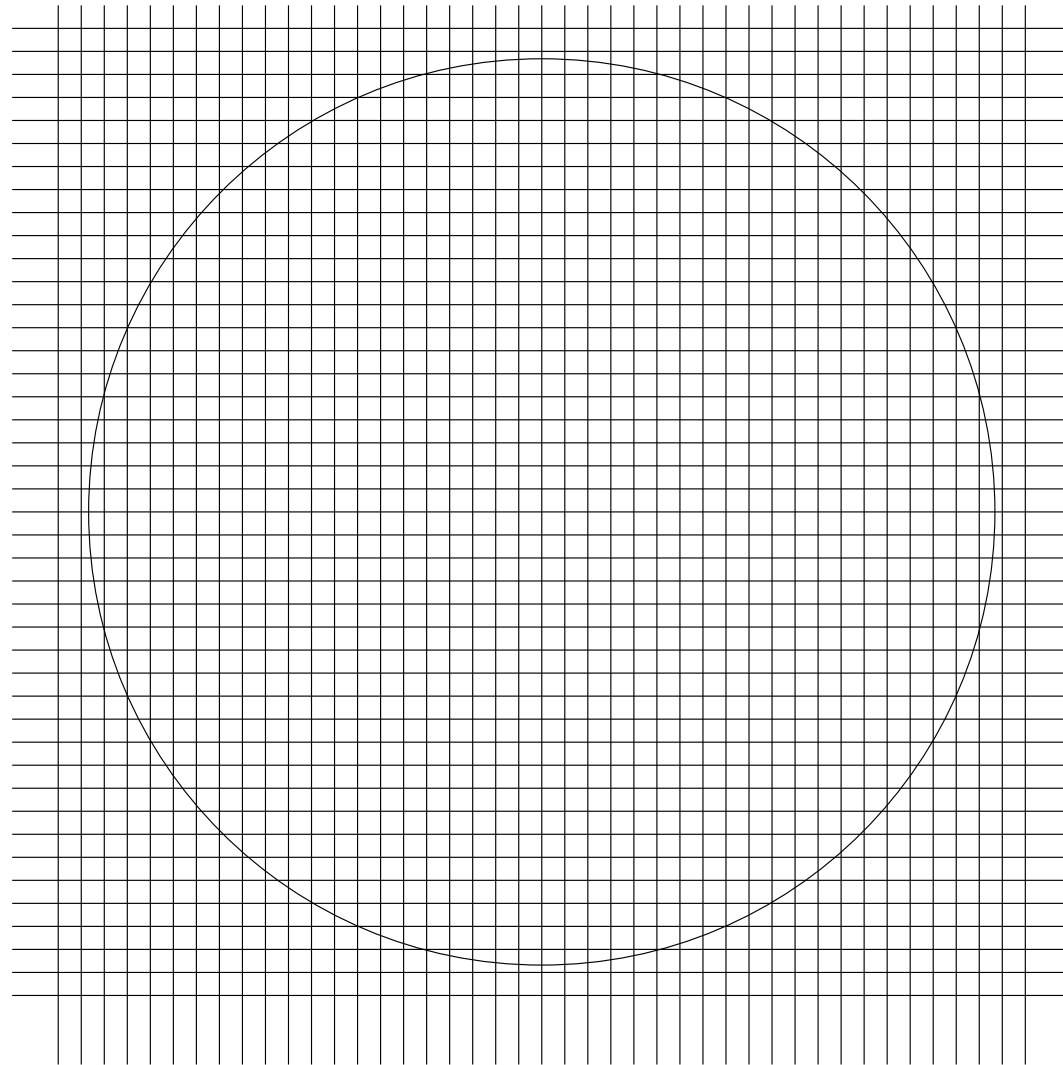






radius = 27.62

viscosity = 0.04



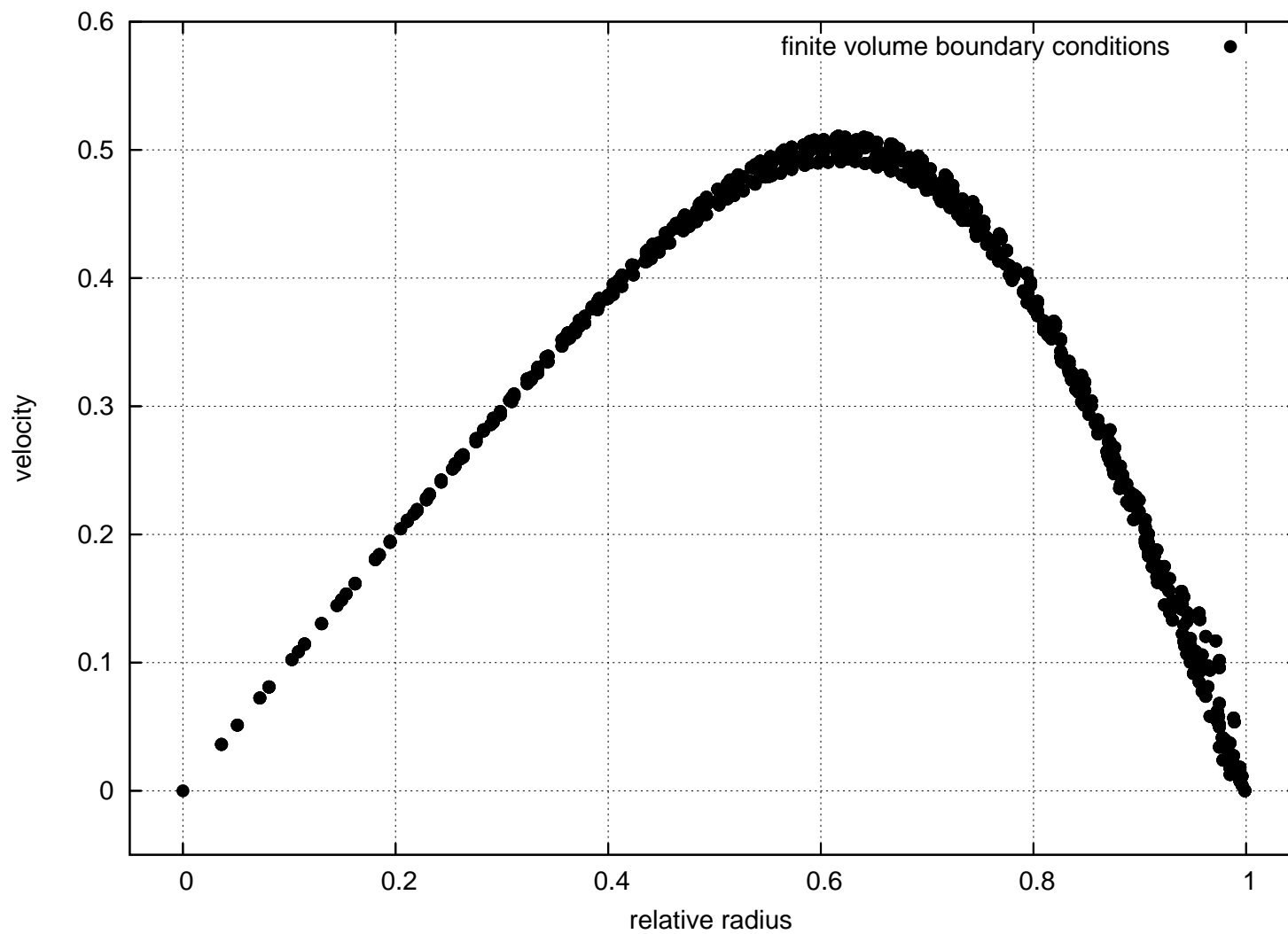
$t = 0$: initial condition with a rigid rotation

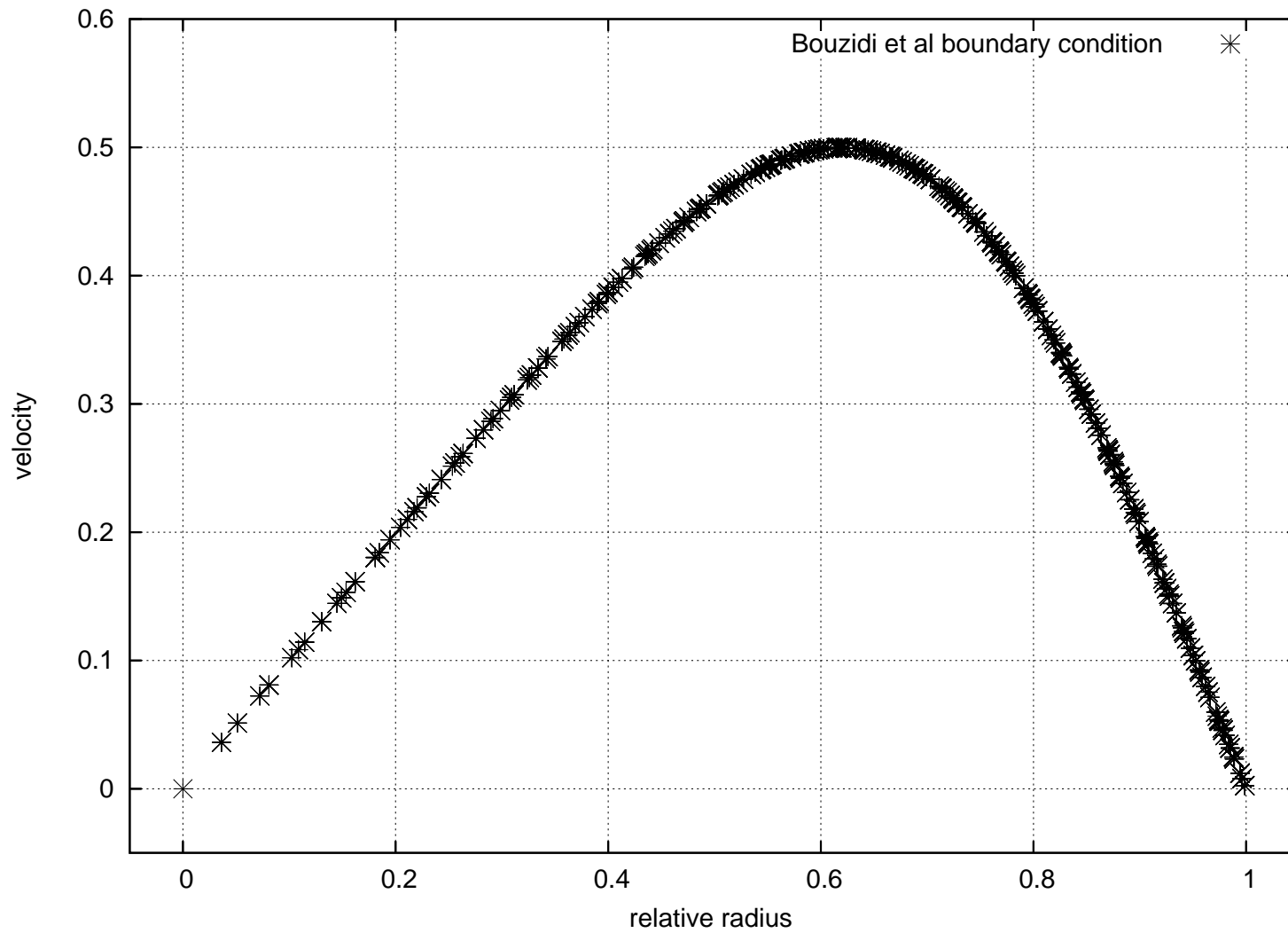
After 500 time steps : measure of the tangential velocity distribution
for all the vertices inside the circle

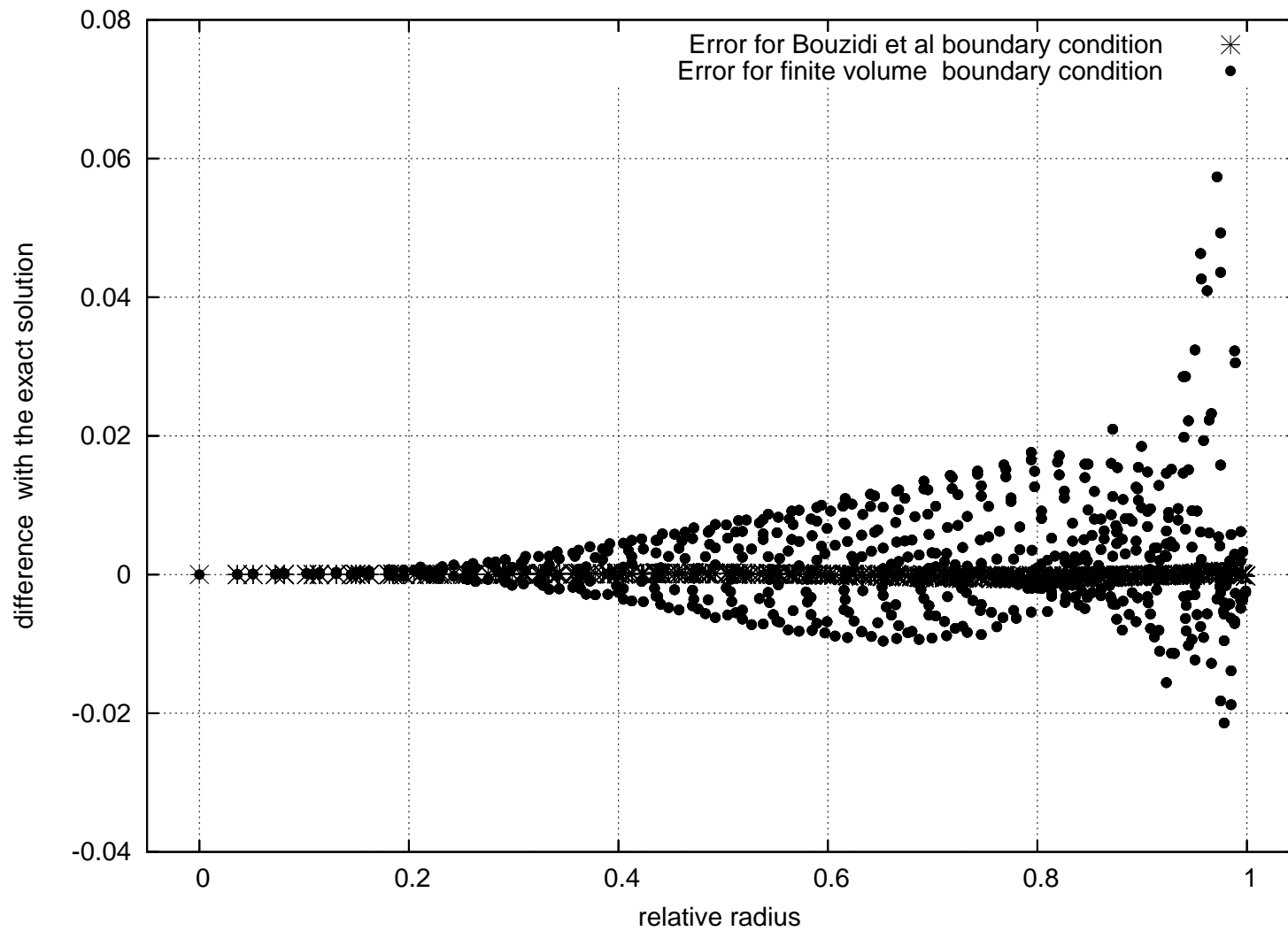
Experiment 1 : finite volume boundary conditions
(except for nodes with four vertices outside the domain)

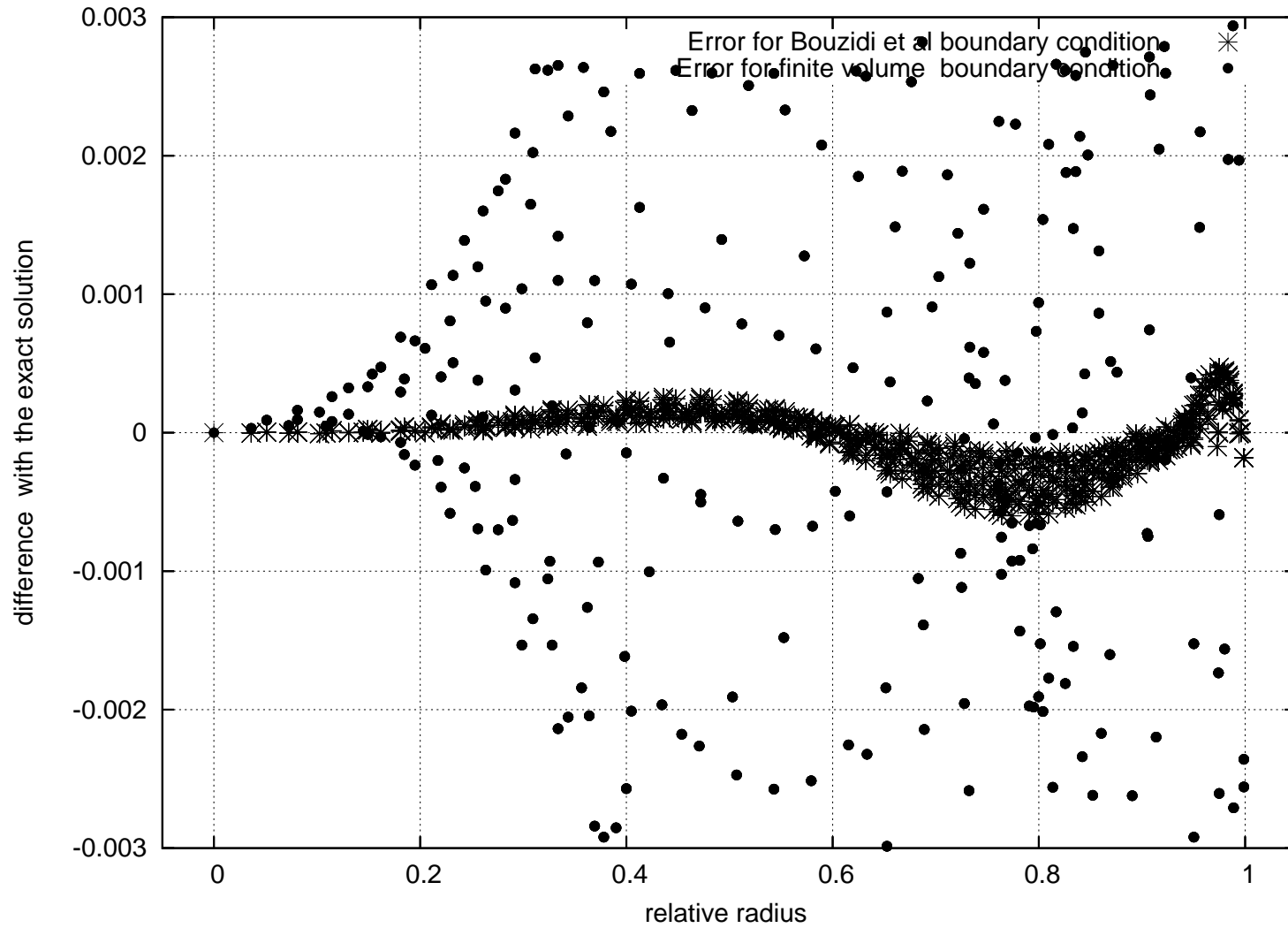
Experiment 2 : Bouzidi-Firdaous-Lallemand boundary conditions

Comparison with the theoretical velocity (sum of Bessel functions)









Analyse asymptotique du schéma de Boltzmann sur réseau

Lien avec la méthode des volumes finis

Nouveau traitement des conditions aux limites avec une approche par flux

Tests satisfaisants pour une onde acoustique et le cas test de Poiseuille

Résultats préliminaires pour un algorithme général bidimensionnel.