

Mémoire

présenté en vue de l'obtention de

L'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Université Paul Sabatier Toulouse 3

Spécialité : Mathématiques Appliquées

par

Luc MIEUSSENS

**Contributions à la simulation numérique en théorie cinétique :
schémas implicites, couplage de modèles,
modèles asymptotiques.**

Soutenue le 13 décembre 2007

Après avis de :

A. KLAR, Professeur	Technische Universität Kaiserslautern
F. GOLSE, Professeur	École Polytechnique
E. SONNENDRÜCKER, Professeur	Université Louis Pasteur, Strasbourg

Devant le jury composé de :

F. BOUCHUT, Directeur de Recherche	CNRS et École Normale Supérieure	<i>(Examineur)</i>
Y. BRENIER, Directeur de Recherche	CNRS et Université de Nice-Sophia-Antipolis	<i>(Examineur)</i>
P. CHARRIER, Professeur	Université Bordeaux 1	<i>(Examineur)</i>
P. DEGOND, Directeur de Recherche	CNRS et Université Paul Sabatier Toulouse 3	<i>(Coordinateur)</i>
F. GOLSE, Professeur	École Polytechnique	<i>(Rapporteur)</i>
M. MASMOUDI, Professeur	Université Paul Sabatier Toulouse 3	<i>(Examineur)</i>
E. SONNENDRÜCKER, Professeur	Université Louis Pasteur, Strasbourg	<i>(Rapporteur)</i>

*À mes parents, mes grands-parents, mes sœurs,
À mes trésors, Zoé et Quentin,
À mon amour, Karine.*

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à dire un grand merci à François Golse, Axel Klar, et Éric Sonnendrücker, qui ont accepté d'être rapporteurs de ce mémoire d'habilitation. Le jugement qu'ils ont porté sur mon travail me touche profondément.

Je suis aussi très reconnaissant à François Bouchut et Yann Brenier qui ont accepté de prolonger leur séjour à Toulouse pour participer au jury.

Je remercie infiniment Mohamed Masmoudi : je suis très impressionné par ses vastes activités de recherche à l'Institut de Mathématiques de Toulouse, et sa présence dans mon jury m'honore particulièrement.

Huit ans après avoir soutenu ma thèse sous sa direction, Pierre Charrier me fait l'amitié de participer à nouveau à mon jury. J'en suis très heureux, et je le remercie très chaleureusement de sa venue à Toulouse.

Je tiens aussi à exprimer toute ma gratitude à Pierre Degond, à qui je dois vraiment beaucoup (comme l'on pourra s'en convaincre aisément à la lecture de ce mémoire). Dès mon arrivée au laboratoire MIP, Pierre m'a proposé de travailler avec lui, en me présentant des sujets de recherche passionnants et variés. Ses vastes connaissances en mathématiques, analyse numérique, et physique, sont époustouflantes. Sa rigueur, sa disponibilité, son efficacité, sa générosité aussi, font de lui un directeur de recherche exceptionnel. Je considère que l'avoir rencontré a été pour moi une chance inestimable.

Par ailleurs, les travaux présentés ici doivent aussi beaucoup à plusieurs autres collaborateurs. Je remercie donc Henning Struchtrup, avec qui j'ai cosigné un article entièrement rédigé par courriel interposé, et que j'espère rencontrer au moins une troisième fois. Je souhaite une carrière passionnante à Antoine Mellet et Jean-Pierre Bourgade avec qui j'ai eu le plaisir de travailler pendant leurs thèses. Merci aussi à Shi Jin pour cette collaboration fructueuse sur le couplage de modèles et pour son invitation à Madison. Merci à Jian-Guo Liu, qui, lors de nos séances de travail à College-Park et à Toulouse, a toujours fait preuve d'un optimisme incroyable ("Luc, I'm sure it's gonna work!"), nourri au rythme effréné d'une nouvelle idée toutes les trente secondes. Ma longue collaboration avec Kazuo Aoki et son équipe (S. Takata, H. Yoshida) a été passionnante, coûteuse en temps CPU! , et ponctuée de multiples échanges. Je remercie donc Kazuo Aoki, en particulier pour son accueil toujours plein d'attention lors de mes visites à Kyoto. Je conclus enfin cette partie collaboration par

un remerciement amical à Mohammed Lemou avec qui j'ai beaucoup de plaisir à collaborer : nous avons mis un peu de temps pour nous mettre à travailler ensemble, mais à présent, si j'en crois la liste de nos projets en cours, j'ose espérer que nous n'en sommes qu'au début d'une longue collaboration !

Un grand merci enfin à tous les membres de l'équipe (et ex-laboratoire) MIP, qui font (ou qui ont fait) de cette unité un lieu idéal pour débiter une carrière d'enseignant-chercheur. Je salue ainsi amicalement Christine Marty, Christophe Besse, Florian Méhats, Xavier Antoine, Marie-Hélène Vignal (5 ans de bureau commun !), Jean-Michel Roquejoffre, Komla Domelevo, Philippe Laurençot, Naoufel Ben Abdallah, Alain Rigal, Luca Amodei, Michel Pradel, François de Thélin, et tous les autres ...

Table des matières

Introduction	9
1 Schémas implicites en temps pour l'équation de Landau [1, 2, 3]	13
1.1 Schémas implicites en temps pour l'équation de Landau homogène en espace	14
1.2 Solveurs linéaires	17
1.3 Application à l'équation de Landau isotrope	19
1.4 Perspectives	19
2 Méthodes de couplage cinétique-fluide	21
2.1 Couplage cinétique/fluide par décomposition de domaine sans condition aux limites d'interface [4]	22
2.2 Couplage cinétique/fluide avec interface mobile [5]	28
2.3 Equation fluide avec raffinement local de modèle [6]	30
2.4 Perspectives	33
3 Méthodes numériques pour équations cinétiques préservant l'asymptotique fluide	35
3.1 Schéma numérique pour l'équation de Boltzmann préservant l'asymptotique Navier-Stokes compressible [7]	36
3.2 Schéma numérique pour l'équation du transport linéaire préservant l'asymptotique de diffusion [8]	40
3.3 Perspectives	44
4 Modélisation et calcul numérique pour un problème de micro-fluidique	47
4.1 Glissement thermique et compresseurs de Knudsen	47
4.2 Calcul stationnaire Boltzmann-BGK en deux dimensions par schéma implicite [9, 10]	50
4.3 Approximation de la diffusion induite par les collisions au bord [11, 12]	54
4.4 Approximation par un modèle hydrodynamique [13]	59
4.5 Perspectives	59
5 Etude et construction de quelques modèles cinétiques simplifiés	61
5.1 Discrétisation en vitesse d'un modèle BGK pour la dynamique des gaz polyatomiques [14]	61

5.2	Construction et approximation numérique de modèles BGK à temps de relaxation dépendant de la vitesse moléculaire [15, 16]	64
5.3	Comparaison numérique d'une équation cinétique et de deux modèles S.H.E [17]	65
	Liste des publications	69
	Bibliographie	71

Introduction

La simulation numérique des systèmes de particules décrits par la théorie cinétique est utilisée dans de nombreux domaines de la physique : citons la dynamique des gaz raréfiés et des plasmas, le transport des neutrons ou le transfert radiatif, qui sont des domaines mobilisant depuis longtemps de nombreux numériciens. Actuellement, de nouveaux domaines sont abordés par la théorie cinétique, comme la dynamique des populations humaines, animales ou cellulaires, ou encore le trafic routier, qui sont aussi sources de recherches en simulation numérique.

La difficulté essentielle que présentent ces problèmes de simulation tient à la complexité des modèles mathématiques sous-jacents : ce sont souvent des équations intégro-différentielles contenant un grand nombre de variables. Par exemple, de nombreux problèmes de cinétique des gaz comportent une variable de temps, trois de position, et trois de vitesse, mais cela peut être beaucoup plus (molécules polyatomiques, gaz multi-espèces, particules de taille variable, etc.). Il faut cependant souligner une autre source de difficultés : les problèmes cinétiques contiennent souvent des échelles de temps et d'espace très différentes. C'est le cas par exemple du transport de photons dans un milieu hétérogène : l'échelle de temps peut être très différente selon que le milieu est opaque ou transparent. Dans les équations, ces différences d'échelles se traduisent par la raideur de certains termes qui induisent des contraintes très fortes sur les paramètres de discrétisation numérique.

De telles difficultés nécessitent de construire des méthodes numériques efficaces sans lesquelles les ordinateurs actuels peuvent ne pas fournir des simulations assez précises en des temps raisonnables. Pour cela, de nombreuses approches ont bien sûr été proposées : de façon générale, elles sont toutes basées soit sur des techniques d'accélération des calculs cinétiques par des algorithmes adéquats, soit sur des simplifications de la physique du problème. Il est important de préciser que toutes ces approches sont liées et bénéficient souvent des avancées des unes et des autres. Donnons ci-dessous une liste non exhaustive des différentes approches utilisées.

Généralement, la simplification de modèle est basée sur l'idée suivante : dans les régimes où les collisions sont nombreuses, le système est proche d'un état d'équilibre, et le modèle cinétique peut être remplacé par un modèle macroscopique, beaucoup moins complexe à résoudre numériquement. On obtient ainsi les équations classiques de la mécanique des fluides ou les équations de diffusion du transport linéaire et du transfert radiatif. Il existe aussi des recherches visant à étendre la validité de ces modèles macroscopiques à des zones où le système est plus éloigné de l'équilibre (modèles asymptotiques d'ordre supérieur, modèles aux moments, correcteurs de couche limite). C'est encore un domaine très actif, notamment

avec l'essor de la micro-fluidique, ou avec les recherches en physique des plasmas qui sont une grande source de problèmes multi-échelles.

Quand les différentes échelles sont présentes dans des parties différentes du domaine de calcul, il est naturel d'essayer d'accélérer la simulation en utilisant les modèles cinétique et macroscopique dans leurs domaines de validité respectifs. La difficulté est alors d'identifier les différents domaines, et de trouver un moyen de raccorder les deux descriptions. Si la transition entre les deux domaines n'est pas suffisamment localisée, cela nécessite alors d'avoir un modèle macroscopique valide légèrement au-delà du régime d'équilibre (sujet mentionné ci-dessus), soit d'avoir une méthode de résolution cinétique qui fonctionne dans une zone proche de l'équilibre.

Cette dernière contrainte est celle prise en compte par la théorie des schémas "Asymptotic Preserving" (AP). Il s'agit de construire des méthodes stables et précises, uniformément par rapport aux paramètres d'échelle présents dans le problème. Un ingrédient essentiel pour arriver à cette stabilité uniforme, en particulier pour la stabilité en temps, est la technique de la discrétisation implicite en temps. C'est une technique connue pour, en quelque sorte, "filtrer" les variations temporelles rapides, qui est utilisée par exemple pour les équations avec terme source raide (comme dans le cas des collisions nombreuses), ou pour les équations de diffusion (où la raideur est due aux hautes fréquences). Cette technique nécessite néanmoins de résoudre des systèmes linéaires ou non-linéaires de très grande taille, ce qui explique sans doute son utilisation relativement récente dans le domaine de la théorie cinétique, alors qu'elle est utilisée depuis longtemps en mécanique des fluides numériques, par exemple. Les avancées récentes en analyse numérique matricielle (solveurs pour grands systèmes creux, méthodes de Newton-Krylov, etc.) permettent à présent d'étudier sérieusement cette approche.

Citons enfin le problème de la mise au point d'algorithmes performants pour le calcul de collisions. Cela est surtout important pour les problèmes non linéaires du type Boltzmann où les particules entrent en collision les unes avec les autres. L'objectif est alors d'obtenir des algorithmes rapides (dont le coût est proportionnel au nombre de particules) qui préservent les propriétés physiques comme celles de conservation et d'entropie. Diverses approches permettent d'obtenir des résultats plus ou moins satisfaisants comme les méthodes probabilistes du type Monte-Carlo ou les approches déterministes du type multigrille, qui font encore actuellement l'objet de recherches. Une autre possibilité, plus simple, consiste à modifier le modèle de collision, généralement en le remplaçant par un modèle de type relaxation vers l'équilibre local.

Ce rapport rassemble donc les résultats que j'ai obtenus, en collaboration avec plusieurs personnes, dans les différents domaines de recherche mentionnés ci-dessus. Presque tous ces travaux contiennent des nouvelles méthodes ou techniques de simulation en théorie cinétique, dont les potentialités sont illustrées par de nombreux tests numériques. Les approximations proposées ont parfois été justifiées par des résultats mathématiques (stabilité, préservation de propriétés de conservation et d'entropie, etc.), mais l'analyse mathématique rigoureuse de ces méthodes est un vaste chantier que je n'ai que peu abordé jusqu'à présent. Le chapitre 1 est consacré au développement de schémas implicites pour l'équation de Landau. Cette équation cinétique contient un terme source de type diffusion non-linéaire qui induit une raideur spectrale. Nous étudions donc la possibilité de construire des schémas implicites tout en

obtenant des méthodes rapides et conservatives. Dans le chapitre 2, nous exposons deux méthodes de couplage de modèles dont l'idée est de s'affranchir de la condition aux limites d'interface. La seconde méthode est une méthode multi-échelle assez générale qui prend en compte la description cinétique pour raffiner localement le modèle macroscopique. Cette idée est aussi utilisée dans le chapitre 3 pour développer des schémas AP : elle permet de discrétiser de façon différente les différentes échelles du problème pour aboutir à des schémas très efficaces. Le chapitre 4 rassemble plusieurs résultats visant à simuler numériquement un nouveau système de micro-pompe. Nous avons proposé différentes techniques (simulation cinétique déterministe et modélisation macroscopique par un modèle de diffusion) et utilisé des techniques existantes (DSMC, modèle de type Navier-Stokes compressible avec conditions de glissement). Enfin, le chapitre 5 contient des travaux plus isolés consacrés à des études de modèles cinétiques simplifiés comme le modèle BGK (construction et discrétisation) ou le modèle SHE (comparaisons numériques).

Pour terminer cette introduction, je précise quelques éléments concernant la présentation de ce document. Les citations "numériques" du type [1], [2], etc., renvoient à la liste de mes publications données en page 69. Les autres références du type [CBKM00] renvoient à la bibliographie générale donnée page 71. Pour préserver une certaine homogénéité à ce mémoire, les notations adoptées dans les résumés d'articles sont parfois différentes de celles utilisées dans les articles eux-mêmes. Enfin, si chaque section se conclut avec un ou deux résultats numériques donnés pour illustrer les propriétés des méthodes, les articles correspondants contiennent eux de nombreux autres résultats.

Chapitre 1

Schémas implicites en temps pour l'équation de Landau [1, 2, 3]

L'équation de Fokker-Planck-Landau (FPL) est une équation cinétique modélisant les systèmes de particules en physique des plasmas. Du point de vue numérique, la principale difficulté est que l'opérateur de collision de cette équation comporte des termes de diffusion par rapport à la variable de vitesse. Ainsi, dans le cas où l'on s'intéresse à l'équation FPL homogène en espace (ce qui est le cas dans la stratégie standard de résolution par méthode de *splitting* en temps), le problème se présente comme une équation de convection-diffusion avec coefficients non locaux. Toute tentative de discrétisation en temps de l'équation FPL doit donc faire face au problème classique de la stabilité numérique des approximations des équations de diffusion. Classiquement, ce type d'équation se discrétise par un schéma implicite en temps, ce qui permet de s'affranchir de la raideur induite par la diffusion. Cependant, en raison de la complexité de l'équation de FPL, l'utilisation de schémas implicites présente de sérieuses difficultés et n'a été étudiée que relativement récemment.

Dans ce chapitre, nous résumons les travaux obtenus en collaboration avec M. Lemou et publiés dans le *SIAM Journal of Scientific Computing* en 2005 [2] (voir aussi la note [1] et une version légèrement modifiée pour une conférence dans [3]). Dans la section 1.1, nous proposons de nouveaux schémas de discrétisation en temps, en tentant de concilier l'aspect implicite et les deux points suivants :

- préservation des propriétés de conservation : nous obtenons des méthodes qui préservent ces propriétés, bien que nos schémas contiennent des solveurs linéaires itératifs qui par définition ne convergent pas exactement (section 1.2) ;
- rapidité de l'algorithme : en utilisant la propriété d'entropie, nous construisons des méthodes symétriques qui permettent l'utilisation de solveurs linéaires rapides comme le Gradient Conjugué.

Ces schémas sont appliqués à l'équation FPL isotrope dans la section 1.3. Nous donnons enfin quelques perspectives pour le cas tri-dimensionnel dans la section 1.4.

Notons que nous ne nous intéressons pas ici au problème de la discrétisation de la variable de vitesse de l'équation : nous utilisons des méthodes existantes, bien que ce sujet de recherche mérite assurément d'être développé.

1.1 Schémas implicites en temps pour l'équation de Landau homogène en espace

L'équation FPL homogène en espace s'écrit sous la forme de Landau

$$\partial_t f(t, v) = Q(f)(v) = \nabla \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) (f(v_*) \nabla f(v) - f(v) \nabla f(v_*)) dv_*, \quad (1.1)$$

où f est la fonction de distribution des vitesses des particules qui dépend du temps t et de la vitesse $v \in \mathbb{R}^d$ ($d = 2, 3$). Le noyau $\Phi(w)$ est la matrice $d \times d$ suivante :

$$\Phi(w) = C|w|^{\gamma+2} S(w) = C|w|^{\gamma+2} \left(I_d - \frac{w \otimes w}{|w|^2} \right).$$

Dans cette expression, C est une constante positive et γ est un paramètre selon lequel le potentiel est dit "dur" ($\gamma > 0$), maxwellien ($\gamma = 0$), ou "mou" ($\gamma < 0$). Ce dernier cas inclus le cas coulombien ($\gamma = -3$) qui est le plus intéressant physiquement. La matrice $S(w)$ est la projection orthogonale sur le plan orthogonal à w . Pour tout $w \neq 0$, $\Phi(w)$ est une matrice positive dont le noyau est $\text{Ker } \Phi(w) = \mathbb{R}w$. Il est aussi utile d'écrire l'opérateur de collision $Q(f)$ sous la forme équivalente suivante (dite forme "Log")

$$Q(f)(v) = \nabla \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) f(v) f(v_*) (\nabla \log f(v) - \nabla \log f(v_*)) dv_*. \quad (1.2)$$

Cette formulation permet de montrer facilement les propriétés de conservation et d'entropie : quelle que soit g positive on a

$$\int_{\mathbb{R}^d} (1, v, \frac{1}{2}|v|^2) Q(g) dv = 0 \quad \text{et} \quad \int_{\mathbb{R}^d} Q(g) \log(g) dv \leq 0.$$

L'inégalité précédente implique que pour la solution f de (1.1), l'entropie $H(f) = \int f \log f dv$ est une fonction décroissante du temps alors que les quantités $\int (1, v, \frac{1}{2}|v|^2) f dv$ sont constantes. En outre cette inégalité devient une égalité si et seulement si f est une maxwellienne

$$f_{eq}(v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{\frac{d}{2}}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2T}\right), \quad (1.3)$$

où ρ, u et T sont des paramètres indépendants de la vitesse. Ceci est formellement équivalent au fait que f est un état d'équilibre, c.-à-d. $Q(f) = 0$.

On peut remarquer que l'équation (1.1) est une équation de convection-diffusion qui peut s'écrire sous la forme

$$\partial_t f = \nabla \cdot (D(f) \nabla f + F(f) f), \quad (1.4)$$

où $D(f) = \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) f(v_*) dv_*$ et $F(f) = \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) \nabla f(v_*) dv_*$. Il est donc prévisible qu'une discrétisation explicite en temps de cette équation (comme celle d'Euler explicite) sera soumise à une contrainte de stabilité sur la pas de temps du type $\Delta t = O(\Delta v^2)$, où Δv est le pas de discrétisation de la variable de vitesse. Ceci devient évidemment prohibitif en terme de coût de calcul quand Δv devient petit. La solution usuelle pour ce type de problème

est donc d'utiliser un schéma implicite en temps, ce qui permet généralement d'obtenir une stabilité qui ne dépend pas de Δv .

Cependant, obtenir un schéma implicite performant nécessite de satisfaire des contraintes fortes. Par exemple, il est important que la méthode numérique choisie préserve les propriétés de conservation et d'entropie. Ou encore, il est nécessaire d'utiliser des algorithmes rapides de résolution de système linéaires pour que la méthode implicite soit véritablement plus rapide qu'une simple méthode explicite.

Pour illustrer la difficulté de cette approche, citons par exemple le travail remarquable de Chacón, Barnes, Knoll et Miley [CBKM00] qui utilisent la forme de diffusion (1.4) et calculent les coefficients D et F par la méthode de Rosenbluth : dans le cas coulombien, les intégrales s'écrivent comme des intégrales de Poisson qui peuvent être calculées efficacement par un solveur de Poisson rapide. C'est donc une méthode rapide, mais la forme de l'équation FPL utilisée ne permet pas de préserver les propriétés de conservation et d'entropie, ce qui nécessite une discrétisation en vitesse suffisamment fine pour éviter une trop grande erreur numérique.

Dans ce travail, nous avons donc proposé d'utiliser la forme de Landau (1.1) ou la forme "Log" (1.2) afin d'obtenir des schémas implicites qui respectent naturellement des propriétés de conservation, et éventuellement la propriété d'entropie (ce qui est beaucoup plus délicat à obtenir). Pour la rapidité des calculs, la plupart de nos schémas ont en outre la propriété d'être linéaires. Nous décrivons brièvement ci-dessous les schémas obtenus et leurs propriétés (pour les détails, nous renvoyons à [2]). Classiquement, nous notons f^n une approximation de la distribution f au temps $t_n = n\Delta t$, où Δt est un pas de temps donné.

Une première classe de schémas est obtenue en utilisant des formes linéarisées de l'opérateur Q écrit sous forme de Landau. Plus précisément, les produits bilinéaires sont approchés de façon à ce qu'un seul des termes du produit soit évalué au temps t_{n+1} . Cette linéarisation est effectuée en respectant les symétries qui induisent les propriétés de conservation. Nous obtenons les schémas suivants.

schéma contracté :

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = q^c(f^n, f^{n+1}), \quad \text{avec} \quad (1.5)$$

$$q^c(f, g) = \nabla \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) (f_* \nabla g - f \nabla g_*) dv_*, \quad (1.6)$$

où l'on note pour simplifier $f_* = f(v_*)$ et $f = f(v)$. Ce schéma est d'ordre un en temps et conservatif.

θ -schéma :

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = Q(f^n) + \theta q(f^n, f^{n+1} - f^n), \quad (1.7)$$

où $\theta \in \mathbb{R}$, et $q(f, \cdot)$ est le linéarisé de Q autour de f donné par la formule

$$\begin{aligned} q(f, g) &= \nabla \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) (f_* \nabla g - f \nabla g_* + g_* \nabla f - g \nabla f_*) dv_* \\ &= q^c(f, g) + q^c(g, f). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Ce schéma est d'ordre deux en temps si $\theta = \frac{1}{2}$ et d'ordre un sinon. Il est conservatif.

Pour ces deux schémas, nous ne pouvons prouver la propriété d'entropie. Nous proposons alors une deuxième famille de schémas, basés sur la forme "Log" (1.2). Un premier schéma, non linéaire, est le suivant

schéma log :

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = q^{\log}(f^n, f^{n+1}) = \nabla \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) f^n f_*^n (\nabla \log f^{n+1} - \nabla \log f_*^{n+1}) dv_*. \quad (1.9)$$

Ce schéma est d'ordre un en temps, conservatif, et d'entropie décroissante. Pour obtenir un schéma linéaire, nous linéarisons le logarithme dans q^{\log} , ce qui donne le schéma suivant

schéma log linéaire :

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = Q(f^n) + q^l(f^n, f^{n+1} - f^n), \quad \text{avec} \quad (1.10)$$

$$q^l(f, g) = \nabla \cdot \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) f f_* \left(\nabla \left(\frac{g}{f} \right) - \nabla \left(\frac{g}{f} \right)_* \right) dv_*. \quad (1.11)$$

Ce schéma est d'ordre un en temps et conservatif. Il possède des propriétés très fortes, dont la décroissance d'entropie et une propriété de symétrie. Plus précisément, nous avons la proposition suivante

Proposition 1.1. (i) *Forme faible de q^l :*

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^d} q^l(f, g) \phi dv \\ &= -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \Phi(v - v_*) f f_* \left(\nabla \left(\frac{g}{f} \right) - \nabla \left(\frac{g}{f} \right)_* \right) \cdot (\nabla \phi - \nabla \phi_*) dv dv_*. \end{aligned} \quad (1.12)$$

(ii) *La partie collisionnelle du schéma (1.10) dissipe une entropie, au sens suivant :*

$$\int_{\mathbb{R}^d} (Q(f) + q^l(f, g)) \left(\log f + \frac{g}{f} \right) dv \leq 0.$$

(iii) *Théorème-H discret : la suite d'entropies $H_n = \int_{\mathbb{R}^d} f^n \log f^n dv$ est décroissante si*

$$\inf_{n \in \mathbb{N}, v \in \mathbb{R}^d} \left(\frac{f^{n+1}}{f^n} \right) \geq \frac{1}{2}. \quad (1.13)$$

(iv) *Pour tout f positif, l'opérateur linéaire $g \mapsto q^l(f, g)$ est auto-adjoint négatif au sens suivant :*

$$\langle q^l(f, g), h \rangle_{\frac{1}{f}} := \int_{\mathbb{R}^d} q^l(f, g) h \frac{dv}{f} = \langle q^l(f, h), g \rangle_{\frac{1}{f}}, \quad \text{et} \quad \langle q^l(f, g), g \rangle_{\frac{1}{f}} \leq 0,$$

pour tout g et h .

Cette proposition se démontre par des arguments classiques : intégration par parties, symétrie entre v et v_* , convexité.

Notons que la dernière propriété (iv) est très importante du point de vue algorithmique, puisqu'elle permet de calculer f^{n+1} en utilisant la méthode du *gradient conjugué*, pourvu que le poids f^n intervenant dans la définition du produit scalaire soit bien positif. Cette propriété est remarquable puisque l'équation FPL comporte des termes de convection qui en général ne permettent pas d'obtenir des systèmes linéaires symétriques. Par exemple, la méthode de [CBKM00] n'a pas cette propriété de symétrie et ne peut utiliser le gradient conjugué.

Cependant, il n'est a priori pas possible d'assurer que le poids f^n reste positif. Ainsi, les deux premières familles de schémas ne sont pas complètement satisfaisantes du point de vue algorithmique. Par conséquent, nous introduisons une troisième famille de schémas basée sur l'utilisation de l'équilibre maxwellien f_{eq} : le premier argument de q et de q^l dans (1.7) et (1.10) est remplacé par f_{eq} . Comme ces termes sont d'ordre Δt , cette modification n'affecte pas la consistance. En revanche, elle permet d'obtenir des opérateurs auto-adjoints pour le poids $1/f_{eq}$, qui lui est toujours positif. Cette propriété est connue pour l'opérateur $q(f_{eq}, \cdot)$ qui n'est autre que le linéarisé de l'opérateur de Landau autour de l'équilibre. Pour l'opérateur $q^l(f_{eq}, \cdot)$, la propriété a déjà été donnée dans un cas plus général dans la proposition 1.1. En outre, les propriétés de conservation sont naturellement préservées. Les schémas obtenus sont les suivants.

θ -schéma équilibre :

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = Q(f^n) + \theta q(f_{eq}, f^{n+1} - f^n). \quad (1.14)$$

schéma log-linéaire équilibre :

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = Q(f^n) + q^l(f_{eq}, f^{n+1} - f^n). \quad (1.15)$$

A présent, nous expliquons brièvement le problème posé par la résolution des systèmes linéaires contenus dans ces schémas.

1.2 Solveurs linéaires

Dans cette section, nous considérons que la variable de vitesse a été discrétisée (avec N points), de façon à ce que l'opérateur de collision discret possède aussi les propriétés de conservation et d'entropie. Les schémas précédents sont donc applicables sans modification à cette version discrète de l'équation FPL, et possèdent les mêmes propriétés que leurs versions continues. Les schémas (1.5), (1.7), (1.10), (1.14), et (1.15) se présentent donc comme des systèmes linéaires dont l'inconnue est le vecteur f^{n+1} . Moyennant quelques manipulations algébriques, tous ces schémas peuvent s'écrire sous la forme incrémentale suivante

$$(I - \Delta t L) \delta f^n = \Delta t Q(f^n), \quad (1.16)$$

où $\delta f^n = f^{n+1} - f^n$ et L est l'opérateur linéaire utilisé dans le schéma ($L = q^c(f^n, \cdot), \theta q(f^n, \cdot), q^l(f^n, \cdot), q(f_{eq}, \cdot)$ ou $q^l(f_{eq}, \cdot)$).

La résolution d'un tel système présente deux difficultés : l'une, classique, est que l'algorithme choisi doit être suffisamment rapide. En particulier, la matrice L étant généralement pleine, l'utilisation d'une méthode directe de type Gauss est exclue. Il est donc raisonnable d'utiliser un solveur itératif, qui pourra en outre tirer partie des méthodes rapides d'évaluation de l'opérateur de collision : de telles méthodes permettent en effet de calculer les produits matrice-vecteur aussi rapidement que si L était une matrice creuse. L'autre difficulté concerne les propriétés de conservation : la solution du système linéaire n'étant jamais obtenue exactement avec un solveur itératif, peut-on tout de même préserver les propriétés de conservation ? Nous avons donc montré dans [2] que les méthodes de Krylov (dont le gradient conjugué) satisfont toutes ces conditions. Cette propriété repose sur des arguments très simples que nous donnons ci-dessous.

Tout d'abord, notons que les propriétés de conservation peuvent s'écrire simplement en utilisant le formalisme matriciel suivant : notons M la matrice qui à un vecteur $f \in \mathbb{R}^N$ (qui approche la fonction de distribution) associe ses moments $Mf \in \mathbb{R}^{d+2}$. Par exemple, on peut poser $Mf = \sum_{i=1}^N (1, v_i, \frac{1}{2}|v_i|^2)^T f_i \Delta v^d$ pour une grille de vitesse régulière. Les propriétés de conservation de Q et des opérateurs linéaires définis précédemment s'écrivent alors dans le cadre discret

$$MQ(f) = 0 \quad \text{et} \quad ML = 0, \quad \forall f \in \mathbb{R}^N.$$

Ainsi le système linéaire (1.16) est donc du type

$$Ax = b, \tag{1.17}$$

où la matrice A vérifie la propriété $MA = M$ et le second membre b vérifie $Mb = 0$, ce qui permet de retrouver le fait que $Mx = 0$, c.-à-d. que les moments de f^{n+1} sont ceux de f^n .

A présent, considérons un solveur itératif de Krylov pour le système (1.17) : on peut toujours l'écrire sous la forme suivante (voir [Saa03])

Algorithme 1.1. 1. soit $x^{(0)}$ (tel que $Mx^{(0)} = 0$) et $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$;
2. pour $k = 1$ à K , trouver $x^{(k)}$ dans le sous-espace affine $x^{(0)} + \mathcal{K}_k$, où

$$\mathcal{K}_k = \{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \dots, A^{k-1}r^{(0)}\}.$$

L'idée est alors que si la donnée initiale est bien choisie, c.-à-d. telle que $Mx^{(0)} = 0$ (typiquement on prendra $x^{(0)} = 0$, c.-à-d. que le solveur linéaire sera initialisé avec f^n), alors le sous-espace affine tout entier hérite de cette propriété, et donc tout itéré $x^{(k)}$ satisfait $Mx^{(k)} = 0$. Plus précisément, on a la proposition suivante.

Proposition 1.2. *Toutes les méthodes itératives qui peuvent être mise sous la forme de l'algorithme 1.1 sont conservatives. Ceci signifie que $Mx^{(k)} = 0$ pour tout k .*

Démonstration. En utilisant les propriétés de conservation sur $x^{(0)}$, b et A , nous obtenons

$$Mr^{(0)} = M(b - Ax^{(0)}) = 0 - Mx^{(0)} = 0,$$

et par conséquent $MA^p r^{(0)} = MAA^{p-1}r^{(0)} = MA^{p-1}r^{(0)} = \dots = Mr^{(0)} = 0$ pour tout $p \geq 1$. Ainsi, nous avons $M\mathcal{K}_k = \{0\}$, et nécessairement $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k$ implique $Mx^{(k)} = 0$. \square

Nous signalons néanmoins qu'il semble beaucoup plus difficile d'obtenir une propriété analogue pour la dissipation d'entropie. Cette question reste pour le moment ouverte.

1.3 Application à l'équation de Landau isotrope

Les méthodes présentées aux sections précédentes peuvent être utilisées efficacement dès lors que l'on dispose d'une discrétisation de la variable de vitesse pour laquelle l'opérateur de collision discret associé est conservatif et entropique, et peut être évalué rapidement. Dans cette section, nous nous restreignons au cas de l'équation FPL isotrope. Dans ce modèle, f ne dépend que de l'énergie cinétique $\varepsilon = |v|^2$. Dans [2] et [3], nous avons utilisé une discrétisation de type différences finies proposée par Berezin, Khudic et Pekker [BKP87] (et aussi utilisée par Buet et Cordier [BC02]), ainsi qu'une discrétisation spectrale par multi-ondelettes proposée par Antoine et Lemou [AL03]. Pour ces deux discrétisations, la complexité de l'évaluation de $Q(f)$ est en $O(N)$, où N est le nombre de points de discrétisation en énergie.

Nous donnons ici deux résultats significatifs dans le cas d'un potentiel d'interaction coulombien. Sur la figure 1.1, nous comparons l'évolution de l'entropie obtenue avec un schéma d'Euler explicite à celle obtenue avec le schéma contracté (1.5). Le pas de temps utilisé pour le schéma implicite est 50 fois plus grand le pas de temps du schéma explicite, et on observe que la dynamique est correctement décrite par ce dernier schéma. Dans la figure 1.2, nous comparons le temps CPU utilisé par ces deux schémas en fonction du nombre de points de discrétisation N . Conformément à notre analyse, le temps CPU du schéma explicite est en $O(N^3)$, alors que celui du schéma implicite est en $O(N^2)$.

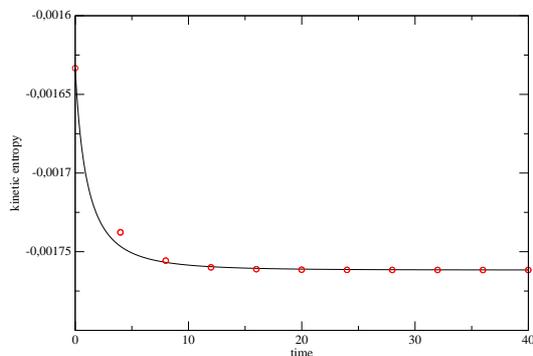


FIG. 1.1 – Evolution de l'entropie pour deux schémas explicite (-) et implicite (o).

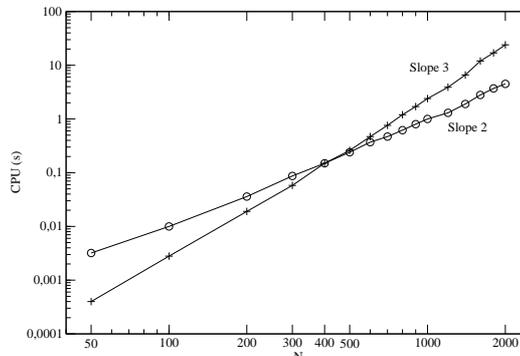


FIG. 1.2 – Temps CPU pour des schémas explicites (+) et implicites (o) en fonction de N .

1.4 Perspectives

Pour l'application des méthodes précédentes à l'équation de Landau tri-dimensionnelle, nous travaillons actuellement dans les trois directions suivantes.

Préconditionnement.

Il est fondamental d'inclure un préconditionneur efficace dans nos solveurs linéaires. En effet, en trois dimensions (3D) avec N points de discrétisation, le coût d'une simulation sur un temps donné est de l'ordre de KN pour un schéma implicite, où K est le nombre d'itérations du solveur linéaire, alors qu'il est de l'ordre de $N^{5/3}$ pour un schéma explicite. Il faut donc que K soit bien inférieur à N pour obtenir un schéma performant. Si l'on n'utilise pas de préconditionneur, K peut être de l'ordre de N , ce qui rend le schéma implicite correspondant moins rapide qu'un simple schéma explicite. En revanche, un préconditionneur efficace peut rendre K à peu près indépendant de N . La difficulté dans la mise au point d'un tel préconditionneur est qu'en plus des contraintes habituelles, celui-ci doit aussi satisfaire les propriétés de conservation afin de préserver celles du solveur linéaire. Notre idée est donc de construire des préconditionneurs ad hoc basés sur l'opérateur de Landau lui-même, plutôt que d'utiliser des préconditionneurs algébriques standards (du type LU incomplet) qui n'ont eux aucune raison de respecter les propriétés de conservation. Dans le cas isotrope, nous avons testé un préconditionneur donné par l'opérateur de Landau avec potentiel maxwellien. Il possède toutes les propriétés requises, puisqu'il est connu que le potentiel maxwellien rend l'opérateur linéaire et local, donc facile à inverser, et conservatif. Ainsi, il permet de diminuer fortement le nombre d'itérations du solveur linéaire. En revanche, cet opérateur n'est pas autoadjoint ; il ne peut donc être employé dans l'algorithme du gradient conjugué.

Discrétisation en vitesse.

Le problème de la discrétisation en vitesse de l'opérateur de Landau est beaucoup plus délicat en 3D qu'en 1D. En particulier, pour une approximation par différences finies, il semble que seule une discrétisation de la forme "Log" donne des schémas stables (voir [BC99]), ce qui permet certes d'utiliser le schéma log-linéaire (ou sa version équilibre), mais pas les schémas du type contracté ou θ -schéma. En plus d'être stable, l'approximation de l'opérateur de Landau en 3D doit pouvoir être évaluée rapidement. Nous utilisons actuellement la méthode multipôle adaptée à l'équation FPL par Lemou [Lem98] : par cette méthode, la complexité d'une évaluation de $Q(f)$ est en $N \log N$ au lieu de N^2 pour une évaluation directe. Par la suite, il serait intéressant de tester la méthode spectrale de Pareschi, Russo et Toscani [PRT00], et nous envisageons aussi une extension de la méthode multi-ondelettes de Antoine et Lemou [AL03].

Schéma implicite non-linéaire.

Enfin, nous mentionnons le fait que le seul schéma implicite linéaire que nous ayons pour l'instant testé en 3D (le log-linéaire) ne se révèle pas très efficace : sa stabilité ne semble assurée qu'à condition que le pas de temps soit relativement petit, ce qui en fait une méthode peu compétitive. Actuellement, en utilisant les idées conçues dans ce travail, nous étudions un schéma complètement non linéaire utilisant la forme "Log", en incluant une méthode de Newton dont la matrice jacobienne est auto-adjointe, et donc inversible par gradient conjugué. Ce schéma semble plus robuste que les schémas précédents.

Chapitre 2

Méthodes de couplage cinétique-fluide

La simulation de systèmes de particules est un exemple typique de problème multi-échelles. En effet, une description fine de tels systèmes est donnée par la théorie cinétique, mais il est plus simple et souvent suffisamment précis d'utiliser des modèles macroscopiques quand le système est proche d'un état d'équilibre. Un indicateur grossier de la validité de l'approximation macroscopique est souvent appelé nombre de Knudsen, qui peut être défini par le rapport du libre parcours moyen des particules à une longueur macroscopique caractéristique.

Jusqu'à une période récente, les approximations macroscopiques (que nous appelons "fluides" dans ce chapitre) étaient utilisées au delà de leur domaine de validité, car les simulations microscopiques étaient trop coûteuses. A présent, les super calculateurs modernes sont capables de traiter beaucoup de ces problèmes au niveau cinétique, mais il existe encore des problèmes très difficiles comme ceux contenant plusieurs échelles différentes. Par exemple, nous mentionnons la simulation de problèmes de rentrée atmosphérique en aérodynamique, où les particules sont proches de l'équilibre loin du corps de rentrée, tandis que les effets de déséquilibre sont très importants dans le voisinage du corps. En transfert radiatif, on a la même difficulté quand le matériau se compose de plusieurs parties avec des opacités très différentes. La difficulté est que l'effort de calcul croît généralement comme l'inverse du nombre de Knudsen. Ainsi, une grande partie du temps de calcul est due à une partie du système (proche de l'équilibre) qui pourrait être décrite plus efficacement par un modèle macroscopique plus simple.

Par conséquent, il semble très naturel d'essayer de résoudre chaque modèle là où la description correspondante est appropriée, le principal problème étant de raccorder correctement les deux descriptions aux interfaces entre les différents domaines. Ceci est particulièrement intéressant lorsque les particules sont à l'équilibre dans la majeure partie du domaine de calcul. Cette idée a été largement explorée dans ces dernières années. Pour les problèmes liés aux modèles de diffusion (comme en neutronique ou en transfert radiatif), nous citons par exemple les travaux de Bal et Maday [BM02], Degond et Schmeiser [DS99], Golse, Jin et Levermore [GJL03], Klar [Kla98a], et Klar et Siedow [KS98]. Pour la dynamique des gaz raréfiés, citons les travaux de Bourgat, Le Tallec et Tidriri [BTT96], de Bourgat, Le Tallec, Malinger, et Qiu [Qiu93, TM97], de Neunzert, Struckmeier, et Klar [KNS00], et enfin de Schneider [Sch96]. Ces méthodes ont en commun d'utiliser une technique de décomposition de domaine où les modèles cinétiques et fluides sont utilisés dans différents sous-domaines.

Le couplage entre les deux descriptions est obtenu par des conditions aux limites d'interface entre les sous-domaines.

Très récemment, une approche différente a été proposée par Degond et Jin [DJ05] pour raccorder les descriptions cinétiques et de diffusion. Leur approche est toujours du type décomposition de domaine, mais le couplage est effectué par les équations plutôt que par des conditions aux limites d'interface.

Dans ce chapitre, nous présentons quelques travaux basés sur cette nouvelle approche. Dans la section 2.1, nous décrivons une méthode qui étend celle de [DJ05] aux problèmes non-linéaires, pour une échelle hydrodynamique (appelée aussi hyperbolique). Nous mettons en évidence une propriété d'homogénéité que doivent satisfaire les distributions d'équilibre local pour que la méthode soit précise. Dans la section 2.2, nous étendons ensuite cette approche à un couplage dynamique (c.-à-d. dans lequel les domaines cinétiques et fluides peuvent évoluer dans le temps). Dans la section 2.3, nous modifions profondément cette méthode en utilisant une décomposition de la fonction de distribution en une partie macroscopique et une partie microscopique (décomposition dite "micro-macro") : cela nous permet d'obtenir une méthode beaucoup plus souple, plus proche des approches du type multi-échelles que des approches par décomposition de domaine.

2.1 Couplage cinétique/fluide par décomposition de domaine sans condition aux limites d'interface [4]

Nous présentons ici le travail réalisé en collaboration avec P. Degond et S. Jin et publié au *Journal of Computational Physics* en 2005 [4].

Soit $f(t, x, v)$ la densité de particules qui au temps t ont la position $x \in \Omega$ et la vitesse $v \in \mathbb{R}^N$ ou tout autre ensemble borné ou discret de \mathbb{R}^N . L'équation d'évolution de f est

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f), \quad (2.1)$$

avec la donnée initiale $f(0, x, v) = f_0(x, v)$. Le membre de gauche de (2.1) décrit le mouvement des particules de vitesse v , alors que l'opérateur Q modélise les collisions entre particules. Le paramètre ε est le rapport entre deux échelles microscopiques et macroscopiques.

Dans tout ce qui suit, nous notons l'intégrale de toute fonction vectorielle ou scalaire $f = f(v)$ sur l'ensemble des vitesses par $\langle f \rangle = \int f(v) dv$. L'opérateur de collision Q est supposé satisfaire la propriété de conservation

$$\langle mQ(f) \rangle = 0 \quad \text{pour tout } f,$$

où $m(v) = (m_i(v))_{i=1}^d$ sont les quantités localement conservées. Par conséquent, en multipliant (2.1) par m et en intégrant par rapport à v , on trouve les lois de conservation locales

$$\partial_t \langle mf \rangle + \nabla_x \cdot \langle vmf \rangle = 0.$$

Finalement, nous supposons que les équilibres locaux de Q (i.e., les solutions de $Q(f) = 0$) sont les distributions d'équilibre $E[\rho]$, implicitement définies par leurs moments ρ par la relation $\rho = \langle mE[\rho] \rangle$. Nous ne précisons pas de conditions aux limites pour le moment.

Quand ε tend vers 0, (2.1) implique que f converge, formellement, vers $E[\rho]$, où $\rho(t, x)$ est solution du système

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot F(\rho) = 0, \quad (2.2)$$

avec la donnée initiale $\rho|_{t=0} = \langle m f_0(x, v) \rangle$. Le flux $F(\rho)$ est le flux cinétique à l'équilibre

$$F(\rho) = \langle v m E[\rho] \rangle. \quad (2.3)$$

Ce modèle asymptotique est souvent appelé modèle "fluide" ou macroscopique par analogie avec la théorie cinétique des gaz raréfiés dans laquelle l'asymptotique n'est autre que le système des équations d'Euler compressible de la mécanique des fluides.

De façon générale, dans la stratégie du couplage par décomposition de domaine, on suppose que le domaine Ω peut être décomposé en deux sous-domaines dont l'un contient des particules dans un état proche de l'équilibre, alors que l'autre contient des particules dans un état hors-équilibre. Cette hypothèse permet de modéliser le système par un modèle fluide du type (2.2) dans le premier sous-domaine, tandis que le modèle cinétique (2.1) sera plus adapté à la modélisation dans l'autre sous-domaine. Cette stratégie nécessite généralement de définir pour chacun des modèles des conditions aux limites spécifiques à l'interface entre les deux sous-domaines.

A présent, nous décrivons rapidement ci-dessous l'idée de Degond et Jin [DJ05], réécrite dans le cadre de l'échelle hydrodynamique, proposée pour se débarrasser des conditions aux limites d'interface. On introduit une zone "tampon" Ω_B autour de l'interface, de sorte que le domaine Ω est à présent décomposé en trois parties *disjointes* : $\Omega = \Omega_F \cup \Omega_B \cup \Omega_K$. Le domaine "fluide" (c.-à-d. où l'approximation fluide est correcte) est noté Ω_F et le domaine cinétique est noté Ω_K (voir figure 2.1). On introduit alors une fonction de transition h définie par

$$\begin{cases} h(x) = 1, & \text{pour } x \in \Omega_K, \\ h(x) = 0, & \text{pour } x \in \Omega_F, \\ 0 \leq h(x) \leq 1 & \text{pour } x \in \Omega_B. \end{cases} \quad (2.4)$$

Avec cette fonction, nous décomposons f en une partie "cinétique" $f_K = hf$ et une partie "fluide" $f_F = (1-h)f$. Il faut noter que f_K et f_F vérifient les propriétés suivantes : elles sont définies dans Ω tout entier et on a $f = f_K + f_F$, et enfin par construction de h , ces quantités sont toutes deux égales à f dans leurs domaines respectifs Ω_K et Ω_F (voir figure 2.2).

Il est alors aisé d'obtenir les deux équations d'évolution suivantes pour f_K et f_F :

$$\partial_t f_K + h v \cdot \nabla_x f_K + h v \cdot \nabla_x f_F = \frac{1}{\varepsilon} h Q(f_K + f_F), \quad (2.5)$$

$$\partial_t f_F + (1-h) v \cdot \nabla_x f_F + (1-h) v \cdot \nabla_x f_K = \frac{1}{\varepsilon} (1-h) Q(f_K + f_F), \quad (2.6)$$

avec les conditions initiales $f_K|_{t=0} = h f_0$ et $f_F|_{t=0} = (1-h) f_0$. Ce système est formellement équivalent à l'équation de départ (2.1).

On utilise ensuite l'hypothèse d'équilibre dans Ω_F et Ω_B pour décrire la partie fluide avec des paramètres macroscopiques. Cette hypothèse se traduit par $f_F = E[\rho_F]$ dans Ω_F et Ω_B ,

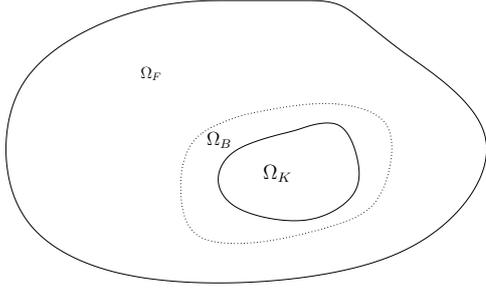


FIG. 2.1 – Découpage du domaine de calcul Ω en trois zones disjointes : fluide (Ω_F), cinétique (Ω_K), et tampon (Ω_B).

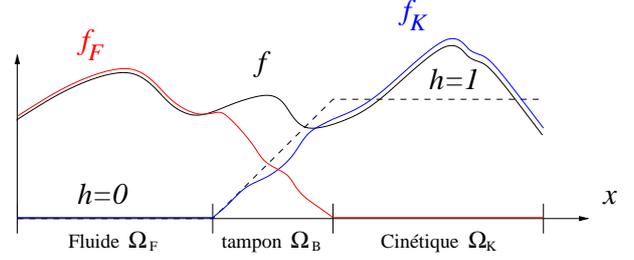


FIG. 2.2 – La fonction de distribution f , la fonction de transition h , et les parties cinétique et fluide f_K et f_F (vue 1D).

ce qui permet, en prenant les moments de (2.6), de transformer (2.5)–(2.6) en le système couplé

$$\partial_t f_K + hv \cdot \nabla_x f_K + hv \nabla_x \cdot E[\rho_F] = \frac{1}{\varepsilon} h Q(f_K + E[\rho_F]), \quad (2.7)$$

$$\partial_t \rho_F + (1-h) \nabla_x \cdot F(\rho_F) + (1-h) \nabla_x \cdot \langle mv f_K \rangle = 0, \quad (2.8)$$

avec les conditions initiales $f_K|_{t=0} = hf_0$ et $\rho_F|_{t=0} = (1-h)\rho_0 = \langle mf_0 \rangle$. Ce modèle se présente comme une équation cinétique et une équation fluide, couplées par des termes de convection et de collision. En raison de l'approximation fluide utilisée, le modèle n'est plus équivalent à l'équation cinétique de départ : il donne donc une approximation de f par $f_K + E[\rho_F]$. La justification, même formelle, du passage de (2.5)–(2.6) à (2.7)–(2.8) n'est pas encore très claire. Elle nécessiterait sans doute que ε dépende de x afin qu'il puisse être petit dans Ω_F et d'ordre 1 dans Ω_K (voir [6] pour une telle analyse sur un modèle légèrement différent).

À présent, nous expliquons les propriétés de ce modèle. Tout d'abord, la première propriété importante est que la partie cinétique f_K reste nulle dans le domaine fluide Ω_F , alors que la partie fluide ρ_F reste nulle dans le domaine cinétique Ω_K . En effet, d'après la définition de h , (2.7) implique $\partial_t f_K = 0$ dans Ω_F , et (2.8) implique $\partial_t \rho_F = 0$ dans Ω_K . Les données initiales de (2.7) et (2.8) impliquent alors le résultat annoncé. Ainsi, dans le domaine cinétique Ω_K , le modèle (2.7)–(2.8) dégénère en l'équation

$$\partial_t f_K + v \cdot \nabla_x f_K = \frac{1}{\varepsilon} Q(f_K), \quad (2.9)$$

qui n'est autre que l'équation cinétique de départ (2.1). Dans le domaine fluide Ω_F , le modèle dégénère en

$$\partial_t \rho_F + \nabla_x \cdot F(\rho_F) = 0, \quad (2.10)$$

qui n'est autre que l'approximation fluide (2.2). Ce n'est que dans la zone tampon Ω_B que le couplage (2.7)–(2.8) est réellement effectif. Ce modèle permet donc bien une transition du modèle cinétique vers le modèle fluide d'un domaine à l'autre, sans conditions aux limites d'interface.

L'avantage de cette approche, comparée à une approche classique de type couplage par conditions d'interface est essentiellement le suivant. Quand l'interface est complexe, le couplage par conditions aux limites nécessite généralement une implémentation de conditions de

flux à l'interface qui peut-être assez compliquée, alors que notre méthode, basée sur l'introduction d'une fonction de transition h , transfère la géométrie de l'interface dans les équations. C'est un avantage, puisqu'il est alors possible de résoudre l'équation dans une géométrie régulière tout en ignorant totalement la géométrie réelle de l'interface. Cette géométrie est prise en compte uniquement lors de la construction de la fonction h . Ensuite, en pratique, dans le code de calcul, il suffit de tester la valeur de h pour savoir si on résout (2.9), (2.10), ou (2.7)–(2.8). Cette approche permet aussi de faire évoluer dans le temps les domaines cinétiques et fluides comme nous le verrons à la section 2.2.

Enfin, une dernière propriété importante est que ce modèle est aussi capable de décrire correctement le système si l'équilibre est atteint dans Ω tout entier : en effet si ε tend vers 0 dans (2.7)–(2.8), on montre facilement que la somme des moments $\langle mf_K \rangle + \rho_F$ satisfait à la limite l'équation fluide (2.2).

Dans [4], nous avons cependant remarqué que cette approche possède un important défaut : les solutions constantes ne sont préservées que pour certains modèle cinétiques particuliers. Pour d'autres modèles, des oscillations peuvent être générées. Plus précisément, nous avons la proposition suivante :

Proposition 2.1. *Supposons que l'application $\rho \mapsto E[\rho]$ est homogène de degré 1, c.-à.-d.*

$$E[\lambda\rho] = \lambda E[\rho] \quad (2.11)$$

pour tout $\lambda \geq 0$ et tout ρ dans le domaine de définition de E . Si la donnée initiale f^0 est un équilibre constant $E[\rho]$, alors $f_K = hE[\rho]$ et $\rho_F = (1 - h)\rho$ sont solutions du modèle couplé (2.7)–(2.8), et $f_K + E[\rho_L] = E[\rho]$.

Cette propriété est heureusement satisfaite par les opérateurs de collision basés sur la statistique de Maxwell-Boltzmann. Mais ce n'est pas le cas pour la statistique de Fermi-Dirac, ou encore plus simplement pour le modèle jouet suivant

$$\partial_t u + \partial_x u = \frac{1}{\varepsilon}(M_1[\rho] - u), \quad \partial_t v - \partial_x v = \frac{1}{\varepsilon}(M_2[\rho] - v), \quad (2.12)$$

où l'équilibre est $(M_1[\rho], M_2[\rho]) = \frac{1}{2}(\rho + f(\rho), \rho - f(\rho))$, avec $f(\rho) = \frac{1}{2}\rho^2$ et $\rho = u + v$. Ce modèle a la même forme que (2.1) avec les vitesses discrètes $v = \pm 1$ et l'invariant collisionnel $m(v) = 1$. On peut montrer qu'il converge vers l'équation de Burgers $\partial_t \rho + \partial_x f(\rho) = 0$ quand $\varepsilon \rightarrow 0$. Il est clair que l'équilibre n'est pas une fonction homogène de ρ . Dans ce cas, des calculs simples montrent que les conclusions de la proposition 2.1 sont fausses. Par conséquent, le modèle couplé obtenu à partir de ce système ne peut pas décrire correctement la solution là où elle est constante. Ceci sera illustré à la fin de cette section.

Du point de vue numérique, nous avons proposé une discrétisation simple de (2.7)–(2.8) obtenue de la façon suivante : nous discrétisons l'équation cinétique (2.1) avec un schéma standard du type volumes-finis, explicite en temps, avec décentrement, puis nous effectuons sur ce schéma les mêmes opérations que celles présentées ci-dessus en continu (séparation en f_K et f_F , puis approximation fluide dans $\Omega_F \cup \Omega_B$). Pour simplifier, nous écrivons ci-dessous

le schéma obtenu dans le cas de la dimension un en espace :

$$\begin{aligned} \frac{f_{K,i}^{n+1} - f_{K,i}^n}{\Delta t} + h_i \frac{\phi_{i+\frac{1}{2}}(f_K^n) - \phi_{i-\frac{1}{2}}(f_K^n)}{\Delta x} + h_i \frac{\phi_{i+\frac{1}{2}}(E[\rho_F^n]) - \phi_{i-\frac{1}{2}}(E[\rho_F^n])}{\Delta x} \\ = h_i Q(f_{K,i}^n + E[\rho_{F,i}^n]), \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\frac{\rho_{F,i}^{n+1} - \rho_{F,i}^n}{\Delta t} + (1 - h_i) \frac{F_{i+\frac{1}{2}}(\rho_F^n) - F_{i-\frac{1}{2}}(\rho_F^n)}{\Delta x} + (1 - h_i) \frac{\langle m (\phi_{i+\frac{1}{2}}(f_K^n) - \phi_{i-\frac{1}{2}}(f_K^n)) \rangle}{\Delta x} = 0, \quad (2.14)$$

où le flux numérique cinétique est défini par $\phi_{i+\frac{1}{2}}(g) = v^- g_{i+1} + v^+ g_i$, et le flux numérique d'équilibre est $F_{i+\frac{1}{2}}(\rho_F) = \langle m \phi_{i+\frac{1}{2}}(E[\rho_F]) \rangle$, qui est une approximation consistante de $F(\rho_F)$ (du type "kinetic flux splitting", voir [MD94]).

Nous mentionnons enfin une propriété intéressante de notre méthode : lorsque la zone tampon se réduit à une interface, nous avons pu prouver simplement que notre schéma peut s'écrire comme une méthode de couplage par demi-flux comme ceux de [Qiu93, TM97] (voir [4]).

Avant de conclure cette section, nous montrons deux comparaisons entre une simulation cinétique complète et un résultat obtenu avec notre méthode de couplage. Dans la figure 2.3, nous traçons les résultats obtenus pour deux données initiales différentes : l'une constante (à gauche), et l'autre discontinue (à droite). Dans les deux cas, le test est effectué pour le modèle jouet (2.12) : on peut voir clairement au niveau de la zone tampon le saut artificiellement généré par la non préservation des écoulements constants. Dans la figure 2.4, nous traçons les résultats obtenus avec le modèle BGK de la dynamique des gaz raréfiés, sur un test en deux dimensions. On observe la diffraction d'une onde de choc plane sur un cylindre : les résultats du modèle cinétique complet et du modèle couplé sont très proches. Noter que les frontières des domaines fluide et cinétique ne sont pas alignées sur le maillage (qui est curviligne) : la souplesse de notre méthode permet de traiter cette géométrie complexe de manière transparente.

Pour conclure, nous mentionnons tout de même deux défauts importants de notre méthode. Il faut noter que la propriété de préservation des écoulements constants nécessite, au niveau numérique, que les flux macroscopiques $F(\rho_F)$ et $\langle m v f_K \rangle$ dans (2.8) soient discrétisés de la même façon. C'est bien le cas avec la discrétisation détaillée précédemment, mais cela n'a aucune raison d'être vrai si on discrétise $F(\rho_F)$ avec un des schémas usuels de la mécanique des fluides numériques (Roe, Osher, etc.). On peut néanmoins tenter de négliger ces effets de non-préservation (qui sont de l'ordre du pas de discrétisation), mais on sera alors confronté à un autre problème, celui de la "cavitation" artificielle : par construction, la densité associée à ρ_F devient très petite au voisinage de Ω_K . Il est alors nécessaire d'utiliser un schéma robuste vis-à-vis de ce phénomène (ce qui est le cas de la discrétisation de type cinétique présentée précédemment, mais pas du schéma de Roe, par exemple). La méthode présentée dans [6] (voir section 2.3) apporte une solution à ces deux problèmes.

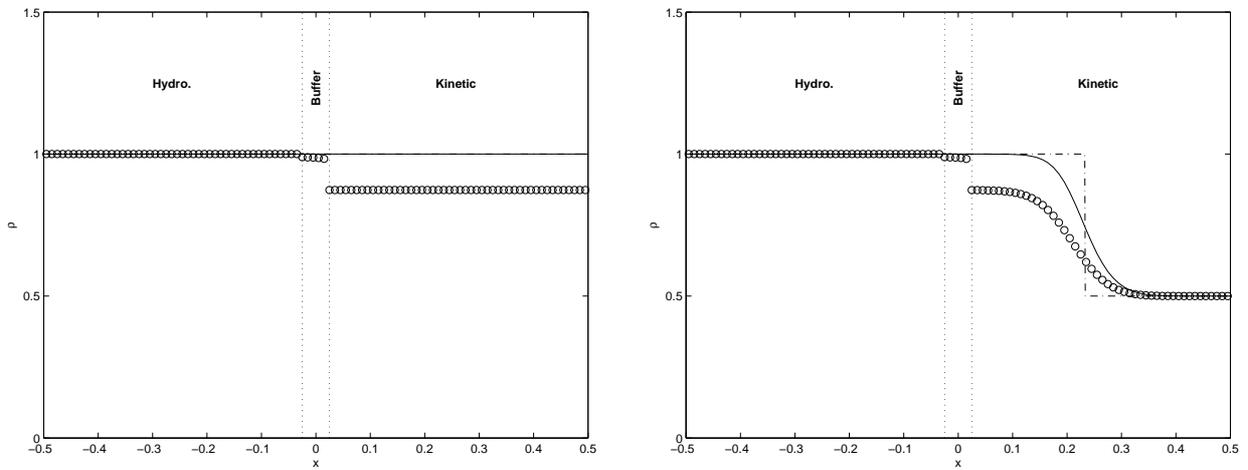


FIG. 2.3 – Comparaison entre le modèle cinétique (2.12) et le modèle couplé (2.7)–(2.8). Résultat stationnaire pour une donnée initiale constante (à gauche), résultat à $t = 0.3150$ pour une donnée initiale discontinue (à droite). Légende : cinétique (-), couplage (o), fluide (-.).

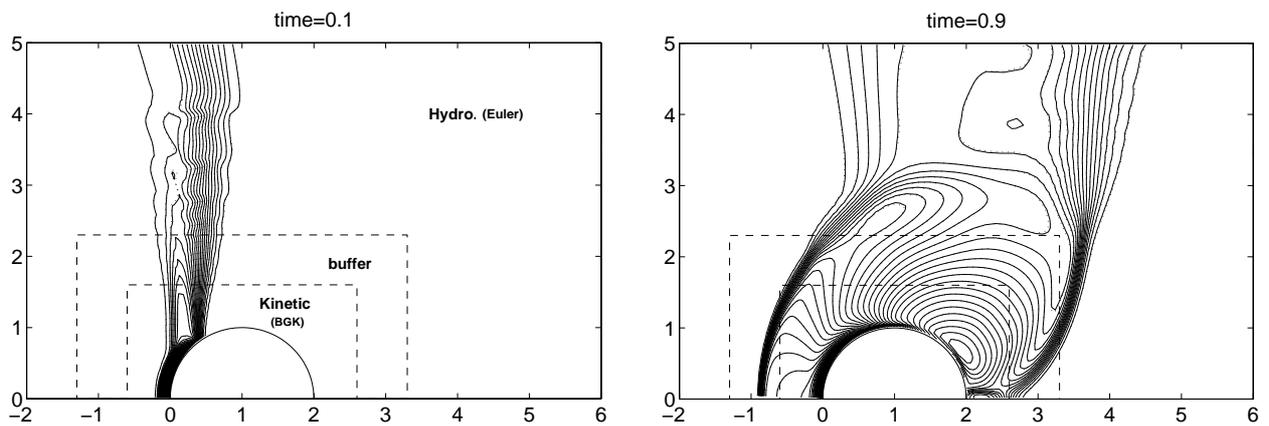


FIG. 2.4 – Diffraction d'un choc autour d'un cylindre dans un gaz raréfié, avec Knudsen=0.005 et Mach=2.81. Lignes isochores à $t = 0.1$ et $t = 0.9$ pour le modèle couplé (lignes continues) et le modèle BGK (pointillés).

2.2 Couplage cinétique/fluide avec interface mobile [5]

Nous résumons ici très succinctement le travail réalisé en collaboration avec P. Degond et G. Dimarco et accepté pour publication en 2007 au *Journal of Computational Physics* [5].

Nous avons déjà montré dans [4] qu'il est possible de faire évoluer les domaines Ω_K et Ω_F en utilisant une fonction de transition h qui dépend aussi du temps. En suivant la même approche que celle exposée section 2.1, on obtient alors le modèle couplé

$$\partial_t f_K + hv \cdot \nabla_x f_K + hv \nabla_x \cdot E[\rho_F] = \frac{1}{\varepsilon} h Q(f_K + E[\rho_F]) - (f_K + E[\rho_F]) \partial_t h, \quad (2.15)$$

$$\partial_t \rho_F + (1-h) \nabla_x \cdot F(\rho_F) + (1-h) \nabla_x \cdot \langle m v f_K \rangle = (\rho_F + \langle m f_K \rangle) \partial_t h, \quad (2.16)$$

où les seules différences par rapport au système (2.7)–(2.8) sont les termes en $\partial_t h$ apparaissant aux seconds membres. Ce modèle peut se discrétiser de la même façon que le modèle avec h stationnaire (voir (2.13)–(2.14)) en approchant les termes supplémentaires par $(f_{K,i}^n + E[\rho_{F,i}^n]) \frac{h_i^{n+1} - h_i^n}{\Delta t}$ et $(\rho_{F,i}^n + \langle m f_{K,i}^n \rangle) \frac{h_i^{n+1} - h_i^n}{\Delta t}$.

La difficulté essentielle est de définir la façon dont la fonction de transition h doit évoluer au cours du temps. Il existe quelques cas en transport des neutrons ou en transfert radiatif où l'évolution de l'interface est connue a priori. Mais dans d'autres comme en aérodynamique, cette évolution n'est pas connue. Dans [5], nous avons donc abordé ce dernier problème dans le cadre du couplage (Boltzmann-BGK)/Euler. Nous avons proposé de faire évoluer h en fonction de deux critères :

- un critère microscopique, basé sur le travail de Dimarco et Pareschi [DP], qui donne une certaine mesure β de l'écart d'une fonction de distribution à l'équilibre local : pour une fonction de distribution f et sa Maxwellienne associée $M[f]$, on calcule la plus grande valeur β telle que $\beta M[f]$ soit inférieure à f pour tout v . En raison de son coût, ce critère n'est utilisé que dans Ω_K ;
- un critère macroscopique plus classique du type “nombre de Knudsen local” qui compare une distance macroscopique basée sur une “longueur de gradient” et une distance microscopique comme le libre parcours moyen.

Une combinaison de ces deux critères permet alors de calculer une nouvelle valeur de h à chaque nouveau pas de temps.

Nous concluons cette section par deux résultats numériques tirés de [5]. Dans la figure 2.5, nous montrons l'évolution d'un choc 1D réfléchi par une paroi située en $x = 0$. Au départ, le domaine est divisé en une zone cinétique et une zone fluide. Quand le choc s'est suffisamment éloigné de la paroi, le gaz est suffisamment proche de l'équilibre en amont du choc et l'algorithme crée automatiquement une deuxième zone fluide. On peut ainsi voir les différentes zones se déplacer au cours du temps. Dans la figure 2.6, on peut voir le test classique de Sod calculé avec deux zones fluides et une zone cinétique. On observe que la zone cinétique suit le choc et la discontinuité de contact, mais ne suit pas la détente qui est donc décrite par le modèle fluide. Dans ces deux tests, nous n'observons pas de différence entre la simulation cinétique complète et notre couplage, alors que le modèle fluide complet montre des différences dans les zones cinétiques.

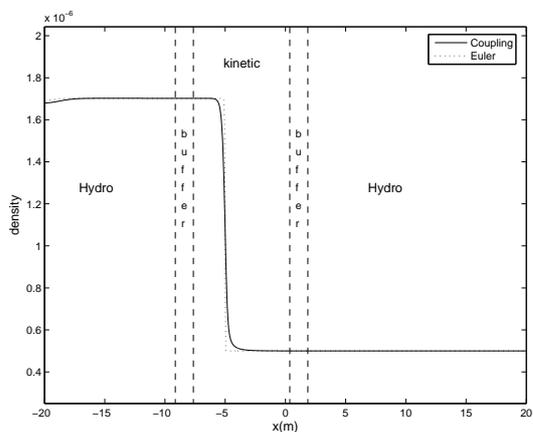
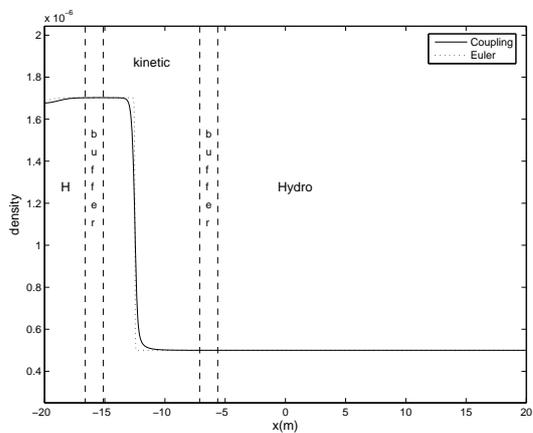
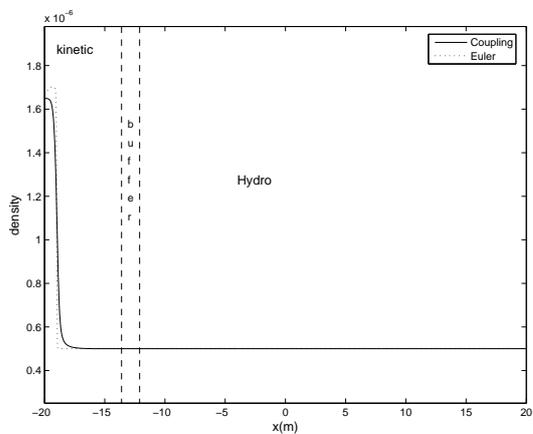


FIG. 2.5 – Choc réfléchi : densité à $t = 0.002$ (haut), $t = 0.02$ (milieu), $t = 0.04$ (bas). Comparaison couplage (-) et Euler (.).

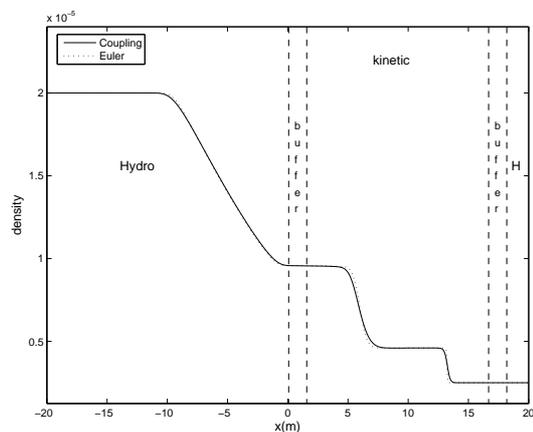
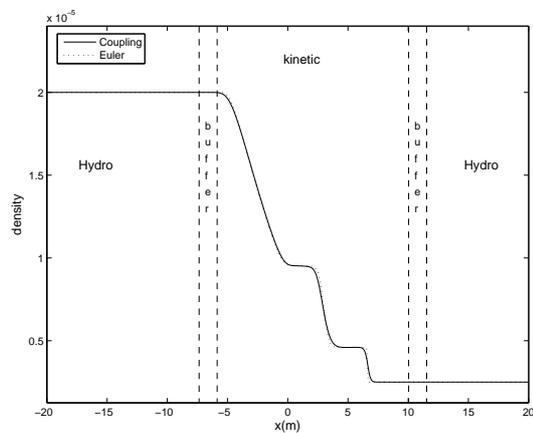
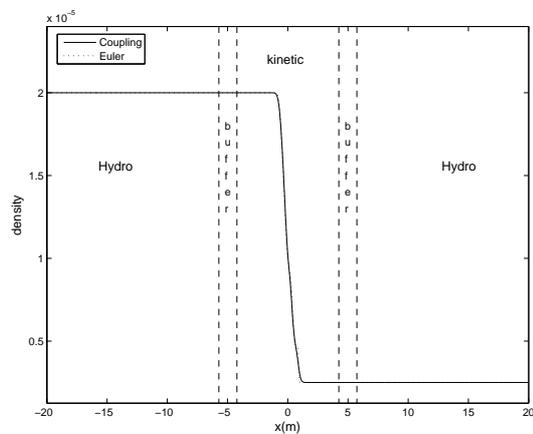


FIG. 2.6 – Test de Sod : densité à $t = 0.002$ (haut), $t = 0.015$ (milieu), $t = 0.03$ (bas). Comparaison couplage (-) et Euler (.).

2.3 Equation fluide avec raffinement local de modèle [6]

Nous résumons ici le travail effectué en collaboration avec P. Degond et J.-G. Liu et publié dans *SIAM Multiscale Modeling & Simulation* en 2006 [6].

Bien que cette nouvelle méthode ait au départ été conçue comme une légère modification de la méthode présentée section 2.1 (pour éliminer le défaut de non-préservation des écoulements uniformes), elle nous apparaît finalement comme une approche très différente. Le modèle que nous obtenons peut en effet s'interpréter comme un modèle fluide utilisé dans le domaine Ω tout entier, corrigé *localement* par des termes cinétiques dans les zones hors équilibres. Ces termes de raffinement du modèle fluide sont calculés en résolvant localement une équation cinétique qui contient des termes de couplage avec la représentation fluide. Pour cela, nous utilisons essentiellement deux idées :

- la décomposition micro-macro pour séparer f dans tout le domaine en une partie équilibre (que nous appelons aussi fluide, ou macroscopique) et une partie hors-équilibre (cinétique, ou microscopique) ;
- la fonction de transition h introduite section 2.1 pour localiser la partie hors-équilibre.

Nous détaillons brièvement ci-dessous la mise en oeuvre de ces deux idées. Cette méthode pouvant s'appliquer à la fois dans le cadre des échelles hydrodynamiques et des échelles de diffusion, nous considérons tout d'abord une équation cinétique quelconque, écrite sous forme non adimensionnée :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = Q(f), \quad (2.17)$$

avec la donnée initiale $f(0, x, v) = f_0(x, v)$. L'opérateur de collision possède les propriétés usuelles énoncées section 2.1. La décomposition micro-macro de f est

$$f = E[\rho] + g, \quad (2.18)$$

où $E[\rho]$ est l'équilibre local associé aux moments $\rho = \langle mf \rangle$, et g est la différence entre f et $E[\rho]$. On obtient aisément la proposition suivante :

Proposition 2.2. *Si $\rho = \langle mf \rangle$ et $g = f - E[\rho]$, alors ils satisfont le système suivant :*

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot F(\rho) + \nabla_x \cdot \langle vmg \rangle = 0, \quad (2.19)$$

$$\partial_t g + v \cdot \nabla_x g = Q(E[\rho] + g) - (\partial_t + v \cdot \nabla_x)E[\rho], \quad (2.20)$$

où $F(\rho) = \langle vmE[\rho] \rangle$ est le flux équilibre. Les données initiales associées sont

$$\rho|_{t=0} = \rho_0 = \langle mf_0 \rangle \quad \text{et} \quad g|_{t=0} = f_0 - E[\rho_0].$$

Réciproquement, si ρ et g satisfont ce système, alors $f = E[\rho] + g$ satisfait l'équation cinétique (2.17), et on a $\rho = \langle mf \rangle$ et $\langle mg \rangle = 0$.

L'équation (2.19) s'interprète alors comme une équation fluide avec un terme de "raffinement de modèle" $\nabla_x \cdot \langle vmg \rangle$. Notons que ce modèle peut être rendu plus "élégant" en éliminant la dérivée temporelle $\partial_t E[\rho]$ dans (2.20). Ceci a été fait dans [7], postérieurement à ce travail, pour la construction de schémas préservant les asymptotiques fluides (voir section 3.1).

Nous utilisons ensuite la fonction de transition h définie par (2.4) (section 2.1), ainsi que les domaines Ω_F , Ω_B , et Ω_K . Cette fonction est ici utilisée pour localiser la partie hors-équilibre g : on applique la méthode décrite section 2.1 pour séparer g en $g = g_K + g_F$, avec $g_K = hg$ et $g_F = (1 - h)g$, et on obtient alors le modèle

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot F(\rho) + \nabla_x \cdot \langle vmg_K \rangle + \nabla_x \cdot \langle vmg_F \rangle = 0, \quad (2.21)$$

$$\partial_t g_K + hv \cdot \nabla_x g_K + hv \cdot \nabla_x g_F = hQ(E[\rho] + g_K + g_F) - h(\partial_t + v \cdot \nabla_x)E[\rho], \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \partial_t g_F + (1 - h)v \cdot \nabla_x g_F + (1 - h)v \cdot \nabla_x g_K &= (1 - h)Q(E[\rho] + g_K + g_F) \\ &\quad - (1 - h)(\partial_t + v \cdot \nabla_x)E[\rho]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

qui est lui aussi équivalent à (2.17). La localisation de la partie hors-équilibre consiste alors à utiliser l'hypothèse d'équilibre dans $\Omega_F \cup \Omega_B$: contrairement à la méthode de la section 2.1, cette hypothèse ne permet pas de remplacer g_F par $E[\rho_F]$ mais plutôt de montrer que g_F est petit, ce qui est une conséquence de la définition de g . En pratique, les calculs nécessaires à cette localisation dépendent de l'échelle utilisée (hydrodynamique ou diffusion). Nous donnons ci-après le résultat obtenu pour ces deux échelles.

Dans l'échelle hydrodynamique, on utilise de nouvelles variables de temps et de position $x' = \varepsilon x$ et $t' = \varepsilon t$, ce qui revient à remplacer Q par $\frac{1}{\varepsilon}Q$ dans les équations précédentes. Grâce à l'hypothèse d'équilibre faite dans $\Omega_F \cup \Omega_B$, nous éliminons donc g_F des équations (2.21)–(2.23) (voir une tentative de justification dans la section 3.2 de [6]) pour obtenir le modèle suivant :

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot F(\rho) + \nabla_x \langle vmg_K \rangle = 0, \quad (2.24)$$

$$\partial_t g_K + hv \cdot \nabla_x g_K = \frac{h}{\varepsilon}Q(E[\rho] + g_K) - h(\partial_t + v \cdot \nabla_x)E[\rho], \quad (2.25)$$

où la partie cinétique g_K ne joue un rôle que dans $\Omega_K \cup \Omega_B$ qu'il faut imaginer comme une union de petites zones dans lesquelles la description cinétique est nécessaire. Dans le reste du domaine, seule l'équation fluide (2.24) avec $g_K = 0$ est résolue. Dans cette interprétation, la notion de décomposition de domaine disparaît alors presque totalement. Comme par construction la fonction h n'est pas appliquée à la partie fluide, il n'est pas étonnant que ce modèle préserve les écoulements uniformes, et ce, quel que soit le modèle de collision choisi, contrairement à la méthode de la section 2.1.

Pour l'échelle de diffusion, nous avons traité deux exemples dans [6] : le transport linéaire et le transfert radiatif de chaleur (tous deux en une dimension d'espace seulement). Cette échelle nécessite les nouvelles variables $x' = \varepsilon x$ et $t' = \varepsilon^2 t$, ce qui revient à remplacer ∇_x par $\varepsilon \nabla_x$ et ∂_t par $\varepsilon^2 \partial_t$ dans les équations (2.21)–(2.23). Pour le transport linéaire, l'opérateur de collision est $Q(f) = \sigma(\int_{-1}^1 f dv - f)$ et seule la densité $\rho = \langle f \rangle$ est conservée. Sans

entrer dans les détails, nous donnons ci-dessous le modèle cinétique, la limite fluide (de diffusion), l'équation fluide avec raffinement de modèle (système en ρ, g), et l'équation fluide avec raffinement local de modèle (système en ρ, g_K) :

modèle cinétique :

$$\varepsilon \partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f),$$

limite fluide :

$$\partial_t \rho - \partial_x \left(\frac{1}{3\sigma} \partial_x \rho \right) = 0.$$

équation fluide avec raffinement :

$$\begin{aligned} \varepsilon \partial_t \rho + \partial_x \langle v g \rangle &= 0, \\ \varepsilon^2 \partial_t g + \varepsilon v \partial_x g &= -\sigma g - \frac{1}{2} (\varepsilon^2 \partial_t + \varepsilon v \partial_x) \rho, \end{aligned}$$

équation fluide avec raffinement local :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho - \partial_x \left(\frac{1}{3\sigma} \partial_x \rho \right) + \partial_x \left(\frac{1}{3\sigma} h \partial_x \rho + \frac{1}{\varepsilon} \langle v g_K \rangle \right) &= 0, \\ \varepsilon^2 \partial_t g_K + \varepsilon h v \partial_x g_K + \varepsilon h v \partial_x g_F &= -\sigma g_K - \frac{1}{2} h (\varepsilon^2 \partial_t + \varepsilon v \partial_x) \rho, \end{aligned}$$

où le terme g_F vaut

$$g_F = -\varepsilon \frac{1}{2\sigma} (1 - h) v \partial_x \rho.$$

Le dernier modèle est obtenu en effectuant un développement de Hilbert sur l'équation cinétique associée à $g_F = (1 - h)g$ (voir les détails dans [6]). Là encore, on observe que l'on a bien dans tout le domaine Ω une équation fluide de même forme que l'équation de diffusion, mais corrigée localement dans Ω_K . La différence par rapport à l'échelle hydrodynamique est que cette correction locale comporte un terme macroscopique.

L'équation du transfert radiatif de chaleur est un modèle plus complexe contenant une équation macroscopique sur la température de la matière. Notre méthode s'adapte néanmoins aussi à ce cas, mais nous renvoyons à [6] pour plus de détails.

Au niveau numérique, la discrétisation de nos modèles fluides avec raffinement ne pose pas plus de problème que la méthode précédente. Elle est même plus souple, puisque la localisation ne portant pas sur la partie fluide, on peut discrétiser les flux macroscopiques par une méthode quelconque, sans craindre les problèmes d'oscillations ou de cavitation artificielle.

Nous concluons cette section par deux résultats numériques. Dans la figure 2.7, nous traçons les résultats obtenus avec le même test que dans la figure 2.3 (page 27). On voit clairement qu'avec cette nouvelle méthode, le couplage donne le même résultat que le modèle cinétique : le saut à l'interface a disparu, ce qui est une conséquence de la préservation des écoulements uniformes par la nouvelle méthode. Dans la figure 2.8, nous montrons une

comparaison entre le modèle du transfert radiatif de chaleur, notre équation fluide avec raffinement local de modèle, et la limite de diffusion. Le milieu présente deux opacités σ très différentes, et les zones Ω_F , Ω_B , et Ω_K sont placées en conséquence. On observe un parfait accord entre la solution cinétique et la solution fluide corrigée, alors que la limite de diffusion est totalement fausse.

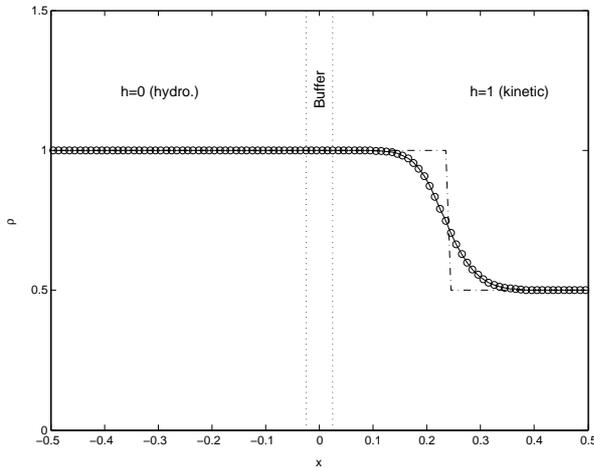


FIG. 2.7 – Modèle jouet (2.12) (comparer avec la figure 2.3 (page 27)) : solution cinétique (-), équation fluide avec raffinement local de modèle (o), et solution fluide (-.).

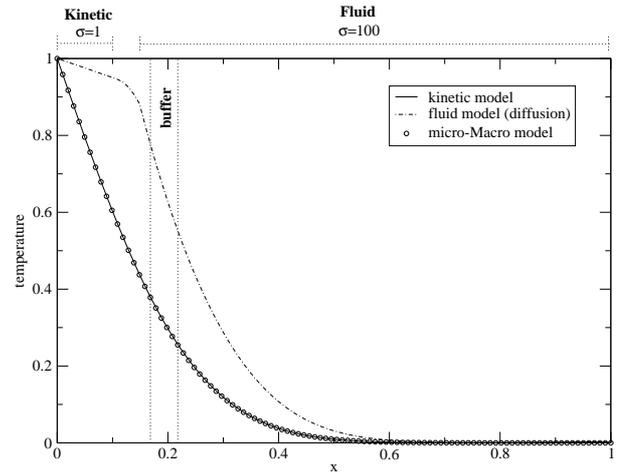


FIG. 2.8 – Température pour le transfert radiatif de chaleur à $t = 0.0185$.

2.4 Perspectives

En raison des propriétés fortes du couplage par la méthode de raffinement local de modèle vue section 2.3 (généralité, souplesse d'utilisation, robustesse numérique), nous envisageons pour l'instant des extensions de cette méthode plutôt que de celle vue section 2.1.

Calculs bi-dimensionnels

Un premier projet (en cours d'étude avec G. Dimarco) est donc une extension de cette méthode en deux dimensions d'espace (2D). Il suffira d'adapter le code de calcul 2D écrit pour la première méthode.

Couplage dynamique

Il est aussi important de proposer une extension de cette méthode au couplage dynamique, en utilisant les idées proposées dans [5]. Une recherche plus poussée sur les critères de localisation des zones cinétiques semble nécessaire, ainsi qu'un travail plus approfondi au niveau de l'algorithmique (dans [5], l'algorithme utilise trop le maillage pour définir la fonction h).

Couplage Boltzmann/Navier-Stokes

Dans le cas de l'échelle hydrodynamique, cette méthode n'a pour l'instant été appliquée qu'au couplage Boltzmann/Euler. Dans un travail en cours avec J.-G. Liu, nous essayons de la généraliser à un couplage Boltzmann/Navier-Stokes, ce qui est très important du point de vue des applications.

Utilisation de schémas "Asymptotic Preserving"

Pour que notre méthode soit suffisamment précise, il faut que la zone tampon soit située dans une zone où les particules sont proches d'un état d'équilibre. Par conséquent, la discrétisation de l'équation cinétique doit être efficace aussi bien en régime cinétique qu'en régime fluide, ce qui est le propre des schémas qui préservent l'asymptotique fluide (dits "Asymptotic Preserving" ou AP). Un tel schéma a par exemple été utilisé dans le couplage proposé dans [DJ05]. Dans un cadre très proche de celui proposé section 2.3, nous avons montré avec M. Bennoune et M. Lemou que la décomposition micro-macro exposée dans ce chapitre permet la construction de schémas AP (voir le chapitre suivant). Une intégration de ces schémas dans notre méthode de couplage est donc une perspective toute naturelle.

Chapitre 3

Méthodes numériques pour équations cinétiques préservant l'asymptotique fluide

Dans ce chapitre, nous restons dans la même thématique que dans le chapitre précédent : comment simuler efficacement un système de particules quand le domaine de calcul contient à la fois des zones de fort déséquilibre cinétique et des zones où le régime est fluide ? Alors que le chapitre 2 abordait le problème par l'approche du couplage de modèle, nous nous intéressons ici à la construction d'approximations numériques de l'équation cinétique qui "miment" le comportement asymptotique de l'équation. Autrement dit, ces approximations doivent, en un certain sens, se transformer en approximation numérique du modèle fluide asymptotique quand le paramètre d'échelle tend vers 0, ceci sans condition restrictive sur les paramètres numériques de la méthode. Plus précisément, nous cherchons donc à construire des schémas qui possèdent deux propriétés essentielles :

- la stabilité en temps uniformément par rapport à ε ;
- le schéma obtenu dans les régimes fluides ($\varepsilon \ll 1$ et $\varepsilon = 0$) doit être consistant avec les modèles fluides correspondants.

De tels schémas sont dit "Asymptotic Preserving" (AP), selon la dénomination semble-t-il introduite par Jin dans [Jin99].

Dans les deux travaux résumés ici, nous avons proposé de nouveaux schémas AP, en utilisant la décomposition micro-macro déjà évoquée au chapitre 2. Notons que le problème de la préservation de la limite de diffusion a été abondamment étudié, en particulier par Klar dans [Kla98b, Kla99a, Kla99b] ainsi que par Jin (avec d'autres co-auteurs) dans [JPT98, Jin99, JPT00, JP01, JP00]. Klar utilise une décomposition de la fonction de distribution assez proche de la décomposition micro-macro, mais il n'exploite pas totalement la nature macroscopique de la partie équilibre de f . En outre, il utilise classiquement un splitting en temps pour traiter la collision. Jin utilise une décomposition liée à la symétrie de l'opérateur de collision (la symétrie paire-impair). Là encore, cette décomposition est proche de la décomposition micro-macro, mais elle est moins générale. La raideur de l'opérateur de collision est là aussi traitée par splitting, et la raideur du transport est traitée à l'aide de la théorie des schémas de relaxation.

Même si les méthodes présentées dans ces travaux sont assez proches des nôtres, elles n'utilisent pas de façon aussi systématique la décomposition micro-macro. En outre, nous montrons qu'il n'est pas nécessaire d'utiliser le classique splitting en temps pour traiter la collision. Enfin, notre approche est suffisamment générale pour permettre de traiter les deux problèmes assez différents que sont les limites hydrodynamique (section 3.1) et de diffusion (section 3.2).

3.1 Schéma numérique pour l'équation de Boltzmann préservant l'asymptotique Navier-Stokes compressible [7]

Ce travail fait partie de la thèse de M. Bennoune que je co-encadre avec M. Lemou. L'article correspondant [7] a été accepté en 2007 pour publication au *Journal of Computational Physics*.

L'équation de Boltzmann de la dynamique des gaz s'écrit sous forme adimensionnée

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f, f), \quad t > 0, (x, v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d, \quad (3.1)$$

où l'opérateur de collision Q est une fonctionnelle bilinéaire qui agit uniquement sur la variable v de f . Dans tout ce qui suit, nous utilisons les notations suivantes

$$m(v) = \left(1, v, \frac{|v|^2}{2}\right), \quad \text{et} \quad \langle g \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} g(v) dv \quad (3.2)$$

pour toute fonction scalaire ou vectorielle g . L'opérateur Q satisfait les propriétés de conservation de la densité, de la quantité de mouvement et de l'énergie, l'inégalité d'entropie, et possède des états d'équilibres maxwelliens.

Lorsque ε tend vers 0, il est connu que les moments de f (notés $U = (\rho, \rho u, \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{d}{2}\rho T) = \langle mf \rangle$) satisfont à la limite les équations d'Euler compressibles

$$\partial_t U + \nabla_x \cdot F(U) = 0, \quad (3.3)$$

où $F(U) = \langle vmM(U) \rangle$ sont les flux à l'équilibre et $M(U)$ est l'équilibre local maxwellien correspondant à f . Pour ε fini, la méthode de Chapman-Enskog permet en outre de montrer que les moments de f sont approchés à ε^2 près par la solution des équations de Navier-Stokes compressibles (CNS)

$$\partial_t U + \nabla_x \cdot F(U) = -\varepsilon \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_x \cdot \sigma \\ \nabla_x \cdot (\sigma u + q) \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

où $\sigma = -\mu \left(\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I \right)$ et $q = -\kappa \nabla_x T$ sont respectivement le tenseur de cisaillement et le flux de chaleur, divisés par ε . Les flux diffusifs présents au second membre de cette équation sont d'ordre ε et peuvent être vus comme des approximations à ε^2 près de

la différence $\langle vm(f - M(U)) \rangle$ des flux de f et de sa maxwellienne associée. Nous renvoyons à l'article de Bardos, Golse, et Levermore [BGL91] pour des détails sur cette construction.

Il n'est pas très difficile de construire un schéma numérique pour (3.1) qui préserve l'asymptotique Euler (3.3) : il suffit d'utiliser un splitting entre le transport et la collision, puis de résoudre l'étape de collision par un schéma uniformément stable par rapport à ε . Nous renvoyons à la méthode de Perthame et Coron [CP91] dans le cas de l'opérateur BGK, et au travail plus récent de Gabetta, Pareschi, et Toscani [GPT97] pour l'opérateur de Boltzmann. Cependant, nous avons montré dans [7] qu'un tel schéma ne peut préserver l'asymptotique CNS (3.4) : plus précisément il n'y a pas de terme d'ordre ε dans la forme discrète des équations fluides associées au schéma.

Montrons rapidement cette assertion dans le cas de l'équation BGK $\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon}(M(U) - f)$. Si, pour simplifier, on garde la variable spatiale continue, le schéma de [CP91] consiste en une étape de transport

$$\frac{f^{n+\frac{1}{2}} - f^n}{\Delta t} + v \cdot \nabla_x f^n = 0,$$

suivie d'une étape de collision résolue exactement

$$f^{n+1} = e^{-\Delta t/\varepsilon} f^{n+\frac{1}{2}} + (1 - e^{-\Delta t/\varepsilon})M(U^{n+\frac{1}{2}}).$$

Comme cette étape conserve les moments, on a $M(U^{n+\frac{1}{2}}) = M(U^{n+1})$ et on peut donc écrire f^{n+1} sous la forme

$$f^{n+1} = M(U^{n+1}) + e^{-\Delta t/\varepsilon}(f^{n+\frac{1}{2}} - M(U^{n+\frac{1}{2}})).$$

Ainsi, comme $e^{-\Delta t/\varepsilon}$ tend vers 0 plus vite que toute puissance de ε , il est alors impossible d'obtenir une différence de flux $\langle vm(f - M(U)) \rangle$ qui soit d'ordre ε , d'où le résultat. Nous avons montré dans [7] que ce défaut peut être corrigé en remplaçant la résolution exacte de la phase de collision par un schéma d'Euler implicite : le terme $e^{-\Delta t/\varepsilon}$ est alors remplacé par $\frac{1}{1+\Delta t/\varepsilon}$ qui a le bon ordre de grandeur. Cependant la généralisation de cette astuce au cas de l'opérateur de Boltzmann semble plus difficile et fait l'objet d'un travail en cours.

Nous avons donc proposé une méthode différente, basée sur la décomposition micro-macro : l'idée est d'introduire dans l'équation de Boltzmann, sans approximation, la décomposition

$$f = M(U) + \varepsilon g, \tag{3.5}$$

où la maxwellienne $M(U)$ associée à f représente la partie macroscopique du système, alors que g représente la partie microscopique ou hors-équilibre. Ensuite, en utilisant l'opérateur $\Pi_{M(U)}$ de projection sur le noyau de $\mathcal{L}_{M(U)}$ (qui est l'opérateur de Boltzmann linéarisé autour de $M(U)$), nous séparons les quantités U et g et obtenons le système couplé suivant, équivalent à l'équation de Boltzmann (3.1) :

$$\partial_t U + \nabla_x \cdot F(U) + \varepsilon \nabla_x \cdot \langle vmg \rangle = 0, \tag{3.6}$$

$$\partial_t g + (I - \Pi_{M(U)})(v \cdot \nabla_x g) = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_{M(U)} g + Q(g, g) - \frac{1}{\varepsilon} (I - \Pi_{M(U)})(v \cdot \nabla_x M(U)). \tag{3.7}$$

Ce système ressemble à celui obtenu section 2.3. La différence est due à l'utilisation de la projection $\Pi_{M(U)}$ qui permet d'éliminer la dérivée temporelle de la maxwellienne. Cette décomposition permet en outre d'obtenir les équations CNS de façon très naturelle, puisque (3.7) donne immédiatement l'expression suivante du flux hors équilibre de (3.6) :

$$\varepsilon \langle vmg \rangle = \varepsilon \left\langle vm \mathcal{L}_{M(U)}^{-1} (I - \Pi_{M(U)}) (v \cdot \nabla_x M(U)) \right\rangle + O(\varepsilon^2).$$

Des calculs classiques montrent que cette expression n'est autre que celle des flux diffusifs des équations CNS (voir par exemple [Lev96]). A notre connaissance, cette technique de projection a été présentée pour la première fois avec ce formalisme par Degond et Lemou dans [DL01], même si des idées similaires ont été proposées auparavant par Caflisch dans [Caf80].

A présent, nous introduisons une discrétisation en temps de (3.6)–(3.7) dans laquelle nous implicitons le minimum de termes. La raideur principale est due au terme de collision $\frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_{M(U)} g$ que nous implicitons, alors que le terme $\frac{1}{\varepsilon} (I - \Pi_{M(U)}) (v \cdot \nabla_x M(U))$ est gardé explicite. Ensuite, pour obtenir des termes de diffusion correctes dans le développement de Chapman-Enskog, nous implicitons aussi les flux hors équilibre $\nabla_x \cdot \langle vmg \rangle$ dans l'équation fluide (3.6). Nous obtenons alors le schéma semi-discret en temps

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} + \nabla_x \cdot F(U^n) + \varepsilon \nabla_x \cdot \langle vmg^{n+1} \rangle = 0, \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{g^{n+1} - g^n}{\Delta t} + (I - \Pi_{M(U^n)}) (v \cdot \nabla_x g^n) &= \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_{M(U^n)} g^{n+1} + Q(g^n, g^n) \\ &\quad - \frac{1}{\varepsilon} (I - \Pi_{M(U^n)}) (v \cdot \nabla_x M(U^n)). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Comme dans le cas continu, il est alors très facile de montrer que ce schéma donne à l'ordre 2 en ε un schéma explicite en temps consistant avec les équations CNS.

Enfin, dans le cas simplifié unidimensionnel en espace, nous proposons une discrétisation spatiale par grilles décalées comme cela se fait souvent pour discrétiser des dérivées secondes. Les quantités macroscopiques sont discrétisées par $U_i = U(x_i)$ aux points $x_i = i\Delta x$, alors que la partie microscopique est discrétisée par $g_{i+\frac{1}{2}} = g(x_{i+\frac{1}{2}})$ avec $x_{i+\frac{1}{2}} = (i + \frac{1}{2})\Delta x$. Pour obtenir un schéma stable dans le régime cinétique ($\varepsilon = 1$), nous utilisons une discrétisation décentrée du terme de transport $(I - \Pi_M)(v \cdot \nabla_x g)$. Les autres gradients sont discrétisés de façon centrée pour obtenir une approximation correcte des termes de diffusion des équations CNS. Le schéma obtenu est le suivant :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{F_{i+\frac{1}{2}}(U^n) - F_{i-\frac{1}{2}}(U^n)}{\Delta x} + \varepsilon \left\langle vm \frac{g_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - g_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} \right\rangle = 0, \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned} \frac{g_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - g_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} + (I - \Pi_{i+\frac{1}{2}}^n) \left(v^+ \frac{g_{i+\frac{1}{2}}^n - g_{i-\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} + v^- \frac{g_{i+\frac{3}{2}}^n - g_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x} \right) \\ = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{L}_{M_{i+\frac{1}{2}}^n} g_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} + Q(g_{i+\frac{1}{2}}^n, g_{i+\frac{1}{2}}^n) - \frac{1}{\varepsilon} (I - \Pi_{i+\frac{1}{2}}^n) \left(v \frac{M_{i+1}^n - M_i^n}{\Delta x} \right), \end{aligned} \quad (3.11)$$

où pour simplifier l'écriture, nous avons noté

$$M_i^n = M(U_i^n), \quad M_{i+\frac{1}{2}}^n = M(U_{i+\frac{1}{2}}^n), \quad \text{et} \quad \Pi_{i+\frac{1}{2}}^n = \Pi_{M_{i+\frac{1}{2}}^n}.$$

La divergence $\nabla_x \cdot F(U)$ peut être approchée par n'importe quel schéma usuel que nous ne précisons pas ici. Ainsi, nous pouvons montrer que ce schéma est asymptotiquement équivalent à ε^2 près à un schéma explicite en temps consistant avec les équations CNS, dans lequel les flux diffusifs sont approchés à l'ordre deux en espace par

$$\frac{\varepsilon}{\Delta x} \left\langle vm \left(\mathcal{L}_{M_{i+\frac{1}{2}}^n}^{-1} (I - \Pi_{i+\frac{1}{2}}^n) (v \frac{M_{i+1}^n - M_i^n}{\Delta x}) - \mathcal{L}_{M_{i-\frac{1}{2}}^n}^{-1} (I - \Pi_{i-\frac{1}{2}}^n) (v \frac{M_i^n - M_{i-1}^n}{\Delta x}) \right) \right\rangle.$$

Dans [7], le schéma totalement discrétisé est implémenté dans le cas simplifié de l'équation BGK.

Nous terminons cette section par une illustration numérique des résultats énoncés plus haut. Dans la figure 3.1, nous traçons le profil du flux de chaleur (divisé par ε) pour le cas test de Sod, pour différentes valeurs de ε et différents schémas. Cette quantité vaut $\frac{1}{\varepsilon} \langle \frac{|v-u|^2}{2} (v-u) f \rangle$ dans la description cinétique et $-\kappa \partial_x T$ dans les équations CNS. On voit clairement que le schéma splitting de [CP91] ne capture pas ce profil pour des ε de l'ordre de 10^{-4} : le flux de chaleur est très petit en raison du terme $e^{-\Delta t/\varepsilon}$ mis en évidence plus haut. Au contraire, notre schéma donne un flux très proche de celui obtenu par les équations CNS, de même que le schéma splitting modifié.

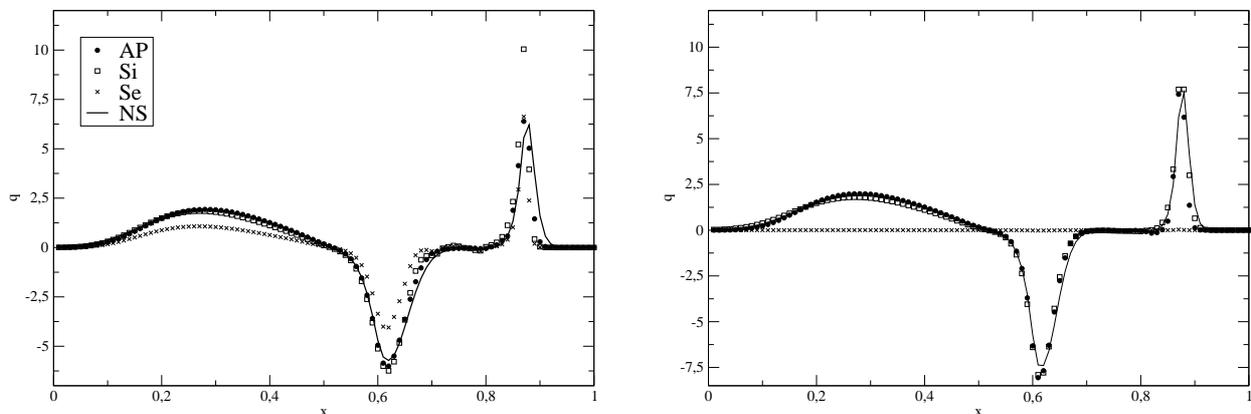


FIG. 3.1 – Test de Sod : flux de chaleur divisé par ε en fonction de $x \in [0, 1]$ pour le schéma (3.10)–(3.11) (noté AP) et le schéma splitting modifié (noté Si)—qui préservent tous deux l’asymptotique CNS—ainsi que pour un schéma standard pour CNS (noté NS), et pour le schéma splitting de [CP91] (noté Se). Temps $t = 0.16$, et $\varepsilon = 2 \times 10^{-3}$ (gauche) et $\varepsilon = 2 \times 10^{-4}$ (droite). Le pas de temps est $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

Remarque 3.1. On peut remarquer que pour capturer correctement le régime des équations CNS, il faut que $\Delta x \leq \varepsilon$, et que par conséquent la condition de stabilité de CFL due au transport impose un pas de temps $\Delta t = O(\Delta x) = O(\varepsilon)$. Cela signifie que notre schéma

a la même contrainte qu'un schéma explicite dans le régime CNS. Cependant, la différence essentielle est que notre schéma est uniformément stable et précis par rapport à ε . Un schéma explicite pourra certes décrire le régime CNS, mais dans le cas d'un écoulement à régime variable (comme pour une rentrée atmosphérique), ce schéma ne pourra fonctionner jusqu'au régime Euler. Au contraire, le schéma splitting de [CP91] pourra capturer le régime Euler, mais pas le régime CNS. Notre schéma est à notre connaissance le seul schéma fonctionnant correctement dans tous ces régimes.

3.2 Schéma numérique pour l'équation du transport linéaire préservant l'asymptotique de diffusion [8]

Cette section résume le travail effectué en collaboration avec M. Lemou et accepté en 2007 pour publication au *SIAM Journal of Scientific Computing* [8].

Nous avons voulu appliquer la stratégie décrite dans la section précédente au cas des équations linéaires pour lesquelles l'échelle pertinente est celle de la diffusion. Pour simplifier ce résumé, prenons le cas de l'équation de transport en géométrie plane monodimensionnelle

$$\partial_t f + \frac{1}{\varepsilon} v \partial_x f = \frac{\sigma_S}{\varepsilon^2} (\rho - f), \quad (3.12)$$

où la densité ρ est la moyenne de f définie par $\rho = \langle f \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f dv$, et $v \in \Omega = [-1, 1]$ est le cosinus de l'angle entre la vitesse de propagation des particules et l'axe x . On peut montrer que quand ε tend vers 0, cette densité tend vers la solution de l'équation de diffusion

$$\partial_t \rho - \partial_x (\kappa \partial_x \rho) = 0, \quad (3.13)$$

où $\kappa = \frac{1}{3\sigma_S}$.

Par rapport au problème de la limite hyperbolique, la difficulté numérique essentielle de l'échelle de diffusion est que l'équation contient un terme raide supplémentaire : le terme de transport $\frac{1}{\varepsilon} v \partial_x f$. Il n'est donc pas évident a priori que la méthode de la section 3.1 puisse s'appliquer telle quelle avec succès. Pourtant, tel est bien le cas, comme nous allons le présenter ci-dessous.

La décomposition micro-macro adaptée au problème (3.12) est

$$f = \rho + \varepsilon g, \quad (3.14)$$

où g est telle que $\langle g \rangle = 0$. La projection sur le noyau de l'opérateur de collision est ici définie par $\Pi \varphi = \langle \varphi \rangle$. Ainsi notre formulation micro-macro de l'équation (3.12) est

$$\partial_t \rho + \partial_x \langle v g \rangle = 0, \quad (3.15)$$

$$\partial_t g + \frac{1}{\varepsilon} (I - \Pi)(v \partial_x g) = -\frac{\sigma_S}{\varepsilon^2} g - \frac{1}{\varepsilon^2} v \partial_x \rho. \quad (3.16)$$

En adoptant la même discrétisation en temps et en espace que celle proposée section 3.1, nous trouvons donc le schéma

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} + \left\langle v \frac{g_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - g_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}{\Delta x} \right\rangle = 0, \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{g_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - g_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} + \frac{1}{\varepsilon \Delta x} (I - \Pi) \left(v^+ (g_{i+\frac{1}{2}}^n - g_{i-\frac{1}{2}}^n) + v^- (g_{i+\frac{3}{2}}^n - g_{i+\frac{1}{2}}^n) \right) \\ = -\frac{\sigma_{Si+\frac{1}{2}}}{\varepsilon^2} g_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \frac{1}{\varepsilon^2} v \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Il faut noter que le terme raide $\frac{1}{\varepsilon}(I - \Pi)v\partial_x g$ dans (3.16) est approché de façon explicite en temps dans (3.18). Cependant le terme de collision $-\frac{\sigma_S}{\varepsilon^2}g$, de raideur plus importante, est lui implicite, et il apparaît en pratique que cette implicitation suffit à assurer la stabilité uniforme du schéma par rapport à ε .

En effet, nous avons pu montrer cette propriété dans le cas simplifié de l'équation du télégraphe (ou modèle de Goldstein-Taylor). Cette équation s'écrit

$$\begin{aligned} \varepsilon \partial_t u + \partial_x u &= \frac{1}{2\varepsilon}(v - u), \\ \varepsilon \partial_t v - \partial_x v &= \frac{1}{2\varepsilon}(u - v). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Elle peut se voir comme le modèle (3.12) pour l'ensemble de "vitesses" $\Omega = \{-1, 1\}$, où $\sigma_S = 1$, dv est la mesure de Lebesgue discrète associée à Ω , et f est le vecteur (u, v) . La densité est $\rho = \frac{1}{2}(u + v)$ alors que la partie "micro" est $g = (\frac{1}{2\varepsilon}(u - v), \frac{1}{2\varepsilon}(v - u))$. Ainsi, g peut-être remplacée par $j = \frac{1}{2\varepsilon}(u - v)$, et en effectuant quelques calculs simples, le schéma (3.17)–(3.18) appliqué à cette équation s'écrit sous la forme

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (j_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - j_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) = 0, \quad (3.20)$$

$$\frac{j_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - j_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2\varepsilon \Delta x} (j_{i+\frac{3}{2}}^n - 2j_{i+\frac{1}{2}}^n + j_{i-\frac{1}{2}}^n) = -\frac{1}{\varepsilon^2} j_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x}. \quad (3.21)$$

Nous avons alors montré, par une simple analyse de Von Neuman, le resultat de stabilité suivant.

Théorème 3.1. *Le schéma (3.20)–(3.21) est l^2 -stable, i.e.*

$$\sum_i (\rho_i^n)^2 + (\varepsilon j_{i+\frac{1}{2}}^n)^2 \leq \sum_i (\rho_i^0)^2 + (\varepsilon j_{i+\frac{1}{2}}^0)^2$$

pour tout n , si Δt satisfait la condition suivante

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta x^2}{2} + \varepsilon \Delta x \right). \quad (3.22)$$

La condition de stabilité donnée dans ce théorème est une moyenne des conditions CFL de transport et de diffusion. Dans les deux régimes extrêmes, ε grand et ε petit, on retrouve ces CFL classiques, mais avec un pas de temps deux fois plus petit que ce que donnent ces conditions. Notons que pour $\varepsilon \ll \Delta x$, le pas de temps n'est plus contraint par ε , d'où la stabilité uniforme. En pratique, nous avons constaté qu'une CFL du même type assure la stabilité pour l'équation du transport linéaire.

Contrairement au travail présenté section 3.1, nous avons étudié dans [8] l'approximation des conditions aux limites (CL). Pour simplifier cette présentation, nous nous restreignons ici au cas d'une CL de Dirichlet, au bord gauche $x = 0$: la CL sur f se traduit dans notre formulation micro-macro par

$$\rho(t, 0) + \varepsilon g(t, 0, v) = f_L(t, v), \quad \forall v > 0. \quad (3.23)$$

La difficulté de cette étude tient au fait que la CL n'est donnée que sur les vitesses rentrantes : ainsi, on ne peut a priori découpler ρ et g dans cette relation. De plus, la discrétisation centrée du flux dans (3.15) impose de connaître g au bord pour toutes les vitesses, alors que la CL de Dirichlet n'impose une relation que pour les $v > 0$. Enfin se pose le problème du comportement de notre schéma en présence des couches limites éventuellement générées par des données au bord non isotropes. Nous résumons ci-dessous les réponses que nous apportons à ces problèmes.

Tout d'abord, donnons les notations nécessaires. Nous considérons le domaine borné $[0, 1]$ discrétisé par les grilles décalées $\{x_i = i\Delta x\}_{i=0}^N$ avec $x_0 = 0$ et $x_N = 1$ qui sont les deux points du bord, et $\{x_{i+\frac{1}{2}} = (i + \frac{1}{2})\Delta x\}_{i=-1}^N$ avec $x_{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}\Delta x$ et $x_{N+\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2}\Delta x$ qui sont deux points extérieurs au domaine. En supposant ρ et g connus en tout point à $t = t_n$, le calcul de ces mêmes quantités au temps t_{n+1} s'effectue par l'algorithme suivant :

1. Calcul de g aux points intérieurs. Appliquer (3.18) pour trouver $g_{i+\frac{1}{2}}^n$ pour $i = 0$ à N seulement.

2. Calcul de ρ aux points intérieurs. Appliquer (3.17) pour trouver ρ_i^{n+1} pour $i = 1$ à $N - 1$ seulement.

3. Calcul de ρ aux bords. Appliquer (3.17) en $i = 0$ en prenant pour $g_{-\frac{1}{2}}^{n+1}$ les valeurs suivantes :

- pour les vitesses rentrantes, la CL (3.23) est approchée par $\rho_0^{n+1} + \frac{\varepsilon}{2}(g_{-\frac{1}{2}}^{n+1} + g_{\frac{1}{2}}^{n+1}) = f_L$, ce qui donne la valeur

$$g_{-\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{2}{\varepsilon}(f_L - \rho_0^{n+1}) - g_{\frac{1}{2}}^{n+1}, \quad v > 0. \quad (3.24)$$

- pour les vitesses sortantes, on utilise la CL artificielle de Neumann

$$g_{-\frac{1}{2}}^{n+1}(v) = g_{\frac{1}{2}}^{n+1}(v), \quad v < 0. \quad (3.25)$$

Noter que la raideur en $\frac{1}{\varepsilon}$ de (3.24) ne pose pas de problème puisqu'elle est en facteur de l'inconnue ρ_0^{n+1} . La valeur au bord droit est obtenue de la même façon.

4. Calcul de g aux points extérieurs. Comme ρ_0^{n+1} est à présent connue, il suffit alors d'appliquer les relations (3.24)-(3.25) pour calculer $g_{-\frac{1}{2}}^{n+1}$.

A présent, on peut facilement voir que la CL obtenue à la limite $\varepsilon = 0$ pour ρ_0^{n+1} est

$$\rho_0^{n+1} = \frac{\int_0^1 v f_L dv}{\int_0^1 v dv}. \quad (3.26)$$

Or il est connu que la CL de l'équation de diffusion (3.13) est en fait $\rho(t, 0) = \lim_{y \rightarrow +\infty} \chi(t, y, v)$, où χ est la solution bornée du problème de Milne

$$\begin{aligned} v \partial_y \chi &= \sigma_S (\langle \chi \rangle - \chi), & y > 0, \\ \chi(t, 0, v) &= f_L(t, v), & v > 0. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Quand f_L est isotrope ($= \rho_L$), on trouve $\rho(t, 0) = \rho_L$, ce que donne aussi notre CL numérique limite (3.26). Notre schéma capture donc bien la solution au bord dans le cas de CL isotropes. Si f_L n'est pas isotrope, alors la formule (3.26) correspond à l'approximation de (3.27) obtenue en égalant les demi-flux de χ en 0 et $+\infty$, ce qui n'est pas toujours une approximation suffisante.

Nous terminons cette section par une illustration numérique des résultats précédents. La figure 3.2 montre le comportement de notre méthode (notée LM dans la légende) dans un régime cinétique, alors que la figure 3.3 montre les résultats obtenus en régime de diffusion, pour des CL différentes. Les solutions de référence sont obtenues avec un schéma explicite sur un maillage très fin pour le régime cinétique, et avec une approximation classique de l'équation de diffusion pour le régime asymptotique.

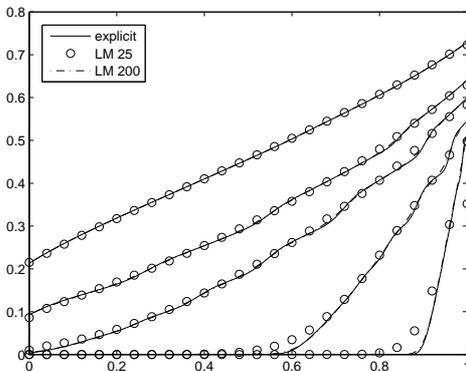


FIG. 3.2 – Transport linéaire, régime cinétique ($\varepsilon = 1$) : comparaison schéma explicite/schéma LM (25 et 200 points), à différents temps.

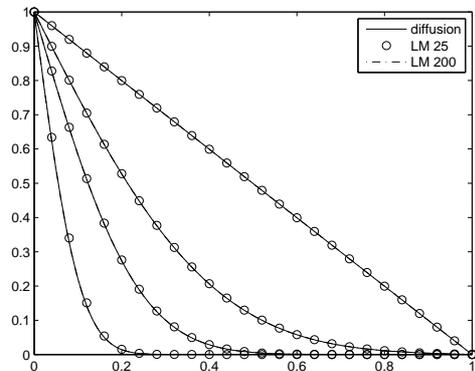


FIG. 3.3 – Transport linéaire, régime de diffusion ($\varepsilon = 10^{-8}$) : comparaison équation de diffusion/schéma LM (25 et 200 points), à différents temps.

Nous mentionnons que dans [8], notre méthode est soigneusement comparée aux méthodes de Klar [Kla98b] et de Jin, Pareschi et Toscani [JPT00] : il ressort de cette étude que notre approche donne globalement des résultats assez proches des méthodes existantes.

3.3 Perspectives

Nous envisageons de poursuivre ces travaux dans les directions suivantes.

Problèmes multi-dimensionnels.

Afin de montrer pleinement l'efficacité de notre méthode, il est nécessaire de l'étendre aux problèmes multi-dimensionnels. La seule difficulté est alors la construction en plusieurs dimensions d'une discrétisation spatiale avec grilles décalées : en particulier le problème délicat est de trouver des discrétisations centrées des gradients $\nabla_x \rho$ et $\nabla_x g$ dans le cas linéaire, ou $\nabla_x M(U)$ et $\nabla_x g$ dans le cas Boltzmann/CNS, telles que le terme de diffusion soit bien approché par le schéma limite. Autrement dit, il est nécessaire que la composition des opérateurs discrétisant $v \cdot \nabla_x$ et $\nabla_x \cdot \langle v \cdot \rangle$ donne une bonne approximation de l'opérateur laplacien Δ_x . En géométrie cartésienne, plusieurs discrétisations sont envisageables. En géométrie quelconque, il est séduisant d'utiliser la théorie développée récemment par Domelevo et Omnès [DO05] : elle permet de généraliser la notion de grilles décalées et contient une discrétisation "en dualité" des opérateurs divergence et gradient tout-à-fait adaptée à notre problème.

Traitement des conditions aux limites.

Le projet précédent nécessitera une étude précise de la discrétisation des conditions aux limites dont on a vu que, même en une dimension, elle n'était pas immédiate. Le problème des CL reste d'ailleurs à résoudre pour le schéma préservant l'asymptotique CNS de l'équation de Boltzmann (présenté section 3.1). Il n'est pas évident que l'approximation utilisée pour le transport linéaire fonctionne aussi dans ce cas.

Inversion de l'opérateur de collision.

Un des aspects délicats de notre approche concerne la construction d'une méthode d'inversion efficace de l'opérateur de collision linéaire (ou linéarisé) intervenant dans l'équation sur la partie "micro" g . Ce problème est commun à toutes les méthodes AP (aussi bien la nôtre que celles de Klar ou de Jin citées en introduction). La méthode des sommes de Wild pour les opérateurs de type Boltzmann semble prometteuse comme il a été montré dans [GPT97] ou dans [JP00]. On peut aussi envisager des techniques similaires à celles que nous avons développées pour l'opérateur de Landau (voir chapitre 1).

Analyse mathématique.

Du point de vue des fondements mathématiques de notre méthode, nous souhaiterions étendre le résultat de stabilité démontré dans le cas de l'équation du télégraphe au problème du transport linéaire. Cela a déjà été fait par Klar et Unterreiter [KU02] pour une méthode du type de celles de [Kla98b] et [JPT00]. Une analyse du même genre semble tout-à-fait envisageable.

Autres asymptotiques.

Enfin, nous mentionnons trois extensions possibles de notre méthode que nous souhaiterions étudier rapidement. La première consisterait à obtenir un schéma pour l'équation de Boltzmann préservant la limite Navier-Stokes *incompressible*. Dans cette asymptotique, la fonction de distribution est supposée proche d'une maxwellienne absolue, et la limite fluide est obtenue en utilisant une échelle de diffusion. Là encore, un schéma AP a déjà été obtenu

par Klar dans [Kla99a]. Nous souhaiterions montrer que notre schéma présenté section 3.1 permet d'obtenir lui aussi la limite Navier-Stokes incompressible.

Une autre extension dans le domaine des limites de diffusion est celle de l'asymptotique "Spherical Harmonic Expansion" (S.H.E, ou développement en harmoniques sphériques). Cette limite apparaît pour des modèles cinétiques pour lesquels l'opérateur de collision a pour effet de rendre la distribution isotrope en vitesse, comme dans la modélisation des semi-conducteurs par exemple. Les états d'équilibres sont donc plus généraux que dans le cas habituel : ce sont des fonctions de l'énergie cinétique. Le modèle limite est une équation de type dérive-diffusion mais avec un opérateur gradient généralisé défini sur les variables de position et d'énergie (voir Degond et Ben Abdallah [BAD96] pour une introduction à ces modèles). Notre approche par décomposition micro-macro s'applique directement à ce problème, la seule difficulté étant de trouver une discrétisation des variables de position et d'énergie qui puisse donner une discrétisation correcte du terme de dérive-diffusion généralisé dans le schéma limite.

Enfin, nous envisageons d'étudier la construction de schémas AP pour les problèmes dont la limite de diffusion est induite par les collisions au bord. Un cas typique est celui de l'écoulement de glissement thermique (ou "thermal creep flow") d'un gaz confiné entre deux plaques très proches, avec des conditions de réflexion diffuse à la paroi. Le chapitre suivant est consacré à un problème de ce type, sans toutefois s'attacher à la construction de schémas AP.

Chapitre 4

Modélisation et calcul numérique pour un problème de micro-fluidique

Dans ce chapitre, nous résumons quelques résultats obtenus à l'issue d'une collaboration avec P. Degond et plusieurs membres de l'équipe de K. Aoki.

Suite aux travaux récents de Sone et ses co-auteurs [SWA96, AST⁺01], nous avons proposé un nouveau système de micro-pompe basé sur l'effet de glissement thermique, décrit par la théorie cinétique des gaz. Ce système est composé d'un canal courbe le long duquel est appliqué un champ de température périodique. Ce champ provoque un écoulement du gaz dans la direction du gradient de température, sans utiliser la moindre partie mécanique (du type piston ou hélice), ce qui a un intérêt technologique évident. Afin de démontrer l'efficacité de ce dispositif, nous avons mis en oeuvre différentes techniques de modélisation et de simulation numérique.

Dans la section 4.1, nous donnons quelques explications sur le phénomène de glissement thermique, ainsi que sur son application potentielle à la conception de micro-pompes appelées compresseurs de Knudsen. Nous exposons ensuite dans la section 4.2 la méthode de simulation cinétique que nous avons proposée et les résultats obtenus. Dans la section 4.3, nous proposons une modélisation macroscopique du problème en utilisant l'approximation de la diffusion induite par les collisions au bord, dans la limite d'un canal de faible largeur. Les résultats numériques obtenus avec ce modèle sont comparés aux résultats cinétiques. Enfin nous décrivons brièvement section 4.4 une autre modélisation macroscopique obtenue dans la limite de faibles nombres de Knudsen.

4.1 Glissement thermique et compresseurs de Knudsen

L'écoulement de glissement thermique ("thermal creep flow" en anglais) est un effet généré par l'interaction du gaz avec la paroi, dans le cas où le gaz est raréfié : un gradient de température appliqué sur la paroi provoque un déplacement du gaz dans la direction du gradient. Ce phénomène a été découvert pour la première fois par Reynolds [Rey79], puis étudié ensuite par Maxwell [Max79], Knudsen [Knu09], et plus récemment, par exemple, par Sone [Son66], et Ohwada, Sone et Aoki [OSA89].

Sans décrire ces théories en détail, nous donnons ci-dessous une explication simplifiée

de ce phénomène (d'après [Son02]). Considérons un point A sur la paroi (voir figure 4.1) et les molécules qui heurtent ce point. Puisque la paroi est plus chaude à droite de A qu'à gauche, alors les molécules venant de la droite ont en moyenne une énergie cinétique plus grandes que celles venant de la gauche. Par conséquent, ces molécules transfèrent à la paroi en A une impulsion plus importante. D'une autre côté, les molécules réfléchies de manière diffuse par la paroi ne contribuent pas au transfert d'impulsion tangentielle. Par conséquent, le gaz transfère à la paroi une impulsion de la droite vers la gauche, c.-à-d. dans la direction opposée à celle du gradient de température. Finalement, puisque la paroi est immobile, elle transfère au gaz, par réaction, une force dirigée de la gauche vers la droite, ce qui produit un écoulement dans la direction du gradient de température. Cet écoulement est appelé glissement thermique.

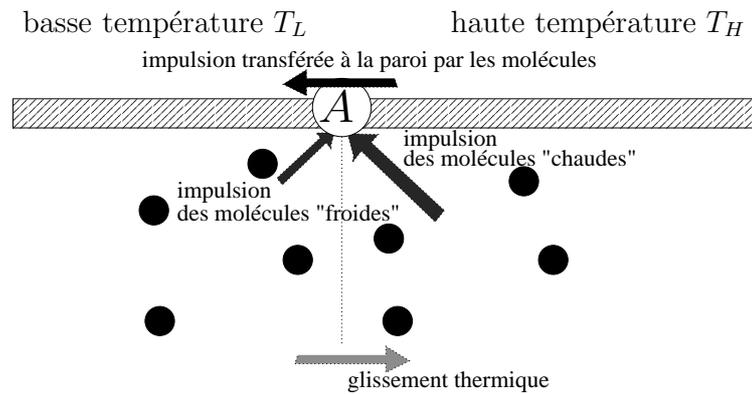


FIG. 4.1 – Mécanisme physique du glissement thermique.

Cet effet suggère qu'il est possible de créer un écoulement dans un tube ou un canal sans aucune partie mécanique. Une telle idée ayant été suggérée pour la première fois par Knudsen, les dispositifs utilisant le glissement thermique sont souvent appelés *compresseurs de Knudsen*. Cependant, ce n'est que récemment, avec le développement de la micro-mécanique (en particulier la technologie des micro-systèmes électro-mécaniques, ou MEMS), que l'on a pu construire des compresseurs de Knudsen suffisamment petits pour fonctionner avec des pressions ambiantes. Par exemple, pour de l'air à la pression atmosphérique, la taille caractéristique du système doit être de l'ordre de 1 micron pour que le gaz soit suffisamment raréfié. Différents types de compresseurs ont été proposés ces dernières années, et nous nous sommes inspirés de celui étudié par Sone, Waniguchi et Aoki [SWA96] et Sone et Sato [SS00] (voir d'autres références dans [9]).

Comme [SWA96], nous utilisons une structure en cascade, déjà proposée par Knudsen : comme le pompage induit par le glissement thermique est proportionnel au gradient de température, la puissance du pompage est nécessairement limitée, à moins d'appliquer un gradient extrêmement fort, ce qui est technologiquement difficile. L'idée est alors de former un système (dit "en cascade") composé d'unités identiques connectées les unes aux autres. Chaque unité est composée d'un tube divisé en deux parties sur lesquelles on applique deux gradients de température de signe opposé, de façon à ce que le gradient soit nul en moyenne sur l'unité. Afin de générer un écoulement global dans le système, il faut ensuite trouver un moyen pour que les deux glissements thermiques opposés, ainsi générés dans chaque unité,

ne se compensent pas.

Dans notre système, cette non-compensation est obtenue par un *effet géométrique*. Comme on peut voir figure 4.2, cette unité a une forme de crochet : un gradient de température $(T_H - T_L)/L_S$ est appliqué sur la partie droite, et un gradient de signe opposé $(T_L - T_H)/(\pi R)$ est appliqué sur la partie courbe. La différence de géométrie entre les deux parties permet de penser que les deux écoulements générés n'auront pas la même intensité, et qu'un écoulement devrait par conséquent pouvoir l'emporter sur l'autre. Cette géométrie est en outre plus simple que celle de [SWA96] et devrait pouvoir être réalisée facilement sur un MEMS. Notons que pour diminuer les coûts de calcul de nos simulations, nous nous sommes restreints dans cette étude au cas de la géométrie plane : ainsi, la figure 4.2 représente non pas un tube mais un canal plan.

Dans les études décrites ci-après, nous avons considéré deux tests différents. L'un est décrit figure 4.3 : on joint une unité à une unité symétrisée de façon à former un anneau. Ce test est destiné à mettre en évidence un écoulement circulant en régime stationnaire. L'autre test consiste à mesurer l'effet de pompage en considérant une cascade telle que celle décrite figure 4.4. Une unité est connectée à son image "miroir" pour former un "S", puis un nombre \mathcal{N} d'unités sont ainsi connectées. Le système est fermé à chaque bout, et on calcule la différence de pression obtenue en régime stationnaire.

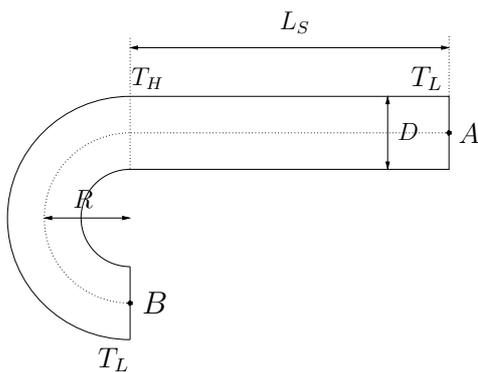


FIG. 4.2 – Unité de base de notre système : un canal en forme de crochet.

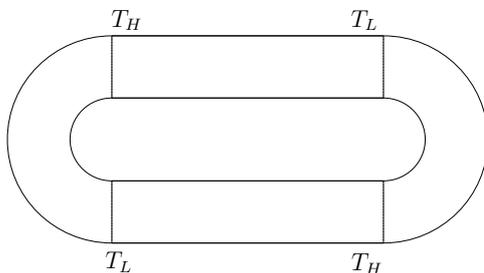


FIG. 4.3 – Canal en forme d'anneau pour générer un écoulement circulant.

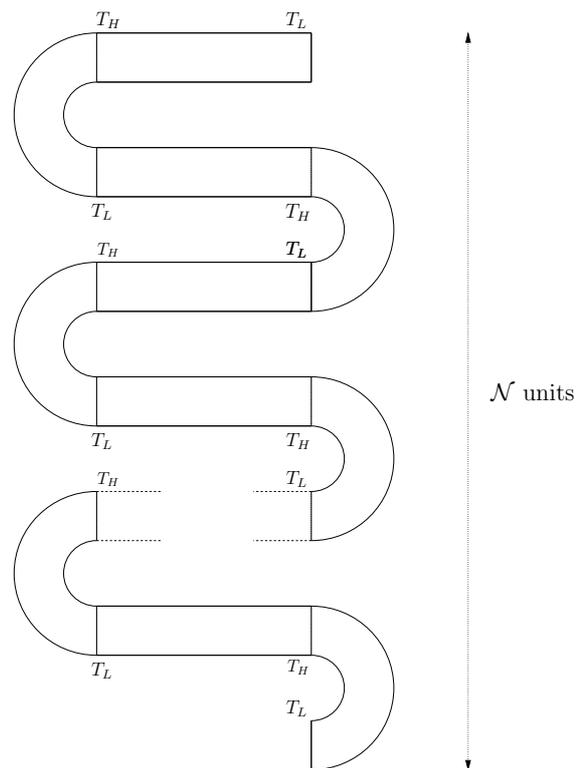


FIG. 4.4 – Système en cascade fermée pour générer un effet de pompage.

4.2 Calcul stationnaire Boltzmann-BGK en deux dimensions par schéma implicite [9, 10]

Dans cette section, nous résumons le travail effectué en collaboration avec K. Aoki et P. Degond, et soumis pour publication en 2007 [9]. Nous détaillons brièvement la méthode numérique déterministe utilisée pour simuler les écoulements dans les deux systèmes décrits précédemment. A la fin de cette section, nous comparons nos résultats avec ceux obtenus par une simulation stochastique standard. Ces derniers sont tirés du travail effectué en collaboration avec K. Aoki, P. Degond, M. Nishioka, et S. Takata, et présenté en 2006 au 25^e symposium sur les gaz raréfiés [10].

L'équation de Boltzmann étant encore à l'heure actuelle très coûteuse à discrétiser, nous nous sommes restreints au modèle simplifié BGK, ce qui a été justifié par les résultats obtenus (voir en fin de section). Dans ce modèle, le gaz est décrit par la fonction de distribution $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$, où $\mathbf{x} = (x, y, z)$ est la variable de position et $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$ la variable de vitesse, et l'évolution de f est donnée par l'équation cinétique

$$\partial_t f + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \frac{1}{\tau} (M[\rho, \mathbf{u}, 2RT] - f), \quad (4.1)$$

où $M[\rho, \mathbf{u}, 2RT]$ est la distribution d'équilibre Maxwellienne définie par $M[\rho, \mathbf{u}, 2RT] = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp(-\frac{|\mathbf{v}-\mathbf{u}|^2}{2RT})$. Les quantités macroscopiques que sont la densité de masse ρ , la vitesse moyenne \mathbf{u} , et la température T sont définies par

$$(\rho, \rho \mathbf{u}, \frac{1}{2}\rho|\mathbf{u}|^2 + \frac{3}{2}\rho RT)(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} (1, \mathbf{v}, \frac{1}{2}|\mathbf{v}|^2) f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}. \quad (4.2)$$

Dans le cas d'un écoulement plan, f est indépendante de z , et il est alors classique de réduire la complexité de (4.1) par la méthode suivante. On définit les distributions réduites $(F, G)(t, x, y, v_x, v_y) = \int_{\mathbb{R}} (1, \frac{1}{2}v_z^2) f dv_z$, et il est facile de montrer que F et G satisfont le système couplé d'équations cinétiques

$$\partial_t U + v \cdot \nabla_{x,y} U = Q(U), \quad (4.3)$$

où $U = (F, G)$ et $Q(U) = (\frac{1}{\tau}(\mathcal{M}[\rho, u, 2RT] - F), \frac{1}{\tau}(\frac{RT}{2}\mathcal{M}[\rho, u, 2RT] - G))$. Dans cette équation, nous avons noté $v = (v_x, v_y)$ la variable bi-dimensionnelle de vitesse. Par symétrie, la vitesse macroscopique \mathbf{u} n'a pas de composante selon z , et nous notons alors $u = (u_x, u_y)$ ses composantes dans le plan (x, y) . Enfin, $\mathcal{M}[\rho, u, 2RT]$ est la maxwellienne réduite définie par

$$\mathcal{M}[\rho, u, 2RT] = \int_{\mathbb{R}} M[\rho, \mathbf{u}, T] dv_z = \frac{\rho}{2\pi RT} \exp(-\frac{|v-u|^2}{2RT}),$$

et les quantités macroscopiques peuvent être obtenues via F et G par

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^2} F dv, \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}^2} v F dv, \quad T = \frac{1}{\frac{3}{2}\rho R} \int_{\mathbb{R}^2} (\frac{1}{2}|v-u|^2 F + G) dv. \quad (4.4)$$

Pour calculer une approximation de la solution stationnaire de l'équation BGK (4.1), nous avons choisi d'étendre au système réduit (4.3) la méthode que j'ai développée durant ma thèse dans [Mie00a, Mie00b]. Les outils principaux de cette méthode sont :

(a) *discrétisation en vitesse* : avec une grille cartésienne bornée de N_v points $\{v_k\}$, la maxwellienne est alors approchée de façon à préserver les propriétés de conservation et d'entropie de l'opérateur de collision. Les bases mathématiques rigoureuses de cette approximation n'ont pas été étudiées dans [9], mais une telle étude peut se faire facilement à partir de travaux que j'ai effectués antérieurement : existence de l'approximation dans [Mie00a] et [14] (voir aussi chapitre 5), et convergence dans [Mie01]. Dans ce qui suit, nous notons alors U_k et $Q_k(U)$ les approximations correspondantes de $U(v_k)$ et $Q(U)(v_k)$.

(b) *discrétisation en espace* : avec un schéma de type volumes finis décentré sur une grille structurée curviligne de $N_{x,y}$ noeuds $(x, y)_i$. Pour donner une idée simple de ce schéma, nous donnons ci-dessous l'approximation correspondante en une dimension d'espace seulement :

$$\partial_t U_{i,k} + v_k^+ \frac{U_{i,k} - U_{i-1,k}}{\Delta x} + v_k^- \frac{U_{i+1,k} - U_{i,k}}{\Delta x} = Q_k(U_i),$$

où v_k^\pm sont les parties positives et négatives de v_k .

(c) *discrétisation en temps* : avec un schéma implicite linéarisé qui permet de converger rapidement vers la solution stationnaire (avec de grand pas de temps). Avec les notations précédentes, cela s'écrit

$$\frac{U_{i,k}^{n+1} - U_{i,k}^n}{\Delta t} + v_k^+ \frac{U_{i,k}^{n+1} - U_{i-1,k}^{n+1}}{\Delta x} + v_k^- \frac{U_{i+1,k}^{n+1} - U_{i,k}^{n+1}}{\Delta x} = Q_k(U_i^n) + DQ_k(U_i^n)(U_i^{n+1} - U_i^n),$$

où $DQ_k(V)$ est la dérivée de Q_k calculée en V .

(d) *solveur linéaire* : la relation précédente est un système linéaire dont l'inconnue U^{n+1} est un vecteur de $\mathbb{R}^{2N_v N_{x,y}}$. Ce système peut s'écrire sous la forme matricielle

$$\left(\frac{I}{\Delta t} + T + R^n \right) \delta U^n = RHS^n, \quad (4.5)$$

où $\delta U^n = U^{n+1} - U^n$, I est la matrice identité, T est la matrice discrétisant l'opérateur $v \cdot \nabla_{x,y}$, $-R^n$ est la jacobienne de Q_k en U_n , et RHS^n est la matrice discrétisant $-v \cdot \nabla_{x,y} U + Q(U)$ au temps n . Ce système étant de très grande dimension, on ne peut pas l'inverser directement, ni même stocker les matrices correspondantes. Il est alors résolu par un solveur itératif original qui tire parti des structures creuses de T (locale en x, y) et R^n (locale en v).

Par rapport à [Mie00a, Mie00b], l'innovation principale que nous avons proposée dans ce schéma consiste à améliorer le traitement des conditions aux limites (CL). Jusqu'à présent, celles-ci étaient traitées de façon explicite : les coefficients correspondants à ces CL dans la matrice T étaient remplacés par 0, afin de préserver la structure multidiaagonale de cette matrice. Pour accélérer la convergence de notre algorithme, nous avons proposé un traitement

implicite de ces CL par une méthode qui présente les avantages suivants :

- son implémentation ne nécessite qu’une modification minimale du solveur linéaire ;
- le coût de calcul supplémentaire par itération est négligeable ;
- le gain en vitesse de convergence de l’algorithme global est très important.

Une explication détaillée de cette approche nécessitant d’introduire un grand nombre de notations, nous préférons renvoyer à [9] pour ne pas alourdir ce résumé.

A partir de cet algorithme, j’ai écrit le code de calcul CORBIS (COde Raréfié Bidimensionnel Implicite Stationnaire) en Fortan 90. Il utilise l’interface de programmation parallèle OpenMP. Les résultats ci-dessous ont été obtenus sur 6 processeurs du SGI Altix 3700 du groupement CALMIP (voir <http://www.calmip.cict.fr>).

Sur la figure 4.5, on peut voir le champ de vitesse et les lignes de courant obtenus avec ce code pour le canal en forme d’anneau décrit figure 4.3 (p.49). On observe que l’écoulement généré par la paroi courbe l’emporte sur celui de la paroi rectiligne, qui est maintenu dans deux petites zones de recirculation. Un écoulement global est donc bien généré, dans le sens indirect. Sur la figure 4.6, on représente les champs de température, de densité, de pression, et de vitesse obtenus dans le test de pompage décrit figure 4.4 (p.49) avec un canal à 16 unités. On observe bien la différence de pression maintenue entre les deux bouts du canal. Dans la figure 4.7 est donnée une comparaison des résultats obtenus avec le code déterministe CORBIS et ceux obtenus par la méthode DSMC (calculs effectués par M. Nishioka dans [10]) : on constate que même avec un modèle simplifié comme celui de BGK, l’accord avec DSMC (censé simuler l’équation de Boltzmann) est étonnamment bon, du moins pour des canaux de 2 à 8 unités. Notons que pour ce dernier calcul, l’intérêt de notre simulation déterministe est saisissant : elle a nécessité 7 jours de calcul, alors que la simulation DSMC a duré environ 4 mois. Enfin, la figure 4.8 montre l’accélération de la convergence de notre schéma obtenue grace au traitement implicite des CL.

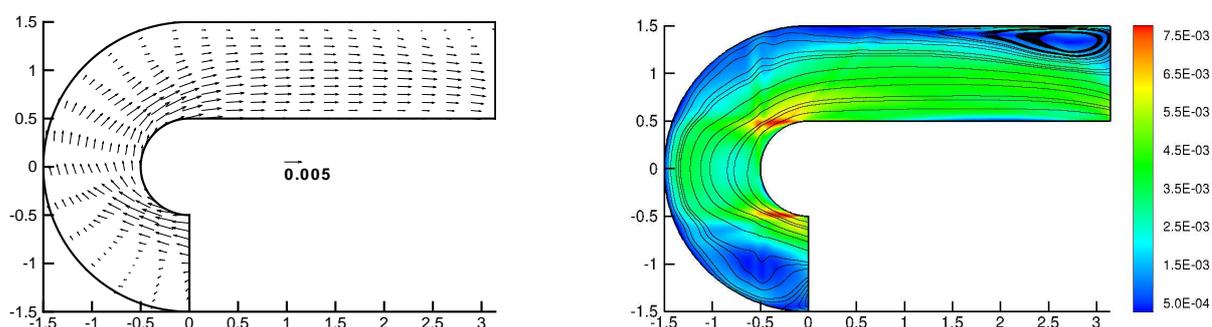


FIG. 4.5 – Champ de vitesse (gauche), lignes de courant et intensité du champ de vitesse (droite) dans la moitié du canal en anneau.

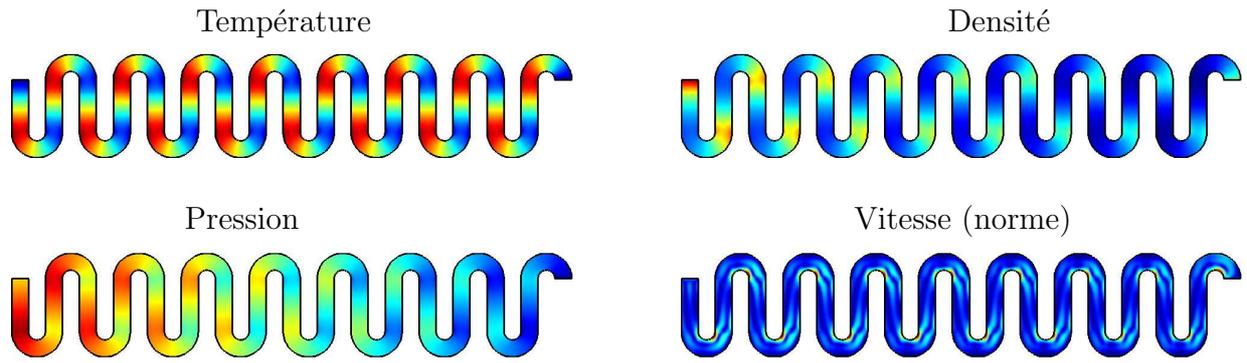


FIG. 4.6 – Champs des quantités macroscopiques dans une pompe à 16 unités.

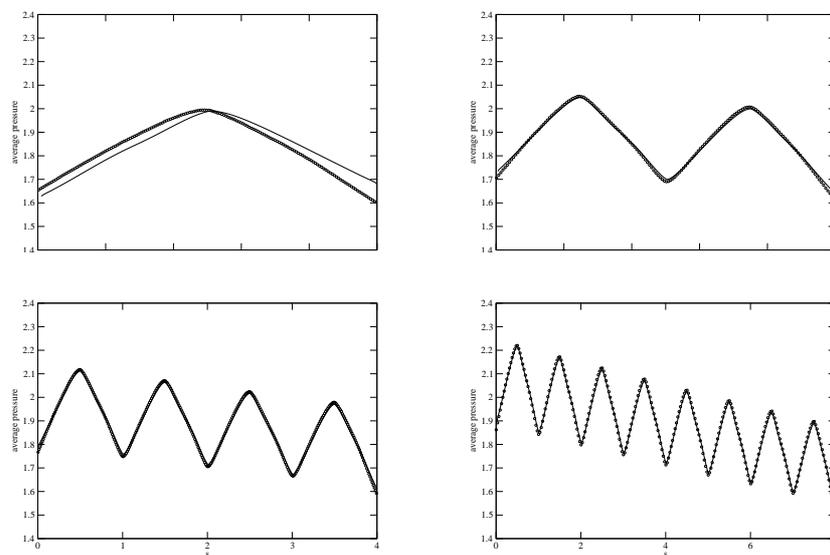


FIG. 4.7 – Comparaison entre BGK (-) et DSMC (o) : pression (moyennée sur une section) le long du canal pour des pompes à 1, 2, 4, et 8 unités.

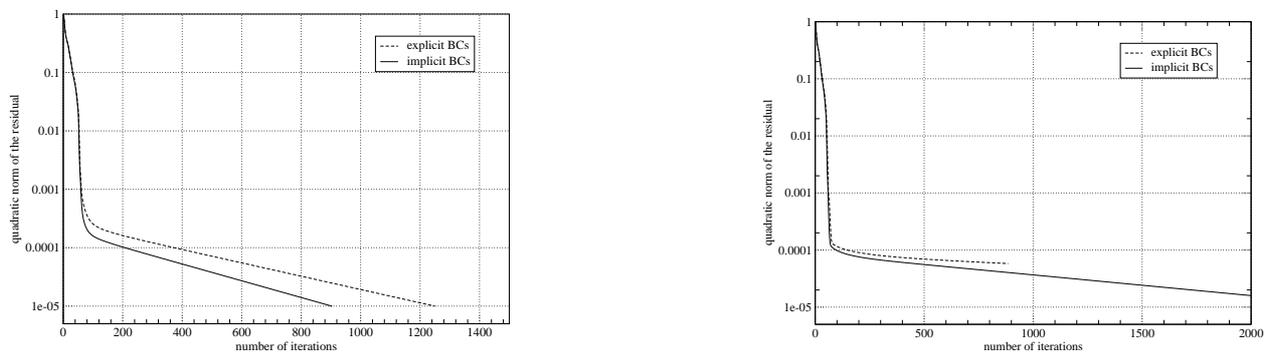


FIG. 4.8 – Convergence vers la solution stationnaire pour un canal à 8 unités (gauche) et 16 unités (droite) pour notre schéma avec CL explicites et implicites.

4.3 Approximation de la diffusion induite par les collisions au bord [11, 12]

Nous présentons ici un travail réalisé en collaboration avec K. Aoki, P. Degond, S. Takata, et H. Yoshida, et accepté en 2007 pour publication dans *SIAM Multiscale Modeling & Simulation*.

Dans l'étude précédente, les coûts de calcul importants limitent nos simulations à des canaux de faible nombre d'unités. Afin d'étudier le comportement de notre compresseur de Knudsen pour des unités plus nombreuses (de l'ordre de 100), une modélisation moins complexe est donc indispensable.

Dans cette section, nous exposons une stratégie consistant à obtenir une approximation macroscopique de l'équation BGK (4.1) dans le cas où la largeur du canal devient faible devant une longueur caractéristique (comme celle d'une unité). Habituellement, la possibilité d'approcher une équation cinétique par une équation de diffusion est due à la structure de l'opérateur de collision : celui-ci fait tendre la distribution vers un état d'équilibre dont le flux de masse est nul, ce qui implique que l'analyse asymptotique doit se faire avec une échelle de temps suffisamment longue pour observer une dynamique intéressante. Dans notre cas, c'est dans une certaine mesure la condition de réflexion à la paroi qui joue ce rôle à la place de l'opérateur de collision : les particules sont réfléchies de façon diffuse, à la température de la paroi, et avec une vitesse nulle en moyenne. Ainsi, quand le canal devient très fin, le flux de masse du gaz devient donc très petit. Ce phénomène a déjà été étudié par Babovsky [Bab86] et Babovski, Bardos et Płatkowski [BBP91] dans le cas d'un gaz sans collisions entre particules, dans un canal rectiligne unidimensionnel. Plus récemment, Aoki et Degond [AD03] ont étendu cette méthode au cas d'un canal rectiligne avec opérateur de collision linéaire pour simplifier l'étude du compresseur de Knudsen proposé dans [SWA96, AST⁺01]. Ici, nous suivons la même stratégie appliquée à notre canal courbe. Par rapport à [AD03], les différences sont les suivantes :

- la géométrie courbe induit une étude du problème en coordonnées curvilignes ;
- l'opérateur de collision est non-linéaire ;
- nous menons cette étude jusqu'à la simulation numérique : les coefficients de diffusion sont tabulés, le modèle de diffusion est discrétisé, puis comparé aux simulations du modèle cinétique complet obtenues dans la section précédente.

Dans la suite, nous détaillons brièvement ces différents points.

Considérons à nouveau l'équation BGK (4.1) étudiée dans la section précédente en précisant que le temps de relaxation est ici égal à $(A_c \rho)^{-1}$ où A_c est une constante. Cette équation est posée dans un domaine plan Ω de frontière courbe et de largeur constante égale à D . En introduisant le système de coordonnées (r, s) défini figure 4.9, l'équation BGK peut se réécrire sous la forme

$$\begin{aligned} \partial_t f + (1 - \kappa r)^{-1} v_s \partial_s f + v_r \partial_r f + \kappa (1 - \kappa r)^{-1} v_r v_s \partial_{v_s} f \\ - \kappa (1 - \kappa r)^{-1} v_s^2 \partial_{v_r} f = A_c \rho (M[\rho, \mathbf{u}, 2RT] - f). \end{aligned} \quad (4.6)$$

où κ est la courbure de la ligne médiane \mathcal{C} du canal, (v_s, v_r) sont les vitesses dans les directions tangentes et normales à \mathcal{C} en s , et $(1 - \kappa r)$ est le jacobien du changement de variable

cartésien/curviligne. La condition de réflexion diffuse aux parois s'écrit

$$f = \pm \frac{1}{2\pi(RT_w)^2} \exp\left(-\frac{\mathbf{v}^2}{2RT_w}\right) \int_{v_r \geq 0} v_r f d\mathbf{v}, \quad \text{pour } v_r \leq 0 \quad \text{en } r = \pm \frac{D}{2}, \quad (4.7)$$

où $T_w(s)$ est la température de la paroi en s .

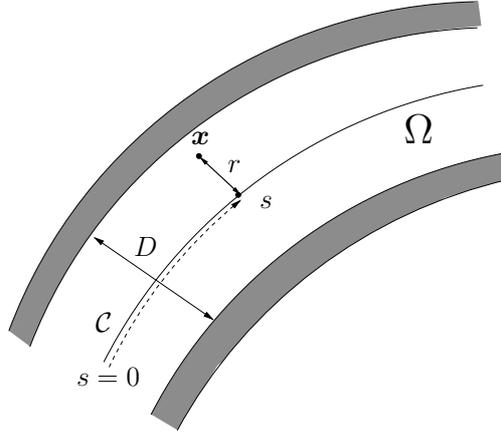


FIG. 4.9 – Canal plan Ω et le système de coordonnées curvilignes associé.

Pour rendre apparente l'hypothèse de faible largeur du canal, nous avons introduit de nouvelles variables adimensionnées avec lesquelles l'équation (4.6) s'écrit

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \partial_t f + \epsilon(1 - \kappa r)^{-1} v_s \partial_s f + v_r \partial_r f + \kappa(1 - \kappa r)^{-1} v_r v_s \partial_{v_s} f \\ - \kappa(1 - \kappa r)^{-1} v_s^2 \partial_{v_r} f = \frac{1}{K_0} \rho(M[\rho, \mathbf{u}, T] - f), \end{aligned} \quad (4.8)$$

où K_0 est le nombre de Knudsen, et la condition aux limites s'exprime maintenant en $r = \pm \frac{1}{2}$. A des constantes près, ce changement de variables revient à poser $t' = \epsilon^2 t$ et $s' = \epsilon s$, où $\epsilon = \frac{D}{L_s}$ est le rapport de la largeur du canal à une longueur caractéristique de variation de T_w et κ .

En intégrant (4.8) sur l'ensemble des vitesses et sur une section du canal, on trouve l'équation de continuité suivante :

$$\partial_t \varrho + \partial_s j = 0, \quad (4.9)$$

où

$$\varrho(s, t) = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{\mathbb{R}^3} f(1 - \kappa r) d\mathbf{v} dr \quad \text{et} \quad j(s, t) = \frac{1}{\epsilon} \int_{-1/2}^{1/2} \int_{\mathbb{R}^3} v_s f d\mathbf{v} dr$$

sont la densité de masse sur la section et le flux de masse à travers la section, divisé par ϵ .

Nous avons tout d'abord déterminé la limite de cette équation quand ϵ tend vers 0. Mentionnons que les résultats de [9] résumés ici sont formels, au sens où nous ne précisons ni hypothèse de régularité, ni cadre fonctionnel.

Théorème 4.1. (i) $f \rightarrow f_{(0)} = \rho_{(0)}(s, t)M[1, 0, T_w(s)]$ quand $\epsilon \rightarrow 0$, où $\rho_{(0)}(s, t)$ est une solution du problème de diffusion non linéaire suivant :

$$\partial_t \rho_{(0)} + \partial_s j_{(1)} = 0, \quad (4.10)$$

$$j_{(1)} = \sqrt{T_w} M_P \partial_s \rho_{(0)} + \frac{\rho_{(0)}}{\sqrt{T_w}} (M_P + M_T) \partial_s T_w, \quad (4.11)$$

où M_P et M_T sont des fonctions non-linéaires de $\rho_{(0)}$ définies par l'intermédiaire d'équations cinétiques linéaires auxiliaires (voir la preuve du théorème).

(ii) Le coefficient de diffusion M_P est négatif ou nul.

(iii) $\rho_{(0)}$ et $j_{(1)}$ sont des approximations du second ordre de la densité ϱ et du flux j associés à f : $\varrho - \rho_{(0)} = O(\epsilon^2)$, $j - j_{(1)} = O(\epsilon^2)$.

Éléments de preuve. Classiquement, nous cherchons une approximation de la solution f sous la forme d'un développement de Hilbert à l'ordre trois $f_{(0)} + \epsilon f_{(1)} + \epsilon^2 f_{(2)} + \epsilon^3 f_{(3)}$. Cette approximation est injectée dans (4.8) et les conditions aux limites associées, puis les termes non linéaires sont développés. Notons alors $Q(f) = \frac{1}{K_0} \rho(M[\rho, \mathbf{u}, T] - f)$ l'opérateur de collision et $DQ^k(f_{(0)})$ ses dérivées successives par rapport à f en $f_{(0)}$, ainsi que les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^0 &= v_r \partial_r + \kappa(1 - \kappa r)^{-1} v_r v_s \partial_{v_s} - \kappa(1 - \kappa r)^{-1} v_s^2 \partial_{v_r} & L &= \mathcal{A}^0 - DQ(f_{(0)}) \\ \mathcal{A}^1 &= (1 - \kappa r)^{-1} v_s \partial_s & \mathcal{A}^2 &= \partial_t. \end{aligned}$$

On trouve alors que l'approximation de Hilbert satisfait (4.8) à ϵ^4 près si $f_{(0)}$, $f_{(1)}$, $f_{(2)}$, et $f_{(3)}$ vérifient

$$\mathcal{A}^0 f_{(0)} = Q(f_{(0)}) \quad (4.12)$$

$$L f_{(1)} = -\mathcal{A}^1 f_{(0)} \quad (4.13)$$

$$L f_{(2)} = \frac{1}{2} D^2 Q(f_{(0)})(f_{(1)}, f_{(1)}) - \mathcal{A}^2 f_{(0)} - \mathcal{A}^1 f_{(1)} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} L f_{(3)} &= D^2 Q(f_{(0)})(f_{(1)}, f_{(2)}) + \frac{1}{6} D^3 Q(f_{(0)})(f_{(1)}, f_{(1)}, f_{(1)}) \\ &\quad - \mathcal{A}^2 f_{(1)} - \mathcal{A}^1 f_{(2)}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

et les conditions aux limites associées.

Pour l'ordre 0 en ϵ (4.12), nous supposons que $f_{(0)}$ est nécessairement donnée par

$$f_{(0)} = \rho_{(0)}(s, t) M_w, \quad (4.16)$$

où la densité $\rho_{(0)}$ est à déterminer et $M_w = M[1, 0, T_w(s)]$. Remarquons que cette hypothèse pourrait se prouver aisément en utilisant les lois de conservation et les inégalités d'entropie et de Darrozès-Guiraud. Noter en outre que le flux de masse correspondant est nécessairement nul, ce qui justifie a posteriori l'échelle de temps choisie.

Pour l'ordre 1 en ϵ (4.13), on peut prouver simplement que l'opérateur linéaire L est inversible sur l'ensemble des fonctions ayant une densité moyenne nulle sur une section du canal. Ainsi, après avoir développé le terme $\mathcal{A}^1 f_{(0)}$, on trouve

$$f_{(1)} = L^{-1} \left(-(1 - \kappa r)^{-1} v_s M_w \right) \partial_s \rho_{(0)} + L^{-1} \left(-(1 - \kappa r)^{-1} v_s M_w \left(\frac{\mathbf{v}^2}{T_w} - \frac{3}{2} \right) \right) \frac{\partial_s T_w}{T_w} \rho_{(0)}. \quad (4.17)$$

En supposant que $f_{(0)} + \epsilon f_{(1)}$ est bien une approximation de f , alors les formules (4.9), (4.16) et (4.17) suffisent pour obtenir la forme de l'équation de diffusion (4.10)–(4.11) : on trouve $j_{(1)} = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{\mathbb{R}^3} v_s f_{(1)} d\mathbf{v} dr$, et les coefficients M_P et M_T sont définis par

$$M_P = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{\mathbb{R}^3} v_s \frac{1}{\sqrt{T_w}} L^{-1} \left(-(1 - \kappa r)^{-1} v_s M_w \right) d\mathbf{v} dr \quad (4.18)$$

$$M_T = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{\mathbb{R}^3} v_s \frac{1}{\sqrt{T_w}} L^{-1} \left(-(1 - \kappa r)^{-1} v_s M_w \left(\frac{\mathbf{v}^2}{T_w} - \frac{5}{2} \right) \right) d\mathbf{v} dr. \quad (4.19)$$

La suite de la démonstration est classique : on calcule $f_{(2)}$ et $f_{(3)}$ de la même façon, puis on montre que, par construction, l'approximation $f_\epsilon = f_{(0)} + \epsilon f_{(1)} + \epsilon^2 f_{(2)} + \epsilon^3 f_{(3)}$ satisfait la même équation que f à l'ordre 2 près, ce qui permet de montrer que f_ϵ approche bien f à l'ordre deux (sous réserve que les termes de reste puissent être convenablement estimés). Les points (i) et (iii) du théorème en découlent. Le point (ii) est essentiellement dû au fait que l'opérateur $\frac{1}{f_{(0)}} DQ(f_{(0)})$ est auto-adjoint semi-négatif dans $L^2(\mathbb{R}^3 dv)$. Dans [9], nous donnons une preuve directe de ce point. \square

Dans [9], les expressions des coefficients M_P et M_T sont données de façon un peu différente : en effet l'inversion de L nécessite de résoudre des problèmes cinétiques stationnaires en une dimension d'espace, ce qui ne peut être fait analytiquement. Nous avons donc choisi de résoudre numériquement ces problèmes, afin de tabuler M_P et M_T . Pour cela, il faut mettre en évidence le nombre minimal de paramètres dont ils dépendent. Nous avons donc introduit les fonctions

$$\begin{aligned} \phi_P(s, r, \zeta, t) &= \frac{1}{M_w} L^{-1} \left(-(1 - \kappa r)^{-1} v_s M_w \right), \\ \phi_T(s, r, \zeta, t) &= \frac{1}{M_w} L^{-1} \left(-(1 - \kappa r)^{-1} v_s M_w \left(\frac{\mathbf{v}^2}{T_w} - \frac{5}{2} \right) \right), \end{aligned}$$

et la variable $\zeta = \mathbf{v}/\sqrt{T_w}$. Ainsi on peut montrer que ϕ_P et ϕ_T sont solutions de problèmes linéaires qui ne dépendent en fait que de deux paramètres : la courbure κ et le nombre de Knudsen local $K = \sqrt{T_w} K_0 / \rho_{(0)}$. Les coefficients M_P et M_T s'écrivent alors $M_P = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{\mathbb{R}^3} \zeta_s \phi_P E d\zeta dr$ et $M_T = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{\mathbb{R}^3} \zeta_s \phi_T E d\zeta dr$ et ils ne dépendent de s que via les paramètres κ et K . Nous avons donc pu les tabuler en résolvant les problèmes linéaires associés à ϕ_P et ϕ_T pour un grand nombre de valeurs de κ et K .

Alors que le signe de M_P n'est pas difficile à obtenir, cela est plus compliqué pour le coefficient de friction $M_P + M_T$. Pourtant, un tel résultat est intéressant car il permet d'obtenir des propriétés de monotonie sur les profils de pression et de densité. Dans [12], en utilisant une version linéarisée du modèle BGK, dans un canal rectiligne, en régime stationnaire, nous avons pu prouver les inégalités suivantes : $M_P \leq 0$, $M_P + M_T \leq 0$, et $M_T \geq 0$. Ceci permet de prouver que les gradients de pression et de température ont le même signe alors que le gradient de densité a un signe opposé.

Nous avons aussi étudié l'approximation de diffusion quand la courbure est discontinue, puisque les canaux présentés section 4.2 présentent bien une discontinuité de courbure à la

jonction entre les parties circulaires et rectilignes. Dans ce cas, nous pouvons effectuer le même développement de Hilbert que précédemment, mais de part et d'autre de la discontinuité (que l'on suppose localisée en $s = 0$). Nous obtenons ainsi deux équations de diffusion pour les densités à gauche et à droite de la discontinuité, que l'on doit coupler par deux conditions de transmission pour que le problème soit bien posé. En effectuant une analyse de couche limite, nous avons pu construire les conditions suivantes

$$\rho_{(0)}|_{s=0^+} = (1 + \epsilon d)\rho_{(0)}|_{s=0^-}, \quad j_{(1)}|_{s=0^+} = j_{(1)}|_{s=0^-},$$

qui sont nécessaires pour préserver l'ordre deux de l'approximation. Nous avons obtenu une formule approchée pour la constante d qui a ainsi pu être tabulée d'une façon analogue à la tabulation des coefficients M_P et M_T .

La résolution numérique de l'équation de diffusion (4.10)–(4.11) en régime stationnaire se fait ensuite avec une méthode différences finies standard. Nous donnons ainsi deux résultats numériques obtenus avec ce modèle asymptotique. Dans la figure 4.10, nous comparons les profils de pression, calculés le long de canaux comportant 1, 2 et 4 unités, à ceux obtenus avec la simulation cinétique déterministe décrite section 4.2. L'accord est visiblement très bon. Après cette validation, nous pouvons utiliser le modèle asymptotique pour calculer le profil de pression dans des canaux à grand nombre d'unités : dans la figure 4.11, nous montrons le résultat obtenu avec 100 unités. On obtient ainsi un accroissement de pression d'un facteur 6, ce qui est considérable. Noter qu'un tel calcul est à l'heure actuelle quasiment impossible à faire avec un code cinétique bi-dimensionnel.

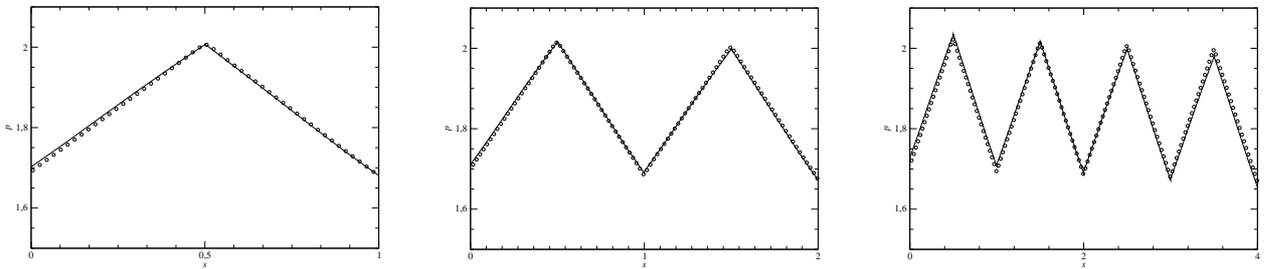


FIG. 4.10 – Pression le long d'un canal de 1, 2, et 4 unités : comparaison modèle de diffusion (-) et simulation BGK bi-dimensionnelle (o).

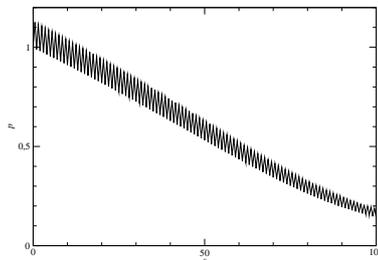


FIG. 4.11 – Pression le long d'un canal de $N = 100$ unités.

4.4 Approximation par un modèle hydrodynamique [13]

Cette section résume le travail effectué en collaboration avec K. Aoki, P. Degond, et C. J. T. Laneryd, et présenté au 25^e symposium sur les gaz raréfiés [13].

Dans [9] et [11], nous avons observé qu’il est difficile de mesurer précisément le glissement thermique quand le nombre de Knudsen est faible. Il est donc naturel de chercher un modèle asymptotique de l’équation BGK stationnaire dans la limite des faibles nombre de Knudsen. Ce genre d’asymptotique a été largement étudié par Sone et ses co-auteurs [Son02] par la technique du développement de Hilbert, associée à des analyses de couches limites. Dans le cas de l’écoulement de glissement thermique, la limite asymptotique a été obtenue par Sone, Aoki, Takata, Sugimoto, et Bobylev [SAT⁺96]. Cette limite ressemble aux équations de Navier-Stokes incompressible mais présente quelques différences : l’équation de quantité de mouvement contient un terme de contrainte thermique, la densité n’est pas constante, et la condition aux limites pour la vitesse est du type glissement. Ces différences sont dues essentiellement à l’hypothèse que le gradient de température est fini.

Nous avons donc effectué des simulations numériques du glissement thermique à partir d’une discrétisation de type volumes finis de ce modèle, avec des tests plus variés que dans les sections précédentes. Nous avons pu constater l’existence d’un écoulement de glissement thermique qui disparaît à la limite Knudsen = 0. Cependant, même à la limite, cet effet a toujours une influence sur la température qui n’est alors pas décrite par l’équation de la chaleur de Navier-Stokes incompressible : c’est un exemple d’effet fantôme (“ghost effect”) abondamment étudié par Sone et ses co-auteurs (voir [Son02]).

4.5 Perspectives

La phase suivante de ce projet de recherche est essentiellement axée sur la simulation d’un compresseur de Knudsen tri-dimensionnel en forme de tube. C’est en pratique plus réaliste, et le comportement d’un tel système peut être assez différent de celui du compresseur plan : par exemple il a été noté dans [AST⁺01] que la résistance à la pression d’un tube est plus importante que celle d’un canal. Cette phase nécessite donc deux parties.

Construction du modèle de diffusion.

Il faut refaire tous les calculs présentés section 4.3 dans le cas d’un domaine Ω tri-dimensionnel de section circulaire constante. On doit à nouveau obtenir un modèle de diffusion uni-dimensionnel.

Calcul des coefficients de transport.

La difficulté essentielle résidera dans le calcul des coefficients M_P et M_T : ceux-ci sont alors définis via des problèmes cinétiques linéaires stationnaires bi-dimensionnels qu’il faut résoudre pour un grand nombre de valeurs des paramètres afin de construire une base de données. Ceci est une tâche très lourde du point de vue coût de calcul. Nous envisageons donc de modifier le code CORBIS décrit section 4.2 pour en faire une version linéaire qui pourrait servir à construire la base de donnée en un temps raisonnable.

Chapitre 5

Etude et construction de quelques modèles cinétiques simplifiés

Ce chapitre rassemble trois travaux que j'ai réalisés entre 1999 et 2004. Ils ont peu de rapport entre eux, hormis le fait de concerner des modèles cinétiques simplifiés, comme le modèle BGK en dynamique des gaz et le modèle SHE des semi-conducteurs. Contrairement aux travaux présentés dans les chapitres précédents, ceux-ci ne constituent pas des projets de recherche à plus long terme, raison pour laquelle ce chapitre ne se conclut pas par des perspectives.

5.1 Discrétisation en vitesse d'un modèle BGK pour la dynamique des gaz polyatomiques [14]

Cette section résume une première étape vers une extension de mon travail de thèse (sur l'équation BGK de la dynamique des gaz raréfiés) au cas des gaz polyatomiques. Ces résultats ont été obtenus en collaboration avec B. Dubroca, et ont été publiés en 1999 dans la revue *ESAIM : proceedings* [14]. Dans cet article, nous avons proposé une discrétisation en vitesse qui respecte les propriétés de conservation et d'entropie pour une équation modélisant les gaz polyatomiques.

Nous considérons le modèle suivant

$$\begin{aligned}\partial_t f + v \cdot \nabla_x f &= \frac{1}{\tau}(M^{tr}[\rho] - f), \\ \partial_t g + v \cdot \nabla_x g &= \frac{1}{\tau}(M^{int}[\rho] - g),\end{aligned}\tag{5.1}$$

où f et g sont les fonctions de distributions de masse et d'énergie interne qui dépendent du temps t , de la position $x \in \mathbb{R}^D$, et de la vitesse $v \in \mathbb{R}^D$. Les distributions d'équilibre translationnel et interne sont définies par

$$M^{tr}[\rho] = M[\rho], \quad M^{int}[\rho] = \frac{\delta}{2}\theta M[\rho],\tag{5.2}$$

et $M[\boldsymbol{\rho}]$ est la maxwellienne usuelle $M[\boldsymbol{\rho}] = \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{D/2}} \exp(-\frac{|v-u|^2}{2\theta})$. Les quantités macroscopiques associées sont la densité ρ , la vitesse u , et la température θ définies par

$$\boldsymbol{\rho} = (\rho, \rho u, \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{D+\delta}{2}\rho\theta) = \langle \mathbf{m}f + \mathbf{e}g \rangle, \quad (5.3)$$

où l'on a noté $\langle \cdot \rangle = \int_{\mathbb{R}^D} \cdot dv$, puis $\mathbf{m}(v) = (1, v, \frac{1}{2}|v|^2)$ et $\mathbf{e} = (0, \dots, 0, 1)$. Le paramètre δ est le nombre de degrés de liberté internes d'une molécule. Ce modèle se déduit d'un modèle BGK avec variable d'énergie interne $\varepsilon(I) = I^{2/\delta}$ (représentant essentiellement l'énergie de rotation de la molécule), après une réduction de variable classique (voir section 4.2 pour une même technique appliquée à la réduction de la variable v_z). Perthame [Per99] a montré que ce système possède l'entropie suivante

$$H(f, g) = \langle f \log \frac{f}{g^{\frac{\delta}{\delta+2}}} - f \rangle. \quad (5.4)$$

Les états d'équilibres locaux du modèle peuvent donc s'interpréter comme les minimiseurs de cette entropie sous la contrainte de réalisation des moments (5.3). En outre, ils peuvent s'écrire sous la forme $M^{tr}[\boldsymbol{\rho}] = \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(v))$ et $M^{int}[\boldsymbol{\rho}] = \frac{\delta}{2}[-\frac{1}{\alpha^{(D+1)}}] \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(v))$ où $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha^{(i)})_{i=0}^{D+1} = \left(\log \left(\frac{\rho}{(2\pi\theta)^{D/2}} \right) - \frac{|u|^2}{2\theta}, \frac{u}{\theta}, -\frac{1}{\theta} \right) \in \mathbb{R}^{D+2}$ est lié aux multiplicateurs de Lagrange de ce problème de minimisation.

Pour la discrétisation en vitesse, nous nous donnons une grille cartésienne de N vitesses v_k et de pas Δv et des approximations $f_{\mathcal{K}} = (f_k)_{k \in \mathcal{K}}$ et $g_{\mathcal{K}} = (g_k)_{k \in \mathcal{K}}$ de f et g sur cette grille. Nous définissons naturellement les approximations des quantités macroscopiques (5.3) par

$$\boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}} = \langle \mathbf{m}f_{\mathcal{K}} + \mathbf{e}g_{\mathcal{K}} \rangle_{\mathcal{K}} = \sum_{k \in \mathcal{K}} (\mathbf{m}f_k + \mathbf{e}g_k) \Delta v^D.$$

Notre problème est donc essentiellement de construire une approximation des maxwelliennes $M^{tr}[\boldsymbol{\rho}]$ et $M^{int}[\boldsymbol{\rho}]$ sur la grille de façon à préserver les propriétés de conservation et d'entropie au niveau discret. En suivant [Mie00a], nous avons proposé de définir ces approximations par la formulation discrète du problème de minimisation d'entropie :

$$(\mathcal{P}_{\mathcal{K}}) \quad H_{\mathcal{K}}(M_{\mathcal{K}}^{tr}[\boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}}], M_{\mathcal{K}}^{int}[\boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}}]) = \min_{\mathcal{X}_{\boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}}}} \left\{ H_{\mathcal{K}}(\tilde{f}, \tilde{g}) = \langle \tilde{f} \log \frac{\tilde{f}}{\tilde{g}^{\frac{\delta}{\delta+2}}} - \tilde{f} \rangle_{\mathcal{K}} \right\}, \quad (5.5)$$

avec $\mathcal{X}_{\boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}}} = \left\{ \tilde{f} \geq 0 \text{ et } \tilde{g} > 0 \in \mathbb{R}^N \text{ t.q. } \langle \mathbf{m}\tilde{f} + \mathbf{e}\tilde{g} \rangle_{\mathcal{K}} = \boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}} \right\}$.

L'essentiel de notre travail a donc consisté à déterminer sous quelles conditions cette approximation est bien définie. Comme on peut le voir dans le théorème suivant, ces conditions sont en fait de deux types : une sur la grille et l'autre sur le vecteur $\boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}}$.

Théorème 5.1. *Soit $\boldsymbol{\rho}_{\mathcal{K}}$ un vecteur de \mathbb{R}^{D+2} . Supposons que la grille \mathcal{V} est telle que*

$$\{\mathbf{m}(v_k), k \in \mathcal{K}\} \text{ est de rang } D + 2, \quad (5.6)$$

alors les assertions suivantes sont équivalentes

(i) le problème $(\mathcal{P}_{\mathcal{K}})$ a une unique solution $(M_{\mathcal{K}}^{tr}[\rho_{\mathcal{K}}], M_{\mathcal{K}}^{int}[\rho_{\mathcal{K}}])$, et il existe un unique vecteur $\alpha_{\mathcal{K}} \in \mathbb{R}^{D+2}$ tel que, pour tout $k \in \mathcal{K}$,

$$M_k^{tr}[\rho_{\mathcal{K}}] = \exp(\alpha_{\mathcal{K}} \cdot \mathbf{m}(v_k)) \quad \text{et} \quad M_k^{int}[\rho_{\mathcal{K}}] = \frac{\delta}{2} \left[-\frac{1}{\alpha_{\mathcal{K}}^{(D+1)}} \right] M_k^{tr}[\rho_{\mathcal{K}}]; \quad (5.7)$$

(ii) $\rho_{\mathcal{K}}$ est strictement réalisable sur \mathcal{V} , i.e.

$$\exists(\tilde{f}, \tilde{g}) \in \mathcal{X}_{\rho_{\mathcal{K}}} \text{ tels que } \tilde{f}, \tilde{g} > 0. \quad (5.8)$$

En pratique, les approximations $(M_{\mathcal{K}}^{tr}[\rho_{\mathcal{K}}], M_{\mathcal{K}}^{int}[\rho_{\mathcal{K}}])$ seront donc données par (5.7) après avoir résolu le système d'équations non-linéaires en $\alpha_{\mathcal{K}}$ que constituent les contraintes de réalisabilité. Ce théorème nous assure l'existence de $\alpha_{\mathcal{K}}$ sous des conditions raisonnables, qui seront par exemple vérifiées si l'on approche l'opérateur de transport du système (5.1) par un schéma explicite standard. Nous obtenons ainsi une discrétisation robuste, conservative, et entropique de (5.1). Nous terminons cette section par une esquisse de preuve du théorème.

Eléments de preuve. Ce résultat est très proche de celui donné dans [Mie00a] dans le cas monoatomique. La démonstration consiste à prouver que la fonctionnelle

$$J(\gamma) = \langle \exp(\gamma \cdot \mathbf{m}) \rangle_{\mathcal{K}} - \gamma \cdot \rho_{\mathcal{K}} - \frac{\delta}{2} \log\left(-\frac{2}{\delta} \gamma^{(D+1)}\right) \rho_{\mathcal{K}}^{(0)},$$

déduite du lagrangien du problème $(\mathcal{P}_{\mathcal{K}})$, admet un unique minimum sur son domaine de définition $\mathcal{D} = \{\gamma \in \mathbb{R}^{D+2}, \quad \gamma^{(D+1)} < 0\}$. Il suffit pour cela de montrer que J est strictement convexe et coercive sur \mathcal{D} .

L'hypothèse sur la grille (5.6) donne facilement la stricte convexité. La coercivité est une conséquence de (5.6) et de la stricte réalisabilité (5.8) de $\rho_{\mathcal{K}}$. Plus précisément pour $\beta \in \mathcal{D}$ et $\omega \in S^{D+1}$, quand on regarde la comportement de J le long du rayon $\{\gamma = \beta + s\omega, s > 0\}$ dans le cas $\omega_{D+1} < 0$, on est amené à comparer les quantités

$$\exp(s\omega \cdot \mathbf{m}(v_k)) \quad \text{et} \quad -s\omega \cdot \rho_{\mathcal{K}}.$$

Les deux hypothèses (5.6) et (5.8) du théorème interviennent dans le cas où $\omega \cdot \mathbf{m}(v_k) \leq 0$ pour tout k . Alors l'hypothèse sur la grille (5.6) implique qu'il existe un k_0 tel que $\omega \cdot \mathbf{m}(v_{k_0}) < 0$ et l'hypothèse de stricte réalisabilité (5.8) implique donc $\omega \cdot \rho_{\mathcal{K}} < 0$ et dans ce cas, la partie polynomiale de J domine les autres termes et tend bien vers l'infini. Les autres cas ne nécessitent pas d'hypothèse et ne posent aucune difficulté.

L'explication ci-dessus ne donne qu'une coercivité "directionnelle" de J : autrement dit J tend vers l'infini sur tout rayon $\{\beta + s\omega, s > 0\}$ quand s croît. Il reste donc à prouver que cette propriété implique la coercivité "usuelle". C'est en fait une propriété générale qui est énoncée dans le lemme suivant :

Lemme 5.1. *Toute fonction J définit sur $\mathcal{D} = \{\gamma \in \mathbb{R}^{D+2}, \quad \gamma^{(D+1)} < 0\}$ qui est continuellement différentiable, convexe et coercive dans chaque direction, est nécessairement coercive dans \mathcal{D} .*

Dans [14], nous avons prouvé ce lemme en utilisant essentiellement une paramétrisation des courbes de niveau de J .

□

5.2 Construction et approximation numérique de modèles BGK à temps de relaxation dépendant de la vitesse moléculaire [15, 16]

Nous résumons ici le travail réalisé avec H. Struchtrup, annoncé en 2004 au 24^e symposium sur les gaz raréfiés [15] et publié en 2004 dans *Physics of Fluids* [16].

Pour la simulation d'écoulements de gaz raréfiés, nous avons proposé des modèles de type BGK avec fréquence de collision dépendant de la vitesse moléculaire qui donnent des coefficients de transport corrects à la limite hydrodynamique. Nous les avons comparés numériquement à des modèles existants : modèle BGK, modèle ellipsoïdal, équation de Boltzmann.

Rappelons tout d'abord la forme de l'équation BGK :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = \nu(M - f)$$

où la maxwellienne M est définie par $M = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp(-\frac{|v-u|^2}{2RT})$ et ρ , u , et T sont les quantités macroscopiques définies par les premiers moments de f par rapport à v . Dans ce modèle, la fréquence de collision ν dépend de ρ et de T uniquement. Il est alors connu que les coefficients de viscosité μ et de conductivité thermique κ (obtenus par développement de Chapman-Enskog) sont tels que le nombre de Prandtl $\text{Pr} = \frac{5}{2} R \frac{\mu}{\kappa}$ vaut 1, alors que la valeur donnée par l'équation de Boltzmann est $\frac{2}{3}$, pour les gaz monoatomiques.

Pour obtenir des modèles de relaxation donnant un nombre de Prandtl correct, l'idée générale est de rajouter un paramètre supplémentaire dans le modèle, de façon à pouvoir ajuster μ et κ indépendamment. Dans le modèle BGK ellipsoïdal (ES-BGK) proposé par Holway [Hol66], ceci est obtenu en remplaçant la maxwellienne M par une gaussienne anisotrope. En suivant Struchtrup [Str97], nous avons considéré dans ce travail une autre stratégie : nous préservons la structure isotrope de M , mais nous autorisons la fréquence de collision à dépendre de la vitesse moléculaire, ce qui est physiquement plus réaliste. Plus précisément, nous considérons des modèles de la forme

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = \nu(E - f)$$

où $\nu = \nu(\rho, T, |v - u|)$ dépend de la vitesse relative $v - u$, et E est une maxwellienne $E = \frac{\hat{\rho}}{(2\pi R\hat{T})^{3/2}} \exp(-\frac{|v-\hat{u}|^2}{2R\hat{T}})$ dont les paramètres $\hat{\rho}$, \hat{u} , et \hat{T} sont définis de façon à respecter les propriétés de conservation. Noter qu'ils sont a priori différents de ρ , u et T . Pourtant, si ces paramètres existent, nous avons alors prouvé que ce modèle satisfait aussi la propriété d'entropie.

Par un développement de Chapman-Enskog, nous avons montré que le nombre de Prandtl associé à ce modèle est

$$\text{Pr} = \frac{\int \frac{\eta^6}{\nu(\eta)} e^{-\eta^2} d\eta}{\int \frac{\eta^4 (\eta^2 - \frac{5}{2})^2}{\nu(\eta)} e^{-\eta^2} d\eta},$$

où $\eta = \frac{1}{\sqrt{2RT}}(v - u)$. En choisissant des fonctions $\nu(\eta)$ dépendant de deux paramètres, il est alors possible de rendre Pr égal à $\frac{2}{3}$. En introduisant la notation $\hat{\nu} = \frac{\mu}{\rho RT}\nu$, nous avons ainsi construit cinq exemples simples de fréquences qui satisfont cette contrainte :

$$\begin{aligned}\hat{\nu}_1(\eta) &= 0.431587 \eta^{1.791288}, & \hat{\nu}_2(\eta) &= 0.0268351 (1 + 14.2724\eta^2), \\ \hat{\nu}_3(\eta) &= 0.0365643 (1 + 10\eta^{2.081754}), & \hat{\nu}_4(\eta) &= 0.1503991 (1 + 0.92897\eta^4),\end{aligned}$$

et $\hat{\nu}_5(\eta) = (0.2590894 \text{ si } \eta \leq 1.2, \text{ et } 0.8288236 \text{ sinon})$. Notons qu'utiliser dans notre modèle la fréquence de collision obtenue pour l'équation de Boltzmann avec potentiel des sphères dures $\nu_{HS}(\eta) = c(e^{-\eta^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2}(\frac{1}{\eta} + 2\eta)\text{erf}\eta)$ ne donne pas le bon nombre de Prandtl.

En adaptant la méthode numérique que j'ai proposée dans [Mie00a, Mie00b], nous avons testé ces différents modèles sur les cas classiques de l'écoulement de Couette (lent et rapide) et du choc stationnaire (Mach=1.4 à 8) pour des régimes transitionnel (Knudsen= 10^{-2}) à raréfié (Knudsen=1), en les comparant aux modèles BGK, ES-BGK, et à l'équation de Boltzmann simulée par méthode DSMC [Bir94]. Les conclusions de cette étude sont assez contrastées :

- pour le régime transitionnel, tous les modèles à bon nombre de Prandtl donnent des résultats proches de DSMC, ce qui n'est pas le cas de BGK ;
- pour le régime raréfié, les modèles BGK à fréquences de collision dépendant de la vitesse donnent des résultats assez différents de DSMC, alors que BGK et ES-BGK semblent meilleurs.

Il aurait été intéressant de travailler plus profondément sur la structure de cette fréquence de collision : par exemple il semble que les fonctions que nous avons choisies ici surestiment la fréquence des collisions de particules rapides, et au contraire sous-estiment celle des particules lentes. Ce travail a été néanmoins poursuivi par Struchtrup et Zheng [ZS05] qui ont combiné le modèle BGK-ES et l'idée de fréquence dépendant de la vitesse : les résultats obtenus sont bien meilleurs dans ce cas.

5.3 Comparaison numérique d'une équation cinétique et de deux modèles S.H.E [17]

Nous résumons ici le travail effectué en collaboration avec J.-P. Bourgade et A. Mellet, et publié dans *Mathematical and Computer Modeling* en 2004 [17].

Dans les semi-conducteurs, il existe des situations où les collisions des particules avec le milieu sont majoritairement élastiques. Dans ce cas, les techniques d'analyse asymptotique montrent que l'approximation de diffusion du problème est une équation intermédiaire entre l'équation cinétique et l'équation de dérive-diffusion usuelle. Cette approximation (appelée Spherical Harmonics Expansion, ou SHE, car elle peut être obtenue par un développement en harmoniques sphériques de l'équation de Boltzmann) est une équation de diffusion dont l'inconnue est une fonction dépendant de l'énergie des particules.

Ce type de modèle est souvent employé car il donne en général de très bonnes approximations de la solution cinétique. Afin d'améliorer la validité de ce modèle dans les régimes de

collision plus inélastiques, Degond [Deg01] en a proposé une version modifiée appelée modèle SHE couplé en énergie. Ce modèle n'avait jamais été validé jusqu'à notre étude.

Dans [17], nous avons donc présenté une comparaison numérique des deux modèles SHE existants avec une équation cinétique de type Boltzmann linéaire, dans une situation très simplifiée : une dimension en espace et en vitesse, sans force extérieure. Nous présentons rapidement ci-dessous ces différents modèles et les conclusions que nous avons tirés de notre étude.

Le modèle cinétique considéré, avec une échelle de diffusion, est

$$\begin{aligned} \partial_t f + \frac{1}{\varepsilon} v \partial_x f &= \frac{1}{\varepsilon^2} Q(f), \quad x \in [0, 1] \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} (1 - \beta) Q_{el}^0(f) + \frac{1}{\varepsilon^2} \beta Q_{in}(f), \end{aligned} \quad (5.9)$$

avec des conditions aux limites standards. Le paramètre β mesure l'importance relative des collisions élastiques et inélastiques modélisées par les opérateurs

$$Q_{el}^0(f) = \nu([f] - f), \quad \text{et} \quad Q_{in}(f) = \nu(\langle f \rangle M - f),$$

où $[f](v) = (f(v) + f(-v))/2$, $\langle f \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(v) dv$, et $M(v) = c \exp(-\frac{m|v|^2}{2kT})$.

L'opérateur Q_{in} pouvant s'écrire aussi sous la forme $\nu \int (f(v')M(v) - f(v)M(v')) dv'$, on peut voir que le mécanisme microscopique de la collision modélisée par cet opérateur consiste à transformer la vitesse v en la vitesse v' . L'obtention de l'un ou l'autre des modèles SHE est alors basée sur l'observation suivante : on peut décomposer cette collision de *deux façons différentes* en une collision élastique (qui conserve le module de v) et une collision inélastique. En effet, en notant que $v = s\sqrt{2\mathcal{E}}$, où $\mathcal{E} = |v|^2/2$ est l'énergie et $s = \text{signe}(v)$ est la "direction" de v , alors on peut décomposer la collision $v \rightarrow v'$ en

$$v = (\mathcal{E}, s) \xrightarrow[\text{locale}]{\text{coll. élastique}} (\mathcal{E}, s') \xrightarrow{\text{coll. inélastique}} (\mathcal{E}', s') = v',$$

ou par

$$v = (\mathcal{E}, s) \xrightarrow{\text{coll. inélastique}} (\mathcal{E}', s) \xrightarrow[\text{non locale}]{\text{coll. élastique}} (\mathcal{E}', s') = v',$$

où la dénomination "locale/non locale" pour la collision élastique met en valeur le fait que la collision est locale ou non en \mathcal{E} .

Ainsi, la première décomposition revient à écrire Q_{in} de la façon suivante :

$$\begin{aligned} Q_{in}(f) &= \nu([f] - f) + \nu(\langle f \rangle M - [f]) \\ &= Q_{el}^0(f) + Q_{in}^0(f). \end{aligned}$$

Si on suppose β de l'ordre de ε^2 ($\beta = \varepsilon^2 \tilde{\beta}$), l'équation (5.9) s'écrit donc

$$\partial_t f + \frac{1}{\varepsilon} v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon^2} Q_{el}^0(f) + \tilde{\beta} Q_{in}^0(f),$$

et nous montrons qu'elle donne à la limite $\varepsilon = 0$ le modèle SHE suivant :

$$\begin{aligned} \partial_t F + \partial_x J &= \nu \tilde{\beta} (\langle F \rangle M - F), \\ J &= -\frac{\sqrt{2\mathcal{E}}}{\nu} \partial_x F, \end{aligned}$$

où F ne dépend que de \mathcal{E} . L'intérêt d'un tel modèle apparaît vraiment en plusieurs dimensions, puisque l'inconnue F dépend d'une variable d'énergie scalaire alors que f dépend d'une variable de vitesse à trois dimensions.

La deuxième décomposition revient à écrire Q_{in} sous la forme :

$$\begin{aligned} Q_{in}(f) &= \nu \left(\langle f \rangle M - 2 \int_0^\infty f(sv') dv' \right) + \nu \left(2 \int_0^\infty f(sv') dv' - f \right) \\ &= Q_{el}^1(f) + Q_{in}^1(f). \end{aligned}$$

Cette décomposition est ensuite combiné de façon convexe avec la précédente pour donner

$$\begin{aligned} Q &= ((1 - \alpha\beta)Q_{el}^0 + \alpha\beta Q_{el}^1) + \beta((1 - \alpha)Q_{in}^0 + \alpha Q_{in}^1), \\ &= Q_{el}^\alpha + \beta Q_{in}^\alpha. \end{aligned}$$

En supposant que la partie inélastique est d'ordre deux en ε , l'équation (5.9) s'écrit donc

$$\partial_t f + \frac{1}{\varepsilon} v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon^2} Q_{el}^\alpha(f) + \tilde{\beta} Q_{in}^\alpha(f),$$

et nous montrons qu'elle donne à la limite $\varepsilon = 0$ le modèle SHE couplé

$$\begin{aligned} \partial_t F + \partial_x J &= \nu \tilde{\beta} (\langle F \rangle M - F), \\ J(\mathcal{E}) &= -D_{\alpha\beta}(\mathcal{E}) \partial_x F(\mathcal{E}) - \langle \Delta_{\alpha\beta}(\mathcal{E}, \cdot) \partial_x F \rangle \end{aligned}$$

où les coefficients $D_{\alpha\beta}$ et $\Delta_{\alpha\beta}$ peuvent être calculés explicitement. L'opérateur de diffusion est ici non-local en énergie, ce qui est dû à l'opérateur de collision élastique utilisé qui couple lui-aussi les différentes énergies.

Nous avons donc discrétisé ces trois modèles avec des méthodes numériques standards, et effectué des tests numériques pour différents régimes de collisions. Nous avons constaté les faits suivants :

- de façon générale, les modèles SHE et SHE couplé sont tous les deux très proches de Boltzmann, des régimes quasi-élastiques jusqu'à des régimes inélastiques, même pour des temps plus petits que l'échelle de diffusion ;
- dans certains régimes, le modèle SHE couplé apporte une précision supplémentaire.

En conclusion, ces deux modèles fournissent de très bonnes descriptions du modèle physique, dans des régimes plus larges que ne le laissent penser les hypothèses du développement asymptotique. Néanmoins, ce résultat mériterait d'être confronté à des études plus réalistes, en dimension deux ou trois, avec force extérieure.

Liste des publications

Chapitre 1.

Schémas implicites en temps pour l'équation de Landau

- [1] M. Lemou et L. Mieussens. Fast implicit schemes for the Fokker-Planck-Landau equation. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 338(10) :809–814, 2004.
La note [1] annonce [2].
- [2] M. Lemou et L. Mieussens. Implicit schemes for the Fokker-Planck-Landau equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 27(3) :809–830, 2005.
- [3] M. Lemou et L. Mieussens. Time implicit schemes and fast approximations of the Fokker-Planck-Landau equation. *Bull. Inst. Math. Acad. Sin.*, 2(2) :533–567, 2007.
L'article [3] reprend en partie [2].

Chapitre 2.

Méthodes de couplage cinétique-fluide

- [4] P. Degond, S. Jin, et L. Mieussens. A smooth transition model between kinetic and hydrodynamic equations. *J. Comput. Phys.*, 209(2) :665–694, 2005.
- [5] P. Degond, G. Dimarco, et L. Mieussens. A moving interface method for dynamic kinetic-fluid coupling. *J. Comput. Phys.*, à paraître.
- [6] P. Degond, J.-G. Liu, et L. Mieussens. Macroscopic fluid models with localized kinetic upscaling effects. *SIAM Multiscale Model. Simul.*, 5(3) :940–979, 2006.

Chapitre 3.

Méthodes numériques pour équations cinétiques préservant l'asymptotique fluide

- [7] M. Bennoune, M. Lemou, et L. Mieussens. Uniformly stable numerical schemes for the Boltzmann equation preserving compressible Navier-Stokes asymptotics. *J. Comput. Phys.*, à paraître.
- [8] M. Lemou et L. Mieussens. A new asymptotic preserving scheme based on micro-macro formulation for linear kinetic equations in the diffusion limit. *SIAM J. Sci. Comput.*, à paraître.

Chapitre 4.**Modélisation et calcul numérique pour un problème de micro-fluidique**

- [9] K. Aoki, P. Degond, et L. Mieussens. Numerical simulations of rarefied gases in curved channels : thermal creep, circulating flow, and pumping effect. Soumis (2007).
- [10] K. Aoki, P. Degond, L. Mieussens, M. Nishioka, et S. Takata. Numerical simulation of a Knudsen pump using the effect of curvature of the channel. In M. S. Ivanov and A. K. Rebrov, editors, *Rarefied Gas Dynamics*, pages 1079–1084. Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 2007.
- [11] K. Aoki, P. Degond, L. Mieussens, S. Takata, et H. Yoshida. A diffusion model for rarefied flows in curved channels. *SIAM Multiscale Model. Simul.*, à paraître.
- [12] L. Mieussens. A note on pressure and density profiles of flows induced by the thermal creep in straight channels.
Cette note n'a pour l'instant pas été soumise pour publication.
- [13] C. J. T. Laneryd, K. Aoki, P. Degond, et L. Mieussens. Thermal creep of a slightly rarefied gas through a channel with curved boundary. In M. S. Ivanov and A. K. Rebrov, editors, *Rarefied Gas Dynamics*, pages 1111–1116. Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 2007.

Chapitre 5.**Etude et construction de quelques modèles cinétiques simplifiés**

- [14] B. Dubroca et L. Mieussens. A conservative and entropic discrete-velocity model for rarefied polyatomic gases. In *CEMRACS 1999 (Orsay)*, volume 10 of *ESAIM Proc.*, pages 127–139 (electronic). Soc. Math. Appl. Indust., Paris, 1999.
- [15] L. Mieussens et H. Struchtrup. Numerical solutions for the BGK-model with velocity-dependent collision frequency. *Rarefied Gas Dynamics : 23rd International Symposium, AIP Conference Proceedings*, volume 663, pages 320–327, 2003.
L'article [15] annonce [16].
- [16] L. Mieussens et H. Struchtrup. Numerical comparison of Bathnagar–Gross–Krook models with proper Prandtl number. *Physics of Fluids*, 16(8) :2797–2813, 2004.
- [17] J.-P. Bourgade, A. Mellet, et L. Mieussens. Numerical comparison between two spherical harmonics expansion models and a kinetic equation. *Math. Comput. Modelling*, 40(7-8) :777–795, 2004.

Bibliographie

- [AD03] K. Aoki and P. Degond. Homogenization of a flow in a periodic channel of small section. *Multiscale Model. Simul.*, 1(2) :304–334, 2003.
- [AL03] X. Antoine and M. Lemou. Wavelet approximation of a collision operator in kinetic theory. *C.R Acad. Sci., Ser. I(337)*, 2003.
- [AST⁺01] K. Aoki, Y. Sone, S. Takata, K. Takahashi, and G. A. Bird. One-way flow of a rarefied gas induced in a circular pipe with a periodic temperature distribution. In Timothy J. Bartel and Michael A. Gallis, editors, *Rarefied gas dynamics, Vol 1 : 22nd International Symposium*, volume 585, pages 940–947. AIP, 2001.
- [Bab86] H. Babovsky. On Knudsen flows within thin tubes. *J. Statist. Phys.*, 44(5-6) :865–878, 1986.
- [BAD96] N. Ben Abdallah and P. Degond. On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors. *J. Math. Phys.*, 37(7) :3306–3333, 1996.
- [BBP91] H. Babovsky, C. Bardos, and T. Płatkowski. Diffusion approximation for a Knudsen gas in a thin domain with accommodation on the boundary. *Asymptotic Anal.*, 3(4) :265–289, 1991.
- [BC99] C. Buet and S. Cordier. Numerical analysis of conservative and entropy schemes for the Fokker-Planck-Landau equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 36(3) :953–973, 1999.
- [BC02] C. Buet and S. Cordier. Numerical analysis of the isotropic Fokker-Planck-Landau equation. *J. Comput. Phys.*, 179(1) :43–67, 2002.
- [BGL91] C. Bardos, F. Golse, and D. Levermore. Fluid dynamic limits of kinetic equations. I. Formal derivations. *J. Statist. Phys.*, 63(1-2) :323–344, 1991.
- [Bir94] G.A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications, 1994.
- [BKP87] Y. A. Berezin, V. N. Khudick, and M. S. Pekker. Conservative finite-difference schemes for the Fokker-Planck equation not violating the law of an increasing entropy. *J. Comput. Phys.*, 69(1) :163–174, 1987.
- [BM02] G. Bal and Y. Maday. Coupling of transport and diffusion models in linear transport theory. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 36(1) :69–86, 2002.
- [BTT96] J.-F. Bourgat, P. Le Tallec, and M. D. Tidriri. Coupling Boltzmann and Navier-Stokes equations by friction. *J. Comput. Phys.*, 127 :227–245, 1996.
- [Caf80] R. E. Caflisch. The fluid dynamic limit of the nonlinear Boltzmann equation. *Comm. Pure Appl. Math.*, 33(5) :651–666, 1980.

- [CBKM00] L. Chacón, D. C. Barnes, D. A. Knoll, and G. H. Miley. An implicit energy-conservative 2D Fokker-Planck algorithm. II. Jacobian-free Newton-Krylov solver. *J. Comput. Phys.*, 157(2) :654–682, 2000.
- [CP91] F. Coron and B. Perthame. Numerical Passage from Kinetic to Fluid Equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 28(1) :26–42, 1991.
- [Deg01] P. Degond. An infinite system of diffusion equations arising in transport theory : the coupled spherical harmonics expansion model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 11(5) :903–932, 2001.
- [DJ05] P. Degond and S. Jin. A smooth transition model between kinetic and diffusion equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 42(6) :2671–2687, 2005.
- [DL01] P. Degond and M. Lemou. On the viscosity and thermal conduction of fluids with multivalued internal energy. *Eur. J. Mech. B Fluids*, 20(2) :303–327, 2001.
- [DO05] K. Domelevo and P. Omnes. A finite volume method for the Laplace equation on almost arbitrary two-dimensional grids. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 39(6) :1203–1249, 2005.
- [DP] G. Dimarco and L. Pareschi. Hybrid multiscale methods II. Kinetic Equations. submitted.
- [DS99] P. Degond and C. Schmeiser. Kinetic boundary layers and fluid-kinetic coupling in semiconductors. *Transport Theory Statist. Phys.*, 28(1) :31–55, 1999.
- [GJL03] F. Golse, S. Jin, and C. D. Levermore. A domain decomposition analysis for a two-scale linear transport problem. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(6) :869–892, 2003.
- [GPT97] E. Gabetta, L. Pareschi, and G. Toscani. Relaxation Schemes for Non Linear Kinetic Equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(6) :2168–2194, 1997.
- [Hol66] L. H. Holway. Kinetic theory of shock structure using an ellipsoidal distribution function. In New York Academic Press, editor, *Rarefied Gas Dynamics, Vol. 1 (Proc. Fourth Internat. Sympos. Univ. Toronto, 1964)*, pages 193–215, 1966.
- [Jin99] S. Jin. Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(2) :441–454, 1999.
- [JP00] S. Jin and L. Pareschi. Discretization of the multiscale semiconductor Boltzmann equation by diffusive relaxation schemes. *J. Comput. Phys.*, 161(1) :312–330, 2000.
- [JP01] S. Jin and L. Pareschi. Asymptotic-preserving (AP) schemes for multiscale kinetic equations : a unified approach. In *Hyperbolic problems : theory, numerics, applications, Vol. I, II (Magdeburg, 2000)*, volume 141 of *Internat. Ser. Numer. Math.*, 140, pages 573–582. Birkhäuser, Basel, 2001.
- [JPT98] S. Jin, L. Pareschi, and G. Toscani. Diffusive relaxation schemes for multiscale discrete-velocity kinetic equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(6) :2405–2439, 1998.
- [JPT00] S. Jin, L. Pareschi, and G. Toscani. Uniformly accurate diffusive relaxation schemes for multiscale transport equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 38(3) :913–936, 2000.

- [Kla98a] A. Klar. Asymptotic-induced domain decomposition methods for kinetic and drift diffusion semiconductor equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(6) :2032–2050, 1998.
- [Kla98b] A. Klar. An asymptotic-induced scheme for nonstationary transport equations in the diffusive limit. *SIAM J. Numer. Anal.*, 35(3) :1073–1094, 1998.
- [Kla99a] A. Klar. An asymptotic preserving numerical scheme for kinetic equations in the low Mach number limit. *SIAM J. Numer. Anal.*, 36(5) :1507–1527, 1999.
- [Kla99b] A. Klar. A numerical method for kinetic semiconductor equations in the drift-diffusion limit. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(5) :1696–1712, 1999.
- [KNS00] A. Klar, H. Neunzert, and J. Struckmeier. Transition from kinetic theory to macroscopic fluid equations : a problem for domain decomposition and a source for new algorithms. *Transport Theory Statist. Phys.*, 29(1-2) :93–106, 2000.
- [Knu09] M. Knudsen. Eine revision der gleichgewichtsbedingung der gase. *Annalen der Physik*, 336(1) :205–229, 1909.
- [KS98] A. Klar and N. Siedow. Boundary layers and domain decomposition for radiative heat transfer and diffusion equations : applications to glass manufacturing process. *European J. Appl. Math.*, 9(4) :351–372, 1998.
- [KU02] A. Klar and A. Unterreiter. Uniform stability of a finite difference scheme for transport equations in diffusive regimes. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40(3) :891–913, 2002.
- [Lem98] M. Lemou. Multipole expansions for the Fokker-Planck-Landau operator. *Numer. Math.*, 78(4) :597–618, 1998.
- [Lev96] C.D. Levermore. Moment Closure Hierarchies for Kinetic Theories. *J. Stat. Phys.*, **83** :1021–1065, 1996.
- [Max79] J. C. Maxwell. On stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 170 :231–256, 1879.
- [MD94] J. C. Mandal and S. M. Deshpande. Kinetic flux vector splitting for Euler equations. *Comput. & Fluids*, 23(2) :447–478, 1994.
- [Mie00a] L. Mieussens. Discrete Velocity Model and Implicit Scheme for the BGK Equation of Rarefied Gas Dynamics. *Math. Models and Meth. in Appl. Sci.*, 8(10) :1121–1149, 2000.
- [Mie00b] L. Mieussens. Discrete-velocity models and numerical schemes for the Boltzmann-BGK equation in plane and axisymmetric geometries. *J. Comput. Phys.*, 162 :429–466, 2000.
- [Mie01] L. Mieussens. Convergence of a discrete-velocity model for the Boltzmann-BGK equation. *Comput. Math. Appl.*, 41(1-2) :83–96, 2001.
- [OSA89] T. Ohwada, Y. Sone, and K. Aoki. Numerical analysis of the shear and thermal creep flows of a rarefied gas over a plane wall on the basis of the linearized boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys. Fluids A*, 1 :1588–1599, 1989.

- [Per99] B. Perthame. An introduction to kinetic schemes for gas dynamics. In *An introduction to recent developments in theory and numerics for conservation laws (Freiburg/Littenweiler, 1997)*, volume 5 of *Lect. Notes Comput. Sci. Eng.*, pages 1–27. Springer, Berlin, 1999.
- [PRT00] L. Pareschi, G. Russo, and G. Toscani. Fast spectral methods for the Fokker-Planck-Landau collision operator. *J. Comput. Phys.*, 165(1) :216–236, 2000.
- [Qiu93] Y. Qiu. *Étude des équations d’Euler et de Boltzmann et de leur couplage. Application à la simulation numérique d’écoulements hypersoniques de gaz raréfiés*. Institut National de Recherche en Informatique et en Automatique (INRIA), Rocquencourt, 1993. Thèse, Université Paris VI, Paris, 1993.
- [Rey79] O. Reynolds. On certain dimensional properties of matter in the gaseous state. Part I and II. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 170 :727–845, 1879.
- [Saa03] Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, second edition, 2003.
- [SAT⁺96] Y. Sone, K. Aoki, S. Takata, H. Sugimoto, and A. V. Bobylev. Inappropriateness of the heat-conduction equation for description of a temperature field of a stationary gas in the continuum limit : Examination by asymptotic analysis and numerical computation of the Boltzmann equation. *Physics of Fluids*, 8(2) :628–638, 1996.
- [Sch96] J. Schneider. Direct coupling of fluid and kinetic equations. *Transport Theory Statist. Phys.*, 25(6) :681–698, 1996.
- [Son66] Y. Sone. Thermal creep in rarefied gas. *J. Phys. Soc. Jpn*, 21 :1836–1837, 1966.
- [Son02] Y. Sone. *Kinetic theory and fluid dynamics*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2002.
- [SS00] Y. Sone and K. Sato. Demonstration of a one-way flow of a rarefied gas induced through a pipe without average pressure and temperature gradients. *Physics of Fluids*, 12(7) :1864–1868, 2000.
- [Str97] H. Struchtrup. The BGK-Model with Velocity-Dependent Collision Frequency. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 9 :23–31, 1997.
- [SWA96] Y. Sone, Y. Waniguchi, and K. Aoki. One-way flow of a rarefied gas induced in a channel with a periodic temperature distribution. *Physics of Fluids*, 8(8) :2227–2235, 1996.
- [TM97] P. Le Tallec and F. Mallinger. Coupling Boltzmann and Navier-Stokes equations by half fluxes. 136 :51–67, 1997.
- [ZS05] Y. Zheng and H. Struchtrup. Ellipsoidal statistical Bhatnagar-Gross-Krook model with velocity-dependent collision frequency. *Phys. Fluids*, 17(12) :127103, 17, 2005.