



**HAL**  
open science

## Une introduction au schéma de Boltzmann sur réseau

François Dubois

► **To cite this version:**

François Dubois. Une introduction au schéma de Boltzmann sur réseau. ESAIM: Proceedings, 2007, 18, pp.181-215. <10.1051/proc:071815>. <hal-03178676>

**HAL Id: hal-03178676**

**<https://hal.science/hal-03178676v1>**

Submitted on 27 Feb 2024

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

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



HAL Authorization

## UNE INTRODUCTION AU SCHÉMA DE BOLTZMANN SUR RÉSEAU \*

FRANCOIS DUBOIS<sup>1</sup>

**Abstract.** We propose an elementary introduction to the lattice Boltzmann scheme. We recall the physical (Boltzmann equation) and algorithmic (cellular automata) origins of this numerical method. For a one-dimensional example, we present in detail the two characteristic steps of the algorithm: the nonlinear collision step, local in space and the linear propagation phase with the neighbouring vertices, explicit in time. We then propose a generic Taylor-type development with the so-called equivalent partial differential equation. We obtain in this way formally a so-called Chapman-Enskog development where the small parameter is the discretization step of the scheme. At order zero, the lattice Boltzmann scheme satisfies a local thermodynamical equilibrium. At first order, it satisfies the Euler equations of gas dynamics and at second order the Navier-Stokes equations. Then we detail the classical case of the nine velocities model on a square lattice.

**Résumé.** Nous proposons une introduction élémentaire au schéma de Boltzmann sur réseau. Nous rappelons les origines physiques (équation de Boltzmann) et algorithmiques (automates cellulaires) de cette méthode numérique. Pour un exemple monodimensionnel, nous présentons en détail les étapes caractéristiques de l'algorithme : phase de collision, locale en espace et non linéaire et phase de propagation avec les proches voisins, explicite en temps et linéaire. Nous proposons ensuite un développement de Taylor générique à l'aide de la méthode de l'équation aux dérivées partielles équivalente. Nous obtenons ainsi de manière formelle un développement "de type Chapman-Enskog" du schéma où le petit paramètre est simplement le pas de discrétisation. A l'ordre zéro, le gaz sur réseau est à l'équilibre thermodynamique, à l'ordre un, il vérifie les équations d'Euler de la dynamique des gaz et à l'ordre deux les équations de Navier Stokes. Enfin, nous détaillons le cas classique du modèle à neuf vitesses sur une grille carrée.

---

\* Ces notes rédigées sont, à des variantes minimales près, la présentation effectuée lors d'un "mini-cours" les 22 et 23 avril 2005, dans le cadre du "Groupe de Travail Numérique" de l'équipe "Analyse Numérique et Equations aux Dérivées Partielles" de l'Université Paris-Sud, animé par Stéphane Labbé. Le contenu scientifique de ce travail est issu de façon plus qu'essentielle de conversations approfondies avec Pierre Lallemand. L'auteur est heureux de lui rendre ici hommage et lui témoigner toute son amitié. L'auteur remercie également Antoinette Barbot pour sa prise en charge majeure de la dactylographie en janvier 2006. Enfin, les remarques pertinentes du Rapporteur ont permis d'améliorer le texte à plusieurs reprises. [Versailles, 21 novembre 2006].

<sup>1</sup> Conservatoire National des Arts et Métiers, Département de Mathématiques, 292 rue Saint Martin, 75141 Paris Cedex 03 et Université Paris Sud, Laboratoire de Mathématique, Analyse Numérique et Équations aux Dérivées Partielles, Bâtiment 425, 91405 Orsay, France.

## INTRODUCTION

## a) Thermodynamique des gaz

• A la fin du XIX<sup>ième</sup> siècle, les travaux sur la théorie cinétique des gaz de Maxwell [1860] et Boltzmann [1872] ont permis de préciser la loi de répartition des vitesses d'un gaz à l'équilibre thermodynamique. Dans cette approche, on considère qu'en un "point"  $x$  et à l'instant  $t$  coexiste un continuum de vitesses possibles pour les molécules du gaz. Plus précisément, au point  $x$  à  $dx$  près et pour une vitesse  $v$  à  $dv$  près, la masse de gaz présente vaut

$$dm = f_0(v) dx dv. \quad (0.1)$$

La répartition de Maxwell-Boltzmann précise la fonction  $f_0$  ; elle est paramétrée par la densité  $\rho$ , la vitesse moyenne du gaz  $u$  et le paramètre  $\beta$ , relié simplement à la température  $T$ , à la masse  $\mu$  d'une molécule et la constante  $k$  de Boltzmann *via* la relation classique

$$\beta = \frac{\mu}{kT}. \quad (0.2)$$

La loi de répartition des vitesses s'écrit dans le cas de trois dimensions d'espace :

$$f_0(v) = \rho \left( \frac{\beta}{2\pi} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{\beta}{2} |v - u|^2 \right). \quad (0.3)$$

• Des calculs élémentaires d'intégrales gaussiennes (voir par exemple l'Annexe) montrent que

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^3} f_0(v) dv \quad (0.4)$$

$$\rho u = \int_{\mathbb{R}^3} v f_0(v) dv \quad (0.5)$$

et l'énergie totale spécifique du gaz  $E$  satisfait également à la relation

$$\rho E = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 f_0(v) dv. \quad (0.6)$$

• La distribution précédente correspond au cas idéal d'un équilibre *a priori* indépendant de l'espace et du temps. Dans le cas où une évolution dynamique a lieu, la répartition des vitesses  $f$  est une fonction de l'espace  $x$ , du temps  $t$  et des vitesses  $v$  ; elle suit l'équation de Boltzmann [1872]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = Q(f), \quad x \in \mathbb{R}^3, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0. \quad (0.7)$$

Dans cette équation, le terme de gauche  $\partial_t + v \cdot \nabla$  correspond à un transport libre à la vitesse  $v$ , alors que le terme de droite  $Q(f)$  décrit les collisions au sein du gaz. Dans le modèle le plus classique pour un gaz dilué, on ne prend en compte que les collisions "à deux points" et  $Q(f)$  est une fonction quadratique de la distribution  $f$ .

• Une analyse microscopique des collisions moléculaires montre que la masse, l'impulsion et l'énergie sont conservés lors de chaque interaction. La conséquence à l'échelle macroscopique qui nous intéresse ici est que le noyau de collision  $Q(f_0)$  a une intégrale nulle quand on le teste devant 1,  $v$  et  $\frac{1}{2} |v|^2$  :

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f_0) \left( 1, v, \frac{1}{2} |v|^2 \right)^t dv = 0. \quad (0.8)$$

• Quand on injecte cette hypothèse dans l'équation de Boltzmann (0.7), les grandeurs conservées

$$W = (\rho, q \equiv \rho u, \varepsilon \equiv \rho E)^t \equiv (W_0, W_\alpha, W_4)^t \quad (0.9)$$

sont des fonctions de l'espace et du temps qui satisfont aux équations d'Euler de la dynamique des gaz :

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \operatorname{div} F(W) = 0. \quad (0.10)$$

Le tenseur  $F$  a trois composantes spatiales, une scalaire (pour la densité), une vectorielle (pour l'impulsion) et une dernière scalaire pour l'énergie. On a :

$$F_{0\alpha} = \int_{\mathbb{R}^3} v_\alpha f_0(v) \, dv \quad (0.11)$$

$$F_{\alpha\beta} = \int_{\mathbb{R}^3} v_\alpha v_\beta f_0(v) \, dv \quad (0.12)$$

$$F_{4\alpha} = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 v_\alpha f_0(v) \, dv \quad (0.13)$$

avec la convention d'utiliser les indices grecs pour les paramètres spatiaux.

• La situation d'un équilibre thermodynamique parfait n'est qu'une première approximation. En introduisant des paramètres thermodynamiques tels que le libre parcours moyen entre deux collisions ou le temps moyen entre deux collisions, on peut considérer des distributions  $f$  "peu éloignées" de l'équilibre. On introduit un "petit paramètre"  $\varepsilon$  tel que :

$$\varepsilon = \frac{\text{libre parcours moyen}}{\text{dimension macroscopique typique}} \quad (0.14)$$

et on cherche  $f$  sous la forme d'un développement asymptotique en  $\varepsilon$  :

$$f(v) = f_0(v) + \varepsilon f_1(v) + \varepsilon^2 f_2(v) + \dots \quad (0.15)$$

où  $f_0(\bullet)$  est la maxwellienne (0.3). Le développement au second ordre, dit de Chapman-Enskog (1915) permet de retrouver les équations de Navier-Stokes. Nous renvoyons le lecteur à l'ouvrage classique de Chapman et Cooling [CC39] ou au traité plus récent de Diu *et al* [DGLR89].

### b) Quelques approximations classiques

• L'une des difficultés dans l'étude de l'équation de Boltzmann est de relier la dynamique collisionnelle et l'obtention de l'équilibre  $f_0$ . Avec l'approximation "BGK" (de ses auteurs Bhatnagar, Gross et Krook [BGK54]), on injecte *a priori* une représentation de l'équilibre  $f_0(v)$  et l'opérateur de collision modélise l'interaction de  $f$  avec un champ moyen. On a donc :

$$Q_{\text{BGK}}(f) = S(f - f_0(v)). \quad (0.16)$$

L'effet des collisions est de "ramener" la distribution  $f$  vers un équilibre de référence, paramétré par les grandeurs conservées  $W$  (voir les relations (0.4) à (0.6) et (0.9)).

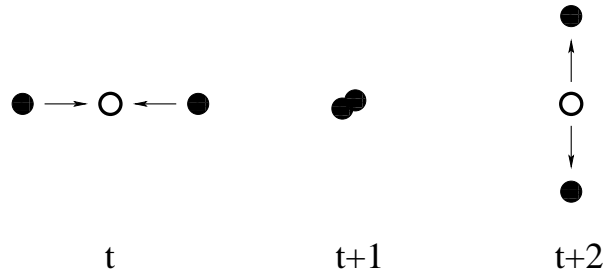
• Une autre difficulté est l'introduction d'un espace de paramètres "gigantesque" avec l'espace  $\mathbb{R}^3$  pour toutes les vitesses. Les modèles de Carleman [Ca57] ou de Broadwell [Br64], généralisés ensuite par Renée Gatignol [Ga75], tout en gardant un espace-temps continu, ne considèrent qu'un ensemble fini de vitesses possibles. On obtient ainsi un ensemble d'équations aux dérivées partielles couplées dont l'étude est une difficulté en soi.

### c) Automates cellulaires

• Au lieu de rechercher des modèles mathématiques, le développement des outils informatiques a conduit à l'idée de simulateurs discrets faciles à programmer. Dans une telle approche, l'espace, le temps,

les vitesses, le nombre de molécules présentes à un instant donné en un point donné sont discrets. Le développement de ces automates cellulaires a connu trois temps forts.

- La première idée consiste à utiliser un réseau carré à deux dimensions d'espace. L'état du réseau (les entiers de Gauss) est défini par un champ de variables binaires valant 0 ou 1. La valeur 0 indique que le site  $(i, j)$  est libre et la valeur 1 qu'il est occupé. L'évolution du réseau est décrite par les vitesses discrètes liant un sommet  $(i, j)$  à ses quatre voisins  $(i \pm 1, j \pm 1)$ . Avec un pas d'espace unité et un pas de temps unité, les vitesses possibles prennent donc leurs valeurs dans l'ensemble  $\{e_1, -e_1, e_2, -e_2\}$ , avec  $e_1 = (1, 0)$  et  $e_2 = (0, 1)$ . Chaque particule (ou site occupé) a l'une des quatre vitesses proposées plus haut. Il reste à définir les règles de collision lorsqu'il y a conflit pour occuper un site à un instant ultérieur. Sans décrire en détail ici le modèle de Hardy, de Pazzis et Pomeau [HPP76], il faut construire des règles de collision qui respectent la conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie tout en prenant en compte un temps et un espace discrets. La Figure 1 décrit la dynamique dans le cas d'une collision frontale. On note que durant le temps intermédiaire  $t + 1$ , deux molécules sont présentes en même temps sur un même nœud du réseau.



**Figure 1.** Dynamique d'une collision frontale dans le modèle [HPP76].

- Un point remarquable dans l'étude des automates cellulaires est qu'on peut (au moins formellement), passer à la limite. On constitue des blocs de plus en plus grands, ce qui permet de définir une densité macroscopique  $\rho$  (rapport du nombre de sites occupés au nombre de sites de l'échantillon) et une impulsion macroscopique  $q$ . On introduit une échelle de temps "grande" devant le pas de temps élémentaire (égal à 1 !) ainsi qu'une échelle spatiale "grande" devant le pas du réseau (toujours égal à 1 !). A l'aide de ces variables continues, les équations limites prennent la forme

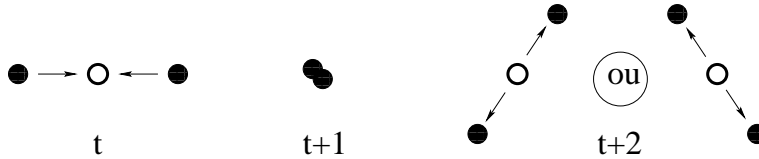
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} q = 0 \quad (0.17)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \operatorname{div} P(\rho, q) = 0. \quad (0.18)$$

On a donc conservation de la masse et de l'impulsion. Par contre le tenseur des pressions  $P$  (voir aussi (1.12)) n'est pas isotrope.

- Afin de remédier à ce défaut d'isotropie, Frisch, Haslacher et Pomeau [FHP86] ont proposé d'utiliser un réseau hexagonal, *i.e.* les points de la forme  $a + bj$ , avec  $a, b \in \mathbb{Z}$  et  $1 + j + j^2 = 0$ . L'espace contient plus de directions en vitesse et la dynamique des collisions est aussi plus complexe (Figure 2) ; un tirage au hasard est nécessaire pour décrire l'état aval d'une collision frontale. Cette fois, la limite hydrodynamique est isotrope, donc recevable physiquement. L'extension à trois dimensions d'espace a

été réalisée peu après par D’Humières, Lallemand et Frisch [DLF86] à l’aide d’un modèle à 24 vitesses sur un réseau cubique à faces centrées.



**Figure 2.** Collision frontale dans le modèle [FHP86].

- Les automates cellulaires souffrent cependant de plusieurs défauts qui ont limité leur développement : bruit intrinsèque, valeur imposée à la limite des coefficients de transport et non respect de l’invariance de Galilée.

**d) Gaz de Boltzmann sur réseau**

- L’idée nouvelle, proposée par Mac Namara et Zanetti [MZ88], consiste à garder un réseau discret, mais à chercher une variable **continu**  $f$  qui décrit la population moyenne sur un site donné du réseau, ayant une vitesse discrète imposée par la géométrie. Si on note  $x$  l’espace,  $t$  le temps et  $(v_j)_{0 \leq j \leq b}$  les vitesses discrètes associées au réseau, on peut écrire une forme discrète de l’équation de Boltzmann (0.7) en introduisant un opérateur de collision discret. Dans l’approche de Higuera, Succi et Benzi [HSB89], on dispose d’une distribution d’équilibre  $f_j^{eq}(x, t)$  et d’une matrice de collision  $S_{ij}$  qui permet d’écrire le  $i^{\text{ème}}$  terme de l’opérateur de collision  $Q_i(f)$  sous la forme

$$Q_i(f) = \sum_{j=0}^b S_{ij} (f_j - f_j^{eq}). \tag{0.19}$$

L’évolution discrète entre les instants  $t$  et  $t + 1$  (la communauté des physiciens a gardé des automates cellulaires l’emploi d’un pas de temps unité) prend alors la forme :

$$f_i(x + v_i, t + 1) = f_i(x, t) + Q_i(f)(x, t) \tag{0.20}$$

où  $x$  désigne un site du réseau.

- La difficulté de cette approche est la détermination de la distribution d’équilibre  $f_j^{eq}$  ( $0 \leq j \leq b$ ) et de la matrice de collision  $S_{ij}$  ( $0 \leq i, j \leq b$ ). Ces paramètres contiennent la physique des invariants et la dynamique de l’évolution vers l’état d’équilibre, en suivant l’ansatz de type BGK. De plus, l’invariance de Galilée des équations de la dynamique des gaz est encore en défaut ; la loi de pression  $p(\rho)$  prend la forme typique

$$p(\rho) = \xi^2 \rho \left( 1 - g(\rho) \frac{|u|^2}{\xi^2} + \dots \right) \tag{0.21}$$

où  $\rho$  désigne la densité,  $\xi$  la célérité des ondes sonores,  $u$  la vitesse du gaz et  $g(\rho)$  est un facteur correctif du modèle, dit “de Galilée”.

- Dans le cas de plusieurs modèles discrets, Qian, D’Humières et Lallemand [QDL92] proposent une loi de distribution polynomiale en vitesse pour la distribution d’équilibre  $f^{eq}$  et un opérateur de relaxation  $S_{ij}$  diagonal. Cette approche est enrichie par D’Humières [DH92] qui propose que cet opérateur soit diagonal dans des variables transformées linéairement à partir des  $f$ , dites “moments”. Nous détaillons

dans la suite cette approche de l'équation de Boltzmann sur réseau, dite "Lattice Boltzmann Equation" ("LBE") dans cette communauté.

## 1. UN MODÈLE UNIDIMENSIONNEL

### a) Présentation générale

- On dispose d'une grille réelle de pas  $\Delta x$ , d'un pas de temps  $\Delta t$ , et on suppose fixée la vitesse de grille

$$\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}. \quad (1.1)$$

Au point  $x_j = j \Delta x$  ( $j \in \mathbb{Z}$ ) et à l'instant  $t^n = n \Delta t$  ( $n \in \mathbb{N}$ ), on cherche  $(f_0)_j^n$ ,  $(f_+)_j^n$  et  $(f_-)_j^n$ . La notation  $(f_0)_j^n$  (respectivement  $(f_+)_j^n$ ,  $(f_-)_j^n$ ) décrit le nombre moyen de particules au repos (respectivement animées de la vitesse  $+\lambda$ ,  $-\lambda$ ) à l'instant  $t^n$  et pour la position  $x_j$ .

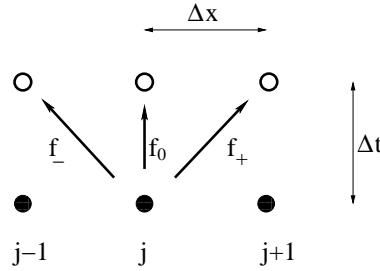


Figure 3. Transport libre pour le modèle à trois vitesses.

- Un pas de temps se compose de deux phases : transport libre et collision. Au cours du transport libre, on résout l'équation d'advection

$$\frac{\partial f}{\partial t} + a \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (1.2)$$

pour les trois vitesses  $a \in \{-\lambda, 0, \lambda\}$  et les champs inconnus  $f \in \{f_-, f_0, f_+\}$  avec la relation (1.1) entre le pas d'espace et le pas de temps qui garantit que la méthode des caractéristiques est alors **exacte**. On note  $\tilde{f}$  la valeur des différents champs après cette phase de propagation. On a donc (voir la Figure 3)

$$(\tilde{f}_-)_j = (f_-)_j \quad (1.3)$$

$$(\tilde{f}_0)_j = (f_0)_j \quad (1.4)$$

$$(\tilde{f}_0)_{j+1} = (f_+)_j. \quad (1.5)$$

- La phase de collision est **locale** en espace. On omet donc les indices  $j$  et  $n$  pour alléger l'écriture. On dispose donc du champ  $\tilde{f} = (\tilde{f}_-, \tilde{f}_0, \tilde{f}_+)$  calculé à l'issue de l'étape précédente. On introduit d'abord les **variables conservées**  $W$  de densité  $\rho$  et d'impulsion  $q$  :

$$\rho = \tilde{f}_- + \tilde{f}_0 + \tilde{f}_+ \quad (1.6)$$

$$q = -\lambda \tilde{f}_- + \lambda \tilde{f}_+ \quad (1.7)$$

puisque la vitesse nulle ne donne aucune contribution à l'impulsion. On pose ensuite

$$W = (\rho, q) \quad \text{variables conservées.} \quad (1.8)$$

• On introduit ensuite un **état d'équilibre**  $f^{\text{eq}} = \phi = (\phi_-, \phi_0, \phi_+)$  qui n'est fonction **que** des variables conservées :

$$f^{\text{eq}} = \phi(W). \quad (1.9)$$

L'état final  $f^*$  est alors une combinaison de  $\tilde{f}$  et de l'état d'équilibre  $\phi(W)$  :

$$f^* = \tilde{f} - S(\tilde{f} - \phi(W)) \quad (1.10)$$

où l'opérateur de collision  $S$  doit être déterminé et être tel que les nouvelles variables conservées  $W^* = (\rho^*, q^*)$ , définies par l'analogie de (1.6) et (1.7), c'est à dire

$$\begin{cases} \rho^* = f_-^* + f_0^* + f_+^* \\ q^* = -\lambda f_-^* + \lambda f_+^* \end{cases} \quad (1.11)$$

sont **invariantes** dans la phase de collision :

$$W^* = W. \quad (1.12)$$

• Le schéma  $\{f^n\} \rightarrow \{f^{n+1}\}$  se décompose d'une première étape d'advection  $A$  puis d'une seconde étape de collision  $C$ . On a d'abord

$$\tilde{f} = A \bullet f^n \quad (1.13)$$

avec  $\tilde{f}$  donné en fonction de  $f^n$  par les relations (1.3) à (1.5). On a ensuite

$$f^{n+1} = f^* \equiv C(\tilde{f}). \quad (1.14)$$

Le passage du temps prend donc la forme  $f^{n+1} = C(A \bullet f^n)$ .

• Comme la phase de collision est locale en espace, on peut aussi considérer qu'un pas de temps se compose d'une phase de collision, suivie d'une phase d'advection. La collision  $f \mapsto f^* = C(f)$  est non linéaire alors que l'advection  $f \mapsto A \bullet f$  est linéaire. La collision est locale en espace alors que l'advection couple les points voisins. Le schéma s'écrit alors

$$f^{n+1} = A \bullet C(f) \quad (1.15)$$

soit compte tenu de (1.3), (1.4), (1.5) qui décrit la phase d'advection :

$$(f_-)_j^{n+1} = (f_-^*)_{j+1}^n \quad (1.16)$$

$$(f_0)_j^{n+1} = (f_0^*)_j^n \quad (1.17)$$

$$(f_+)_j^{n+1} = (f_+^*)_{j-1}^n. \quad (1.18)$$

La seule différence entre les approches (1.14) et (1.15) porte sur le choix des conditions initiales : commence-t-on par un pas d'advection ou par un pas de collision ? Par ailleurs, la mesure des échanges particuliers diffère *a priori* selon que l'on mesure " $f$ " (**avant** l'étape de collision) ou " $f^*$ " (**après** la collision).

### b) Relaxation de l'énergie

- Compte tenu de la définition (1.6), (1.7) de la densité et de l'impulsion, il est "naturel" d'introduire l'énergie (cinétique) selon

$$\varepsilon = \frac{\lambda^2}{2} f_- + \frac{\lambda^2}{2} f_+. \quad (1.19)$$

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

$$\varepsilon^{\text{eq}} \equiv \psi(W). \quad (1.20)$$

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

$$\varepsilon^* = \varepsilon - s(\varepsilon - \psi(W)) \quad (1.21)$$

où  $s$  est le paramètre de relaxation.

- Au cours de l'étape de collision, on fait un pas de temps d'un schéma d'Euler explicite pour intégrer l'équation différentielle de relaxation de l'écart à l'équilibre :

$$\frac{d}{dt}(\varepsilon - \psi(W)) + \frac{1}{\tau}(\varepsilon - \psi(W)) = 0. \quad (1.22)$$

On a donc

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

car  $\psi$  ne dépend pas du temps. D'où en posant  $\varepsilon^* = \varepsilon(\Delta t)$  et  $\varepsilon = \varepsilon(0)$ , la relation (1.21), avec le choix

$$s = \frac{\Delta t}{\tau} \quad (1.23)$$

qui mesure le rapport entre le pas de temps et la constante de temps du processus. On sait que pour un système dynamique tel que (1.22), la condition de **stabilité** du schéma s'écrit

$$0 \leq s \leq 2 \quad (1.24)$$

relation retrouvée par les approches classiques du gaz de Boltzmann sur réseau.

### c) Espace des moments

- On regroupe  $(\rho, q, \varepsilon)$  en un vecteur, dit de moments, depuis le travail fondateur de D'Humières [DH92].

$$m \equiv (\rho, q, \varepsilon)^t. \quad (1.25)$$

La représentation en moments est reliée à la distribution initiale  $f$ ,

$$f \equiv (f_-, f_0, f_+)^t \quad (1.26)$$

à l'aide d'une matrice  $M$  :

$$m = M f. \quad (1.27)$$

- Compte tenu des relations (1.6), (1.7) et (1.19), on a facilement

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -\lambda & 0 & \lambda \\ \frac{\lambda^2}{2} & 0 & \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix}, \quad M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{\lambda^2} \\ 1 & 0 & -\frac{1}{\lambda^2} \\ 0 & \frac{1}{2\lambda} & \frac{1}{\lambda^2} \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Au cours de la collision, les variables conservées  $\rho$  et  $q$  sont inchangées, ainsi que l'exprime (1.12) :

$$\rho^* = \rho, \quad q^* = q \quad (1.29)$$

alors que l'énergie relaxe vers l'équilibre  $\varepsilon^{\text{eq}} = \psi(W)$

$$\varepsilon^* = (1 - s)\varepsilon + s\psi(W), \quad (1.30)$$

ce qui définit le vecteur  $m^*$  des moments **après** la collision :

$$m^* = (\rho^*, q^*, \varepsilon^*)^t. \quad (1.31)$$

L'état  $f^*$  post-collision vaut simplement

$$f^* = M^{-1} m^*. \quad (1.32)$$

- Le schéma de Boltzmann est donc défini par les ingrédients suivants :

- (i) choix des variables conservées  $W$ , ou “moments à l'équilibre” de la distribution  $f$ ,
- (ii) matrice  $M$  de passage entre la distribution  $f$  et les moments  $m$ ,
- (iii) valeurs d'équilibre  $\psi_k(W)$  des moments qui ne sont pas à l'équilibre,
- (iv) rapport  $s_k$  entre le pas de temps d'évolution physique  $\Delta t$  et la constante de temps  $\tau_k$  caractéristique du retour à l'équilibre du  $k^{\text{ième}}$  moment.

#### d) Equations équivalentes

- Nous détaillons dans ce qui suit le modèle à trois vitesses, où l'énergie  $\varepsilon$  définie à la relation (1.19) relaxe vers une énergie d'équilibre  $\psi(\rho, q)$  donnée par :

$$\psi(\rho, q) = \alpha^2 \frac{\lambda^2}{2} \rho \quad (1.33)$$

où  $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$  est la vitesse numérique de référence (fixée) et  $\alpha$  une constante strictement positive.

- Nous nous donnons au temps discret  $t^n$  et à la position  $x_j$  un champ  $f = (f_-, f_0, f_+)$ . Nous pouvons passer dans l'espace des moments, ce qui permet d'écrire :

$$\begin{cases} \rho_j^n = (f_- + f_0 + f_+)_j^n \\ q_j^n = -\lambda(f_-)_j^n + \lambda(f_+)_j^n \\ \varepsilon_j^n = \frac{\lambda^2}{2}(f_-)_j^n + \frac{\lambda^2}{2}(f_+)_j^n \end{cases} \quad (1.34)$$

compte tenu du choix de la matrice  $M$  explicité à la relation (1.28). La phase de collision peut s'exprimer très simplement dans l'espace des moments :

$$\begin{cases} (\rho^*)_j^n = \rho_j^n \\ (q^*)_j^n = q_j^n \\ (\varepsilon^*)_j^n = (1 - s)\varepsilon_j^n + s(\psi(W))_j^n \end{cases} \quad (1.35)$$

avec  $s \in ]0, 2[$  fixé et  $\psi(W)$  donné à la relation (1.33). L'état  $f^*$  à l'instant  $t^n$  et à la position  $x_j$  est donné grâce à la matrice  $M^{-1}$  (relation (1.28)) :

$$\begin{cases} (f_-^*)_j^n = \left(-\frac{1}{2\lambda}q^* + \frac{1}{\lambda^2}\varepsilon^*\right)_j^n \\ (f_0^*)_j^n = \left(\rho^* - \frac{2}{\lambda^2}\varepsilon^*\right)_j^n \\ (f_+^*)_j^n = \left(\frac{1}{2\lambda}q^* + \frac{1}{\lambda^2}\varepsilon^*\right)_j^n. \end{cases} \quad (1.36)$$

Compte tenu de (1.35) et (1.16) à (1.19), nous en déduisons l'itération du schéma numérique :

$$\begin{cases} (f_-)_j^{n+1} = \left(-\frac{1}{2\lambda}q + \frac{1}{\lambda^2}\varepsilon^*\right)_{j+1}^n \\ (f_0)_j^{n+1} = \left(\rho - \frac{2}{\lambda^2}\varepsilon^*\right)_j^n \\ (f_+)_j^{n+1} = \left(\frac{1}{2\lambda}q + \frac{1}{\lambda^2}\varepsilon^*\right)_{j-1}^n. \end{cases} \quad (1.37)$$

On peut utiliser ces valeurs pour en déduire l'itération dans l'espace des moments :

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{1}{2\lambda}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n) + \frac{1}{\lambda^2}(\varepsilon_{j+1}^* - 2\varepsilon_j^* + \varepsilon_{j-1}^*)^n \quad (1.38)$$

$$q_j^{n+1} = \frac{1}{2}(q_{j+1}^n + q_{j-1}^n) - \frac{1}{\lambda}(\varepsilon_{j+1}^* - \varepsilon_{j-1}^*)^n \quad (1.39)$$

$$\varepsilon_j^{n+1} = \frac{1}{2}(\varepsilon_{j+1}^* + \varepsilon_{j-1}^*)^n - \frac{\lambda}{4}(q_{j+1}^n - q_{j-1}^n). \quad (1.40)$$

• Dans les pages qui suivent, nous utilisons la méthode de l'équation équivalente pour construire petit à petit l'équation aux dérivées partielles “la mieux simulée par le schéma” à un ordre d'approximation donné (par rapport à  $\Delta x$  pour fixer les idées). On regarde formellement les équations aux dérivées partielles équivalentes, en suivant l'approche classique proposée par Lerat-Peyret [LP74] et Warming-Hyett [WH74] (voir aussi la thèse de Lerat [Le81]). Nous avons d'abord la :

**Proposition 1. Equilibre.**

L'énergie est à l'équilibre, au premier ordre près :

$$\varepsilon_j^n = \psi(\rho_j^n) + O(\Delta x). \quad (1.41)$$

**Preuve de la Proposition 1.**

• Nous tirons de (1.40) :  $\varepsilon_j^{n+1} = \varepsilon_j^* + O(\Delta x)$ , soit compte tenu de (1.21) et de la formule de Taylor en temps :

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

dont on déduit immédiatement (1.41) après soustraction de  $\varepsilon_j^n$  puis division par  $s$ , supposé **non nul**.

□

**Proposition 2. Modèle fluide.**

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

$$p(\rho) = c_0^2 \rho, \quad c_0 = \alpha \lambda, \quad (1.42)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta x), \quad (1.43)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} = O(\Delta x). \quad (1.44)$$

**Preuve de la Proposition 2.**

• On utilise sans vergogne la dérivation des développements limités, ce qui permet un calcul formel, mais suppose *a priori* des approximations dans des espaces fonctionnels “très réguliers”. Nous déduisons de (1.41) et (1.21)

$$(\varepsilon^*)_j^n = \psi(\rho_j^n) + O(\Delta x), \quad (1.45)$$

relation que nous dérivons deux fois par rapport à l'espace (!) :

$$\left(\frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2}\right)_j^n = \alpha^2 \frac{\lambda^2}{2} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}\right)_j^n + O(\Delta x). \quad (1.46)$$

- Nous avons par ailleurs :

$$\frac{1}{2} (q_{j+1} - q_{j-1})^n = \left( \frac{\partial q}{\partial x} \right)_j^n \Delta x + O(\Delta x^3) \quad (1.47)$$

$$(\varepsilon_{j+1}^* - 2\varepsilon_j^* + \varepsilon_{j-1}^*)^n = \Delta x^2 \left( \frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2} \right)_j^n + O(\Delta x^4). \quad (1.48)$$

Nous déduisons donc de la relation (1.38) et des développements précédents :

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

ce qui prouve la relation (1.43). Nous procédons de même pour l'équation de l'impulsion (1.39) :

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

ce qui établit (1.44) et la loi de pression  $p = \alpha^2 \lambda^2 \rho$ , soit (1.42).  $\square$

**Proposition 3. Fluide visqueux.**

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = O(\Delta x^2) \quad (1.49)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} - \lambda \Delta x (1 - \alpha^2) \left( \frac{1}{s} - \frac{1}{2} \right) \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = O(\Delta x^2) \quad (1.50)$$

avec une loi de pression donnée en (1.42).

- Nous notons que la condition  $0 < s < 2$  garantit que :

$$\frac{1}{s} - \frac{1}{2} > 0. \quad (1.51)$$

**Preuve de la Proposition 3.**

- Pour établir (1.49), on part de (1.38), en poussant la formule de Taylor un cran plus loin, c'est-à-dire au second ordre :

$$\rho + \Delta t \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) = \rho - \frac{\Delta x}{\lambda} \frac{\partial q}{\partial x} + O(\Delta x^3) + \frac{\Delta x^2}{\lambda^2} \frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2} + O(\Delta x^4)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} &= -\frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} + \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \frac{\alpha^2}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + O(\Delta x^2) \\ &= -\frac{\Delta t}{2} \left( \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \alpha^2 \lambda^2 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right) + O(\Delta x^2) = O(\Delta x^2) \end{aligned}$$

car la densité  $\rho$  est solution de l'équation d'onde obtenue par dérivation par rapport au temps de l'équation (1.43), à laquelle on retranche la dérivation par rapport à l'espace de l'équation (1.44).

- Pour l'impulsion, on commence par développer l'énergie  $\varepsilon$  un cran plus loin. Nous repartons de la relation (1.40), sachant que (1.41) exprime que l'énergie  $\varepsilon$  est à l'équilibre au premier ordre près :

$$\begin{aligned} \varepsilon + \Delta t \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + O(\Delta t^2) &= \varepsilon^* + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon^*}{\partial x^2} \Delta x^2 - \frac{\lambda}{2} \Delta x \frac{\partial q}{\partial x} + O(\Delta x^3) \\ &= (1-s)\varepsilon + s\psi - \frac{\lambda}{2} \Delta x \frac{\partial q}{\partial x} + O(\Delta x^2). \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} s(\varepsilon - \psi) &= -\Delta t \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\lambda}{2} \Delta x \frac{\partial q}{\partial x} + O(\Delta x^2) = -\frac{\lambda \Delta x}{2} \left( \alpha^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} \right) + O(\Delta x^2) \\ \varepsilon &= \psi - \frac{\lambda \Delta x}{2s} \left( \alpha^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} \right) + O(\Delta x^2). \end{aligned} \quad (1.52)$$

Nous avons ensuite  $\varepsilon^* = (1 - s)\varepsilon + s\psi$ , d'où

$$\varepsilon^* = \psi - \frac{1-s}{2s} \lambda \Delta x \left( \alpha^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} \right) + O(\Delta x^2). \quad (1.53)$$

- On développe enfin les deux membres de la relation (1.39) en explicitant les termes d'ordre deux :

$$\begin{aligned} q + \Delta t \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 q}{\partial t^2} + O(\Delta t^3) &= q + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + O(\Delta x^4) - \frac{2\Delta x}{\lambda} \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial x} + O(\Delta x^3) \\ &= q + \frac{1}{2} \Delta x^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} - \Delta t \lambda^2 \alpha^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{1-s}{s} \Delta x^2 \frac{\partial}{\partial x} \left( \alpha^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} \right) + O(\Delta x^2). \end{aligned}$$

On en déduit après division par  $\Delta t$  :

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

et la relation (2.50) est établie.  $\square$

## 2. UN DÉVELOPPEMENT GÉNÉRAL

### a) Hypothèses et notations

- On se propose de définir un réseau  $\mathcal{L}$  du plan  $\mathbb{R}^2$ . Celui-ci est *a priori* un complexe cellulaire (voir par exemple Godbillon [Go71]) composé d'un ensemble  $\mathcal{L}^0$  de sommets qui sont des éléments géométriques de dimension zéro et d'un ensemble  $\mathcal{L}^1$  d'arêtes, objets géométriques de dimension un. L'ensemble  $\mathcal{L}^1$  est un graphe symétrique construit à partir de l'ensemble  $\mathcal{L}^0$ .
- On suppose qu'il existe un entier  $J$ , des vecteurs  $e_0, e_1, \dots, e_J$  du plan  $\mathbb{R}^2$  et un paramètre  $\Delta x > 0$  destiné à tendre vers zéro de sorte que les voisins du sommet  $x$ , c'est-à-dire les sommets  $y \in \mathcal{L}^0$  tels que  $(x, y)$  est une arête du réseau (le couple  $(x, y)$  appartient à  $\mathcal{L}^1$ ) forment un ensemble fini de cardinal  $J + 1$ . Le  $j^{\text{ième}}$  voisin  $y_j(x)$  du sommet  $x \in \mathcal{L}^0$  est donné par la relation

$$y_j(x) = x + e_j \Delta x, \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0. \quad (2.1)$$

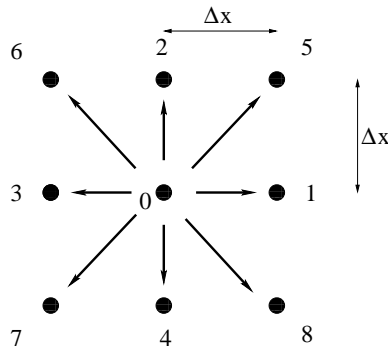


Figure 4. Vecteurs de liaisons  $(e_j)_{0 \leq j \leq J}$  pour le réseau  $D_2 Q_9$ .

- On suppose que le maillage est **structuré**, c'est-à-dire que la famille de vecteurs  $(e_j)_{0 \leq j \leq J}$  ne dépend **pas** du sommet  $x$  et qu'on a une propriété de **symétrie** par rapport à l'origine :

$$e_0 = 0 \tag{2.2}$$

$$\forall j \in \{0, \dots, J\}, \exists \sigma(j) \in \{0, \dots, J\} \quad e_{\sigma(j)} = -e_j. \tag{2.3}$$

L'exemple classique des gaz sur réseaux est le réseau appelé  $D_2 Q_9$  pour lequel on a (Figure 4) :

$$(e_j) = (0, 1, i, -1, -i, 1 + i, -1 + i, -1 - i, 1 - i), \tag{2.4}$$

avec  $i^2 = -1$  et  $i \in \mathbb{R}^2$ .

- On introduit un pas de temps  $\Delta t$  de sorte que la vitesse de référence  $\lambda$  définie par

$$\lambda \equiv \frac{\Delta x}{\Delta t} \tag{2.5}$$

reste **constante** dans toute l'étude. On introduit ensuite les **vitesse**s **discrètes**  $v_j$  ( $0 \leq j \leq J$ ) grâce à la relation

$$v_j = e_j \frac{\Delta x}{\Delta t}, \quad 0 \leq j \leq J. \tag{2.6}$$

Le  $j^{\text{ième}}$  voisin  $y_j(x)$  est donc donné par

$$y_j(x) = x + v_j \Delta t, \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0. \tag{2.7}$$

**b) Gaz de particules sur le réseau**

- On cherche à faire évoluer une distribution de "particules"  $f_j(x)$

$$f_j(x) \in \mathbb{R}, \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0 \tag{2.8}$$

de l'instant  $n\Delta t$  à l'instant  $(n+1)\Delta t$  ( $n \in \mathbb{N}$ ). On définit d'abord les **variables conservées**  $W$  composées de la densité  $\rho$  et de l'impulsion  $q$  :

$$\rho(x) = \sum_{j=0}^J f_j(x), \quad x \in \mathcal{L}^0, \tag{2.9}$$

$$q^\alpha(x) = \sum_{j=0}^J v_j^\alpha f_j(x), \quad 1 \leq \alpha \leq 2, \quad x \in \mathcal{L}^0 \tag{2.10}$$

où  $v_j^\alpha$  sont les composantes cartésiennes des vitesses discrètes du réseau. On a alors

$$W(x) = (\rho, q^1, q^2)^t \in \mathbb{R}^{3t}, \tag{2.11}$$

où la notation  $\mathbb{R}^{3t}$  rappelle que le vecteur  $W$  est une **colonne** de trois nombres réels, à distinguer de  $\mathbb{R}^3$ , où les trois réels forment une **ligne**.

- On se donne une distribution d'équilibre  $G(W)$  pour chaque vecteur  $W$  des variables conservées :

$$f_j^{eq} \equiv G_j(W), \quad 0 \leq j \leq J, \quad W \in \mathbb{R}^{3t}. \tag{2.12}$$

La lettre  $G$  rappelle que dans le cas d'un continuum de vitesses, la distribution d'équilibre est représentée par la Gaussienne, voir la relation (0.3). La fonction  $j \mapsto G_j(W)$  est une "Gaussienne discrète" qui sera détaillée dans le cas du modèle  $D_2 Q_9$  au paragraphe suivant.

- L'idée force de D. D'Humières [DH92] est d'étendre le vecteur  $W$  en un vecteur  $m \in \mathbb{R}^{(J+1)t}$  de **moments** dont les trois premières composantes sont identiques au vecteur  $W$  :

$$m_k \equiv W_k, \quad 0 \leq k \leq 2 \tag{2.13}$$

et les dernières sont dites “hors équilibre”. Le vecteur  $m$  est obtenu à partir du vecteur  $f \in \mathbb{R}^{(J+1)t}$  de la distribution

$$f = (f_j)_{0 \leq j \leq J} \in \mathbb{R}^{(J+1)t} \quad (2.14)$$

par une simple transformation linéaire de matrice  $M$

$$m = M \bullet f \in \mathbb{R}^{(J+1)t}. \quad (2.15)$$

$$m_k = \sum_{j=0}^J M_{kj} f_j, \quad 0 \leq k \leq J. \quad (2.16)$$

- Le choix de la matrice  $M$ , carrée à  $(J+1)$  lignes et colonnes, **caractérise** le choix de la distribution de chaque composante du moment. Afin d’avoir une cohérence entre les définitions (2.9)-(2.10) du vecteur  $W$  et la contrainte (2.13) pour le choix des premières composantes, on a clairement

$$M_{0j} = 1, \quad 0 \leq j \leq J \quad (2.17)$$

$$M_{\alpha j} = v_j^\alpha, \quad 0 \leq j \leq J, \quad 1 \leq \alpha \leq 2. \quad (2.18)$$

- Lorsque  $f$  est égal à la distribution d’équilibre  $G(W)$  (relation (2.12)), le moment correspondant  $m$  est dit à l’équilibre ; on le note  $m^{\text{eq}}$  :

$$m_k^{\text{eq}} = \sum_j M_{kj} f_j^{\text{eq}} = \sum_j M_{kj} G_j(W), \quad 0 \leq k \leq J. \quad (2.19)$$

On a par construction-même

$$m_k^{\text{eq}} = W_k, \quad 0 \leq k \leq 2. \quad (2.20)$$

- L’évolution de  $f(t)$  à  $f(t + \Delta t)$  via le passage d’un instant discret  $\Delta t$  comporte deux étapes : l’étape de **collision** qui est locale en espace mais couple les diverses composantes du vecteur  $f$  et l’étape **d’advection**, qui autorise le transport découplé des diverses composantes de  $f$  vers les différents voisins.

### c) Etape de collision

- On définit dans ce paragraphe un opérateur local  $C$  de  $\mathbb{R}^{(J+1)t}$  dans lui-même :

$$\mathbb{R}^{(J+1)t} \ni f \mapsto f^* = Cf \in \mathbb{R}^{(J+1)t}, \quad (2.21)$$

dit opérateur de collision. Il s’exprime simplement dans l’espace des moments :

$$\mathbb{R}^{(J+1)t} \ni m \mapsto m^* = M C M^{-1} m \in \mathbb{R}^{(J+1)t}. \quad (2.22)$$

- D’une part, les moments correspondants aux variables conservées sont **invariants** dans la transformation  $m \mapsto m^*$  :

$$m_k^* = m_k = m_k^{\text{eq}} \equiv W_k, \quad 0 \leq k \leq 2. \quad (2.23)$$

D’autre part, les moments non-conservés relaxent vers la valeur d’équilibre  $m_k^{\text{eq}} = G_k(W)$  avec une constante de temps  $\tau_k > 0$  :

$$\frac{dm_k}{dt} + \frac{1}{\tau_k} (m_k - m_k^{\text{eq}}) = 0, \quad k \geq 3. \quad (2.24)$$

Quand on utilise un schéma **explicite** en temps pour la relaxation (2.24) avec un pas de temps  $\Delta t > 0$ , on a :

$$m_k(\Delta t) = \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_k}\right) m_k(0) + \frac{\Delta t}{\tau_k} m_k^{\text{eq}}, \quad k \geq 3 \tag{2.25}$$

on pose

$$s_k = \frac{\Delta t}{\tau_k}, \quad k \geq 3. \tag{2.26}$$

- La transformation  $m \mapsto m^*$  est définie pour les moments d'indice  $\geq 3$  comme diagonale. Le nombre  $m_k^*$  est la valeur  $m_k(\Delta t)$  donnée par le schéma d'Euler explicite (2.25). On a donc

$$m_k^* = (1 - s_k) m_k + s_k m_k^{\text{eq}}, \quad k \geq 3. \tag{2.27}$$

On sait que le schéma d'Euler est stable pour  $0 \leq \frac{\Delta t}{\tau_k} \leq 2$ . Ceci fournit naturellement une contrainte pour le paramètre de relaxation  $s_k$  :

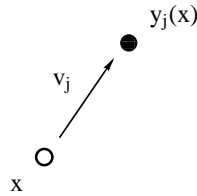
$$0 < s_k \leq 2, \quad k \geq 3. \tag{2.28}$$

On exclut la valeur  $s_k = 0$  car alors le moment correspondant serait conservé, ce qui revient à changer de vecteur  $W$  pour les variables fluides  $W$  à l'équilibre thermodynamique.

**d) Etape d'advection**

- L'opérateur d'advection  $A$  est non local en espace. Il est défini de l'ensemble des applications de  $\mathcal{L}^0$  à valeurs dans  $\mathbb{R}^{(J+1)t}$  dans lui-même. Si  $f^* = \mathcal{L}^0 \ni x \mapsto f^*(x) \in \mathbb{R}^{(J+1)t}$  est une distribution spatiale donnée de vitesse,  $(A \bullet f^*)(x)$  est une autre distribution spatiale de vitesse. L'opérateur de convection consiste simplement à propager à la vitesse  $v_j$  les particules présentes au sommet  $x \in \mathcal{L}^0$  vers le  $j^{\text{ième}}$  voisin (Figure 5) :

$$(Af^*)_j(x + v_j \Delta t) = f_j^*(x), \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0. \tag{2.29}$$



**Figure 5.** Etape d'advection. En un pas de temps, le nombre de particules  $f_j^*(x)$  est transféré du site  $x \in \mathcal{L}^0$  vers le site voisin  $y_j(x) = x + v_j \Delta t$ .

Compte tenu de la relation (2.3), on a de manière équivalente

$$(Af^*)_j(x) = f_j^*(x - v_j \Delta t), \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0. \tag{2.30}$$

- On peut interpréter facilement le schéma de transport (2.29) comme un schéma décentré amont pour l'équation d'advection

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_j \bullet f = 0, \quad 0 \leq j \leq J \tag{2.31}$$

avec un nombre de Courant-Friedrichs-Lewy exactement égal à l'unité.

- Le schéma d'avancement en temps est la composée du schéma de collision (2.27) suivi de l'étape d'advection (2.30). On a donc, avec la notation  $f_j(x, t)$  pour le nombre de particules présentes au point  $x \in \mathcal{L}^0$ , à l'instant  $t \in \Delta t \mathbb{N}$  et avec la vitesse  $v_j$  :

$$f_j(x, t + \Delta t) = (A \bullet C \bullet f)_j(x, t), \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0, \quad \frac{t}{\Delta t} \in \mathbb{N}. \quad (2.32)$$

On écrit classiquement ce schéma sous la forme

$$f_j(x + v_j \Delta t, t + \Delta t) = f_j^*(x, t), \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0, \quad \frac{t}{\Delta t} \in \mathbb{N}. \quad (2.33)$$

- Nous préférons l'écriture issue de la relation (2.30) :

$$f_j(x, t + \Delta t) = f_j^*(x - v_j \Delta t, t), \quad 0 \leq j \leq J, \quad x \in \mathcal{L}^0, \quad \frac{t}{\Delta t} \in \mathbb{N}. \quad (2.34)$$

Rappelons que dans le membre de droite de (2.34),  $f_j^*(y, t)$  désigne la  $j^{\text{ième}}$  composante de la distribution  $f^*$  au sommet  $y$  à l'issue de l'étape de collision relative à l'instant  $t$ .

#### e) Etude asymptotique à l'ordre zéro

- Dans les paragraphes qui suivent, nous suivons notre contribution [Du06]. Le schéma de Boltzmann défini à la relation (2.34) dépend du réseau  $\mathcal{L}$ , du pas d'espace  $\Delta x$ , de la matrice  $M$  qui relie (relation (2.15)) la distribution des vitesses  $f$  au vecteur des moments  $m$ , du choix de trois moments conservés formant le vecteur  $W$ , de la fonction  $G(\bullet)$  qui définit la distribution à l'équilibre, du pas de temps  $\Delta t$  et des rapports  $s_k$  entre le pas de temps et les temps de relaxation des collisions.
- Dans la suite, on garde fixe la topologie du réseau, et en particulier l'ensemble  $v_j$  des  $(J+1)$  vitesses, on fixe la matrice  $M$  et la fonction de distribution  $G(\bullet)$  à l'équilibre, on garde fixe le rapport  $\lambda = \Delta x / \Delta t$  ainsi que les rapports  $s_k$  introduits en (2.26) pour définir le schéma de collision (2.27) dans l'espace des moments, ce qui est en soi une hypothèse physiquement non triviale ! Alors l'ensemble du schéma de Boltzmann (2.34) dépend de l'unique paramètre réel  $\Delta t$ . Il suffit d'appliquer la formule de Taylor pour expliciter de proche en proche les équations aux dérivées partielles équivalentes.

#### Proposition 4. Développement à l'ordre zéro.

Pour un schéma de Boltzmann à deux dimensions d'espace défini par (2.34), on a :

$$f_j(x, t) = f_j^{\text{eq}}(x, t) + O(\Delta t) \quad (2.35)$$

$$f_j^*(x, t) = f_j^{\text{eq}}(x, t) + O(\Delta t). \quad (2.36)$$

- Rappelons que pour  $(f_j)_{0 \leq j \leq J}$  donné, un ensemble  $W$  de variables conservées est donné par les trois premiers moments (relations (2.9) et (2.10)) et les variables conservées définissent à leur tour une distribution à l'équilibre thermodynamique  $f_j^{\text{eq}} = G_j(W)$  (relation (2.12)) des moments hors équilibre. Puis on pose  $f^* = M^{-1} m^*$ , état de la distribution  $f$  à l'issue de l'étape de collision.

#### Preuve de la Proposition 4.

- On développe les deux membres de la relation (2.34) relativement à  $\Delta t$  :

$$\begin{aligned} f_j(x, t + \Delta t) &= f_j(x, t) + O(\Delta t) \\ f_j^*(x - v_j \Delta t, t) &= f_j^*(x, t) + O(\Delta t). \end{aligned}$$

Donc par sommation après multiplication par  $M_{kj}$

$$\begin{aligned} m_k^*(x, t) &= \sum_j M_{kj} f_j^*(x, t) = m_k(x, t) + O(\Delta t) \\ m_k^*(x, t) - m_k(x, t) &= O(\Delta t), \quad 0 \leq k \leq J. \end{aligned} \tag{2.37}$$

Mais compte tenu de (2.27),

$$m_k^*(x, t) - m_k(x, t) = -s_k(m_k(x, t) - m_k^{\text{eq}}(x, t)), \quad k \geq 3 \tag{2.38}$$

et bien entendu (cf. (2.23)),

$$m_k^*(x, t) = m_k(x, t) = m_k^{\text{eq}}(x, t) = W_k(x, t), \quad k \leq 2. \tag{2.39}$$

- Comme  $s_k > 0$  si  $k \geq 3$ , on tire de (2.38), (2.37) et (2.39) :

$$m_k(x, t) - m_k^{\text{eq}}(x, t) = O(\Delta t), \quad 0 \leq k \leq J \tag{2.40}$$

d'où la relation (2.35) par sommation à l'aide de  $M^{-1}$  :

$$f_j = \sum_k (M^{-1})_{jk} m_k, \quad 0 \leq j \leq J. \tag{2.41}$$

- La conclusion (2.36) est une conséquence claire du point précédent, de la relation (2.37) et du passage (2.41) vers la distribution  $f$ . □

**f) Asymptotique d'ordre un : fluide parfait**

- On poursuit le développement pour  $\Delta t \rightarrow 0$  à un ordre supérieur. Nous introduisons pour cela le tenseur d'ordre deux

$$F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta f_j^{\text{eq}}, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq 2, \tag{2.42}$$

nous posons  $\partial_\beta \equiv \frac{\partial}{\partial x_\beta}$  pour  $\beta = 1, 2$  et adoptons la convention de l'indice répété.

**Proposition 5. Equation d'Euler de la dynamique des gaz.**

Avec le schéma de Boltzmann (2.34), les variables conservées de densité  $\rho$  introduite en (2.9) et d'impulsion  $q$  proposée en (2.10) et les flux d'ordre deux (2.42), on a :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} q^\beta = O(\Delta t) \tag{2.43}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q^\alpha + \frac{\partial}{\partial x_\beta} F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = O(\Delta t), \quad 1 \leq \alpha \leq 2. \tag{2.44}$$

**Preuve de la Proposition 5**

- On développe à l'ordre deux les deux membres de la relation (2.34) :

$$\begin{aligned} f_j(x, t + \Delta t) &= f_j(x, t) + \Delta t \frac{\partial f_j}{\partial t} + O(\Delta t^2) = \\ &= f_j^*(x - v_j \Delta t, t) = f_j^*(x, t) - \Delta t v_j \cdot \nabla f_j^*(x, t) + O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

Puis on prend le moment d'ordre  $k$  de cette identité

$$m_k + \Delta t \frac{\partial m_k}{\partial t} + O(\Delta t^2) = m_k^* - \Delta t \sum_j M_{kj} v_j^\beta \partial_\beta f_j^* + O(\Delta t^2). \tag{2.45}$$

On utilise les développements (2.35) et (2.36) pour les termes d'ordre un en temps :

$$m_k^* - m_k = \Delta t \left( \frac{\partial m_k^{\text{eq}}}{\partial t} + \sum_j M_{kj} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{\text{eq}} \right) + O(\Delta t^2), \quad 0 \leq k \leq J. \tag{2.46}$$

- On choisit  $k = 0$  dans la relation (2.46). On en déduit (2.43) puisque  $m_0 \equiv m_0^* \equiv \rho(x, t)$ . Puis on prend  $k = \alpha$  ( $1 \leq \alpha \leq 2$ ). On a alors  $m_\alpha \equiv m_\alpha^* \equiv q^\alpha$  et compte tenu de (2.18), on a

$$\sum_j M_{kj} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{\text{eq}} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta \partial_\beta f_j^{\text{eq}} = \partial_\beta F_{\alpha\beta}^{\text{eq}},$$

ce qui établit la relation (2.44).  $\square$

- Il est alors naturel d'introduire le "défaut de conservation"  $\theta_k(x, t)$  par

$$\theta_k(x, t) = \sum_j M_{kj} \left( \frac{\partial f_j^{\text{eq}}}{\partial t} + v_j^\beta \frac{\partial}{\partial x_\beta} f_j^{\text{eq}} \right). \quad (2.47)$$

On a bien sûr

$$\theta_k(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} m_k^{\text{eq}} + \sum_j M_{kj} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{\text{eq}}, \quad 0 \leq k \leq J, \quad (2.48)$$

et la Proposition 5 montre que

$$\theta_i(x, t) = O(\Delta t), \quad 0 \leq i \leq 2. \quad (2.49)$$

Pour les autres valeurs de  $k$ , on a le résultat technique suivant.

### Proposition 6. Développement des moments hors équilibre.

Avec les notations précédentes,

$$m_k(x, t) = m_k^{\text{eq}}(x, t) - \frac{\Delta t}{s_k} \theta_k(x, t) + O(\Delta t^2), \quad k \geq 3 \quad (2.50)$$

$$m_k^*(x, t) = m_k^{\text{eq}}(x, t) - \left( \frac{1}{s_k} - 1 \right) \Delta t \theta_k(x, t) + O(\Delta t^2), \quad k \geq 3. \quad (2.51)$$

### Preuve de la Proposition 6

- On rapproche d'abord les relations (2.38) et (2.46) :

$$m_k - m_k^{\text{eq}} = -\frac{1}{s_k} (m_k^* - m_k) = -\frac{\Delta t}{s_k} \theta_k + O(\Delta t^2)$$

et la relation (2.50) s'en déduit. On a alors, compte tenu de (2.38) :

$$m_k^* = m_k^{\text{eq}} - \frac{\Delta t}{s_k} \theta_k - s_k (m_k - m_k^{\text{eq}}) + O(\Delta t^2) = m_k^{\text{eq}} + \Delta t \left( 1 - \frac{1}{s_k} \right) \theta_k + O(\Delta t^2),$$

ce qui établit la relation (2.51).  $\square$

### g) Asymptotique d'ordre deux : fluide visqueux

- Nous poursuivons la recherche de l'équation équivalente d'un schéma de Boltzmann en allant un cran plus loin dans le développement par rapport à l'infiniment petit  $\Delta t$ . On définit le tenseur  $\Lambda$  par les relations (2.52) et nous proposons de l'appeler "tenseur des moments-vitesses".

$$\Lambda_k^{\alpha\beta} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (M^{-1})_{jk}, \quad 0 \leq k \leq J, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq 2. \quad (2.52)$$

### Théorème 1. Equations de Navier-Stokes.

Avec les notations (2.42) pour le tenseur d'ordre deux  $F_{\alpha\beta}^{\text{eq}}$ , (2.47) pour le défaut de conservation  $\theta_k$  et (2.52) pour le tenseur des moments-vitesses  $\Lambda_k^{\alpha\beta}$ , on a le développement suivant du schéma de Boltzmann (2.34) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} q^\beta = O(\Delta t^2) \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q^\alpha + \frac{\partial}{\partial x_\beta} F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \Delta t \sum_{k \geq 3} \left( \frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{\alpha\beta} \frac{\partial}{\partial x_\beta} \theta_k + O(\Delta t^2), \quad 1 \leq \alpha \leq 2. \quad (2.54)$$

- On retrouve la conservation de la masse, au second ordre au moins. Dans le membre de droite de l'équation (2.54), la dérivée  $\partial_\beta \theta_k$  est en fait un terme **d'ordre deux** puisque le défaut de conservation  $\theta_k$  fait déjà apparaître les dérivées du premier ordre. Nous expliciterons au paragraphe suivant pour le cas particulier du modèle  $D_2Q_9$  la forme algébrique des différents termes de diffusion.

### Preuve du Théorème 1.

- On part du schéma (2.34), qu'on pousse cette fois à l'ordre deux :

$$\begin{aligned} f_j(x, t + \Delta t) &= f_j(x, t) + \Delta t \frac{\partial f_j}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \partial_t^2 f_j + O(\Delta t^3) = \\ &= f_j^*(x - v_j \Delta t, t) = f_j^*(x, t) - \Delta t v_j^\beta \partial_\beta f_j^* + \frac{\Delta t^2}{2} v_j^\beta \partial_\beta \partial_\gamma f_j^* + O(\Delta t^3). \end{aligned}$$

Puis on prend le moment d'ordre  $k$  de cette identité :

$$\left\{ \begin{aligned} m_k^* - m_k &= \Delta t \sum_j M_{kj} \left( \frac{\partial f_j}{\partial t} + v_j^\beta \partial_\beta f_j^* \right) + \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} \sum_j M_{kj} \left[ \partial_t^2 f_j - v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^* \right] + O(\Delta t^3). \end{aligned} \right. \quad (2.55)$$

- Lorsque  $k = i \in \{0, 1, 2\}$ , le membre de gauche de (2.55) est nul (*cf.* (2.23)). On en déduit donc après division par  $\Delta t$  :

$$\left\{ \begin{aligned} \partial_t m_i + \sum_j M_{ij} v_j^\beta \partial_\beta f_j^* &= \\ = \frac{\Delta t}{2} \left( -\partial_t^2 m_i + \sum_j M_{ij} v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^* \right) &+ O(\Delta t^2), \quad 0 \leq i \leq 2. \end{aligned} \right. \quad (2.56)$$

Dans la relation précédente, on peut remplacer  $\partial_t^2 m_i$  par  $\partial_t^2 m_i^{\text{eq}}$  et  $\partial_\beta \partial_\gamma f_j^*$  par  $\partial_\beta \partial_\gamma f_j^{\text{eq}}$  sans changer l'ordre en  $\Delta t$  dans le membre de droite. On peut aussi utiliser le développement (2.51) pour évaluer  $\partial_\beta f_j^*$  :

$$\partial_\beta f_j^* = \partial_\beta f_j^{\text{eq}} - \sum_{k \geq 3} \left( \frac{1}{s_k} - 1 \right) \Delta t M_{jk}^{-1} \partial_\beta \theta_k + O(\Delta t^2) \quad (2.57)$$

si  $i \leq 2$ , on a aussi  $m_i \equiv m_i^{\text{eq}}$ . On en déduit :

$$\left\{ \begin{aligned} \partial_t m_i^{\text{eq}} + \partial_\beta F_{i\beta}^{\text{eq}} &= \Delta t \sum_{k \geq 3} \left( \frac{1}{s_k} - 1 \right) \sum_j M_{ij} v_j^\beta M_{jk}^{-1} \partial_\beta \theta_k + \\ &+ \frac{\Delta t}{2} \left( -\partial_t^2 m_i^{\text{eq}} + \sum_j M_{ij} v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{\text{eq}} \right) + O(\Delta t^2), \\ &0 \leq i \leq 2. \end{aligned} \right. \quad (2.58)$$

- Nous particularisons encore et prenons  $i = 0$ , ce qui indique que nous nous intéressons à la conservation de la masse. On a bien sûr  $m_0 = \rho$  et  $F_{0\beta} = q^\beta$ . De plus  $M_{0j} = 1$ ,  $v_j^\beta = M_{\beta j}$ , donc

$$\sum_j M_{ij} v_j^\beta M_{jk}^{-1} = \sum_j M_{\beta j} M^{-1} j k = \delta_{\beta k} = 0 \quad \text{car } \beta \leq 2, \quad k \geq 3.$$

De plus

$$\begin{aligned} \partial_t^2 \rho &= -\partial_t \partial_\beta q^\beta + O(\Delta t) = -\partial_\beta \partial_t q^\beta + O(\Delta t) \\ &= \partial_\beta \partial_\gamma F_{\beta\gamma}^{\text{eq}} + O(\Delta t) && \text{compte tenu de (2.43)-(2.44)} \\ &= \sum_j v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{\text{eq}} + O(\Delta t) && \text{au vu de (2.42)} \end{aligned}$$

et le dernier terme du membre de droite de l'égalité (2.58) est nul au second ordre près. La relation (2.53) est donc établie.

- Nous prenons maintenant  $i = \alpha \in \{1, 2\}$  et réécrivons la relation (2.58) dans ce cas particulier :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t q^\alpha + \partial_\beta F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \Delta t \sum_{k \geq 3} \left( \frac{1}{s_k} - 1 \right) \left[ \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta M_{jk}^{-1} \right] \partial_\beta \theta_k + \\ + \frac{\Delta t}{2} \left( -\partial_t^2 q^\alpha + \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{\text{eq}} \right) + O(\Delta t^2). \end{array} \right. \quad (2.59)$$

Nous reconnaissons le tenseur des moments-vitesses  $\Lambda_k^{\alpha\beta}$  au membre de droite de (2.59). Il est aussi possible de le faire apparaître en modifiant l'écriture algébrique des deux derniers termes :

$$\begin{aligned} -\partial_t^2 q^\alpha + \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{\text{eq}} &= \partial_t \partial_\beta F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} + \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta v_j^\gamma \partial_\beta \partial_\gamma f_j^{\text{eq}} + O(\Delta t) \\ &= \partial_\beta \left\{ \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (\partial_t f_j^{\text{eq}} + v_j^\gamma \partial_\gamma f_j^{\text{eq}}) \right\} + O(\Delta t) \\ &= \partial_\beta \left\{ \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta \sum_k M_{kj}^{-1} \theta_k \right\} + O(\Delta t) && \text{c.f. (2.47)} \\ &= \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta \sum_{k \geq 3} M_{kj}^{-1} (\partial_\beta \theta_k) + O(\Delta t) && \text{au vu de (2.49)} \\ &= \sum_{k \geq 3} \Lambda_k^{\alpha\beta} (\partial_\beta \theta_k) + O(\Delta t). \end{aligned}$$

Nous déduisons du calcul précédent et de (2.59) :

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

ce qui constitue la relation (2.54), à une variante près dans l'écriture.  $\square$

- Nous avons montré que dans des conditions très générales, l'équation équivalente pour les variables hydrodynamiques (masse et impulsion) d'un schéma de Boltzmann correspond au système des équations d'Euler pour l'ordre un, à celui de Navier-Stokes pour l'ordre deux. Une version discrète du développement de Chapman-Enskog, en quelque sorte. Le développement qui précède, élaboré pour ce "mini-cours", a donné lieu à une version anglaise [Du06] en cours de publication.

### 3. MODÈLE BIDIMENSIONNEL À NEUF VITESSES

Un schéma de Boltzmann sur réseau contient beaucoup de paramètres physiques à régler. Bien entendu, cela exige un investissement assez lourd. Mais cette flexibilité permet aussi de simuler de nombreux phénomènes physiques, ce qui fait toute la richesse du sujet. Nous explorons dans ce paragraphe le cas particulier d'un modèle classique pour un fluide newtonien.

#### a) Géométrie

- Le réseau du modèle à neuf vitesses (noté, rappelons-le,  $D_2Q_9$  dans le vocabulaire des spécialistes du gaz sur réseau) est carré et de pas  $\Delta x > 0$  :

$$\mathcal{L}^0 = (\Delta x \mathbb{Z}) \times (\Delta x \mathbb{Z}). \quad (3.1)$$

Les sites voisins d'un sommet donné  $x \in \mathcal{L}^0$  sont d'une part  $x$  lui-même (avec le numéro 0) et d'autre part les huit voisins représentés à la Figure 4 :

$$y_j(x) = x + \Delta x e_j, \quad 0 \leq j \leq J \equiv 8 \tag{3.2}$$

avec

$$\begin{cases} e_0 = 0, e_1 = 1, e_2 = i, e_3 = -1, e_4 = -i \\ e_5 = (1 + i), e_6 = (-1 + i), e_7 = (-1 - i), e_8 = 1 - i. \end{cases} \tag{3.3}$$

- La donnée d'un pas de temps  $\Delta t$  permet de définir une échelle de vitesse :

$$\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t} \tag{3.4}$$

qu'on suppose fixée dans toute la suite.

- Les moments à l'équilibre  $W = (\rho, q^1, q^2) \equiv (m_0, m_1, m_2)$  sont définis avec la même convention qu'au paragraphe 3 :

$$m_0 = \sum_{j=0}^8 f_j \tag{3.5}$$

$$m_\alpha = \sum_{j=0}^8 e_j^\alpha \frac{\Delta x}{\Delta t} f_j, \quad 1 \leq \alpha \leq 2 \tag{3.6}$$

où  $e_j^\alpha$  sont les composantes cartésiennes des vecteurs  $e_j$ . On a donc

$$m_1 = \lambda (f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8) \tag{3.7}$$

$$m_2 = \lambda (f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8). \tag{3.8}$$

### b) Moments hors équilibre

- Nous suivons essentiellement le travail de Lallemand et Luo [LL2k], même si nos notations peuvent être différentes. Les moments hors équilibre sont numérotés de 3 à 8.

- Le moment  $m_3$  est lié à l'énergie cinétique  $\varepsilon$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \sum_j |v_j|^2 f_j \tag{3.9}$$

où

$$v_j = \lambda e_j, \quad 0 \leq j \leq 8 \tag{3.10}$$

qui est supposée relaxer avec une constante de temps  $\frac{\Delta t}{s_3}$  :

$$\varepsilon^* = (1 - s_3) \varepsilon + s_3 \varepsilon^{\text{eq}}. \tag{3.11}$$

Nous définissons plus loin l'énergie cinétique à l'équilibre  $\varepsilon^{\text{eq}}$ . Nous remarquons que  $\varepsilon$  définie par (3.9) est une forme linéaire par rapport au vecteur  $f$ , tout comme la densité et les deux composantes de l'impulsion. Donc toute combinaison linéaire  $m_3$  de la forme  $p\varepsilon - \alpha\rho$  (on n'inclut pas l'impulsion car  $\varepsilon$  est un scalaire) relaxe selon une relation du type

$$m_3^* = (1 - s_3) m_3 + s_3 m_3^{\text{eq}} \tag{3.12}$$

puisque  $\rho$  est un moment conservé :

$$\rho^* = \rho = \rho^{\text{eq}}. \tag{3.13}$$

- On fixe  $p \simeq \frac{1}{\lambda^2}$  pour travailler avec une variable  $m_3$  homogène à  $f$  (donc à la densité  $\rho$ ) et  $\alpha$  sans dimension de sorte que les vecteurs  $m_3$  et  $\rho$  soient orthogonaux.

**Proposition 7. Moment associé à l'énergie cinétique.**

Si on pose

$$m_3 = \frac{6}{\lambda^2} \varepsilon - 4\rho \quad (3.14)$$

alors les deux vecteurs lignes correspondants  $M_{3j}$  et  $M_{0j}$  de la matrice  $M$  telle que  $m \equiv M \bullet f$  sont orthogonaux :  $\sum_j M_{3j} M_{0j} = 0$ .

**Preuve de la Proposition 7.**

- On a

$$\frac{\varepsilon}{\lambda^2} = \frac{1}{2}(f_1 + f_2 + f_3 + f_4) + (f_5 + f_6 + f_7 + f_8), \quad (3.15)$$

donc

$$\frac{\varepsilon}{\lambda^2} - \alpha\rho = -\alpha f_0 + \left(\frac{1}{2} - \alpha\right) \sum_{j=1}^4 f_j + (1 - \alpha) \sum_{j=5}^8 f_j$$

et

$$\left(\frac{\varepsilon}{\lambda^2} - \alpha\rho, \rho\right) = -\alpha + 4\left(\frac{1}{2} - \alpha\right) + 4(1 - \alpha) = 6 - 9\alpha$$

qui est nul pour  $\alpha = \frac{2}{3}$ . □

- De façon générale, nous construisons une matrice  $M$  **orthogonale** dont l'inverse sera ensuite très facile à calculer et à manipuler algébriquement. Nous retenons

$$m_3 = -4f_0 - \sum_{j=1}^4 f_j + 2 \sum_{j=5}^9 f_j, \quad (3.16)$$

en fixant le coefficient de proportionnalité entre  $m_3$  et  $\frac{\varepsilon}{\lambda^2} - \frac{2}{3}\rho$  de manière à manipuler des nombres entiers très simples.

- Le candidat suivant est le carré de l'énergie cinétique  $\chi$ , défini par

$$\chi = \sum_j \left(\frac{1}{2}|v_j|^2\right)^2 f_j \quad (3.17)$$

et qui vérifie

$$\frac{\chi}{\lambda^4} = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 f_j + \sum_{j=5}^8 f_j. \quad (3.18)$$

On cherche  $m_4$  comme un scalaire formé à partir de  $\chi$  et des deux autres scalaires  $\rho$  et  $m_3$  déjà construits, donc  $m_4$  proportionnel à  $\frac{4}{\lambda^2} \chi - \alpha\rho - \beta m_3$  de façon que  $m_4$  soit orthogonal à  $\rho$  et à  $m_3$ . On a

$$\left(\frac{4}{\lambda^2} \chi - \alpha\rho - \beta m_3, \rho\right) = -\alpha + 4(1 - \alpha) + 4(4 - \alpha) = 20 - 9\alpha$$

$$\left(\frac{4}{\lambda^2} \chi - \alpha\rho - \beta m_3, m_3\right) = -4(4\beta) - 4(1 + \beta) + 8(4 - 2\beta) = 28 - 36\beta.$$

On choisit  $\alpha = \frac{20}{9}$  et  $\beta = \frac{7}{9}$ . Donc

$$\frac{4}{\lambda^4} \chi - \frac{20}{9} \rho - \frac{7}{9} m_3 = \frac{8}{9} f_0 - \frac{4}{9} \sum_{j=1}^4 f_j \equiv m_4$$

et on a montré la :

**Proposition 8. Moment associé au carré de l'énergie cinétique.**

Si on pose

$$m_4 = 4f_0 - 2 \sum_{j=1}^4 f_j + \sum_{j=5}^8 f_j \quad (3.19)$$

c'est-à-dire

$$m_4 = \frac{18}{\lambda^4} \chi - 10\rho - \frac{7}{2} m_3, \quad (3.20)$$

la ligne  $m_4$  des  $(M_{4j})_{0 \leq j \leq 8}$  est orthogonale aux lignes numéros 0 et 3. On note que les lignes et les colonnes de la matrice  $M$  sont numérotées de 0 à 8, ce qui n'est pas usuel !

- On s'intéresse ensuite aux moments d'ordre trois associés au **flux de chaleur** :

$$\varphi = \sum_j \frac{1}{2} |v_j|^2 v_j f_j \quad (3.21)$$

soit

$$\varphi^1 = \frac{\lambda}{2} (f_1 - f_3 + 2(f_5 - f_6 - f_7 + f_8)) \quad (3.22)$$

$$\varphi^2 = \frac{\lambda}{2} (f_2 - f_4 + 2(f_5 + f_6 - f_7 - f_8)). \quad (3.23)$$

On retranche à  $\varphi^1$  et à  $\varphi^2$  la bonne combinaison de  $q^1$  et  $q^2$  pour avoir un vecteur orthogonal à  $q^1$  :

$$\left( \frac{2}{\lambda^3} \varphi^1 - \frac{\alpha}{\lambda} q^1, q^1 \right) = (1 - \alpha) - (1 + \alpha) + 4(2 - \alpha) = 10 - 6\alpha$$

et un vecteur orthogonal à  $q^2$  :

$$\left( \frac{2}{\lambda^3} \varphi^2 - \frac{5}{3\lambda} q^2, q^2 \right) = 2 \left( 1 - \frac{5}{3} \right) - \frac{4}{3} + \frac{4}{3} = 0.$$

- On cherche donc  $m_5$  proportionnel à

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

soit

$$m_5 = \frac{6}{\lambda^3} \varphi^1 - 5 \frac{q^1}{\lambda}. \quad (3.24)$$

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

$$m_6 = \frac{6}{\lambda^3} \varphi^2 - 5 \frac{q^2}{\lambda}. \quad (3.25)$$

**Proposition 9. Moments associés au flux de la chaleur.**

Les moments  $m_5$  et  $m_6$  définis aux relations (3.24) et (3.25) vérifient

$$m_5 = -2f_1 + 2f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 \quad (3.26)$$

$$m_6 = -2f_2 + 2f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8. \quad (3.27)$$

Ils sont orthogonaux à  $m_1$  et  $m_2$  respectivement, introduits en (3.7) et (3.8).

- Il reste à compléter les moments d'ordre deux. Pour "fermer" les équations du fluide parfait, nous avons besoin des trois moments

$$F_{\alpha\beta} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta f_j, \quad 1 \leq \alpha \leq \beta \leq 2 \quad (3.28)$$

et nous avons

$$F_{11} = \lambda^2(f_1 + f_3 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8) \quad (3.29)$$

$$F_{22} = \lambda^2(f_2 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8) \quad (3.30)$$

$$F_{12} = \lambda^2(f_5 - f_6 + f_7 - f_8). \quad (3.31)$$

Nous disposons déjà de l'énergie cinétique  $\varepsilon$  introduite à la relation (3.9) (voir aussi (3.15)) et nous avons clairement

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (F_{11} + F_{22}). \quad (3.32)$$

Il est donc naturel de chercher un moment  $m_7$  proportionnel à  $F_{11} - F_{22}$  et un moment  $m_8$  proportionnel à  $F_{12}$ .

**Proposition 10. Deux moments tensoriels d'ordre deux.**

On pose

$$m_7 = \frac{1}{\lambda^2} (F_{11} - F_{22}) \quad (3.33)$$

$$m_8 = \frac{1}{\lambda^2} F_{12} \quad (3.34)$$

alors les deux lignes  $M_{7j}$  et  $M_{8j}$  de la matrice  $M$  sont données par

$$m_7 = f_1 - f_2 + f_3 - f_4 \quad (3.35)$$

$$m_8 = f_5 - f_6 + f_7 - f_8. \quad (3.36)$$

Elles sont orthogonales entre elles ainsi qu'à toutes les autres lignes de la matrice  $M$ .

- Les relations (3.5), (3.7), (3.8), (3.16), (3.19), (3.26), (3.27), (3.33) et (3.34) permettent de définir une transformation  $f \mapsto m \equiv M \bullet f$  de la distribution  $f$ . La matrice  $M$  est donnée par

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & 0 & -\lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & -\lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & +1 & -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

**Proposition 11.** Les lignes de la matrice  $M$  sont orthogonales.

L'inverse de la matrice  $M$  définie en (3.37) s'écrit :

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 1/9 & 0 & 0 & -4/36 & 4/36 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/9 & 1/6\lambda & 0 & -1/36 & -2/36 & -2/12 & 0 & 1/4 & 0 \\ 1/9 & 0 & 1/6\lambda & -1/36 & -2/36 & 0 & -2/12 & -1/4 & 0 \\ 1/9 & -1/6\lambda & 0 & -1/36 & -2/36 & 2/12 & 0 & 1/4 & 0 \\ 1/9 & 0 & -1/6\lambda & -1/36 & -2/36 & 0 & 2/12 & -1/4 & 0 \\ 1/9 & 1/6\lambda & 1/6\lambda & 2/36 & 1/36 & 1/12 & 1/12 & 0 & 1/4 \\ 1/9 & -1/6\lambda & 1/6\lambda & 2/36 & 1/36 & -1/12 & 1/12 & 0 & -1/4 \\ 1/9 & -1/6\lambda & -1/6\lambda & 2/36 & 1/36 & -1/12 & -1/12 & 0 & 1/4 \\ 1/9 & 1/6\lambda & -1/6\lambda & 2/36 & 1/36 & 1/12 & -1/12 & 0 & -1/4 \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

- La preuve est un exercice laissé au lecteur.

### c) Distribution d'équilibre

- Nous proposons dans ce paragraphe d'expliciter la distribution d'équilibre

$$f_j^{\text{eq}} = G_j(W), \quad 0 \leq j \leq 8 \quad (3.39)$$

introduite à la relation (2.12) ; le vecteur  $W$  des variables conservées, introduit en (2.12), est donné pour le gaz bidimensionnel à neuf vitesses par les relations (3.5), (3.7) et (3.8). Nous disposons donc des trois premiers moments des neuf moments  $m_k^{\text{eq}}$  ( $0 \leq k \leq 9$ ) à l'équilibre thermique :

$$m_k^{\text{eq}} = \sum_{j=0}^8 M_{kj} G_j(W) = m_k^{\text{eq}}(W), \quad 0 \leq k \leq 8. \quad (3.40)$$

Rappelons que la matrice  $M$  du modèle  $D_2Q_9$  a été explicitée à la relation (3.37). Nous précisons d'abord le choix des  $m_k^{\text{eq}}$  pour  $k \geq 3$  (puisque les moments antérieurs pour  $k \leq 2$  sont conservés), puis nous reconstruisons la distribution  $G_j(\bullet)$  à l'équilibre.

- Le moment  $m_3$  est donné à la relation (3.14) et dans le cas d'une distribution d'équilibre de l'énergie cinétique  $\varepsilon$  est donnée à partir de la relation (A.10) de l'Annexe :

$$\varepsilon^{\text{eq}} = \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \xi \rho \quad (3.41)$$

où  $|u|$  désigne le module de la vitesse et  $\xi$  une échelle homogène au carré d'une vitesse. Compte tenu de (A.10) et (A.11), la distribution d'équilibre du tenseur d'ordre deux  $F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} \equiv \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta f_j^{\text{eq}}$  est donnée par

$$F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \rho u^\alpha u^\beta + \xi \rho \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.42)$$

- On reconnaît bien entendu les flux d'impulsion des équations d'Euler de la dynamique des gaz, avec une loi de pression linéaire en  $\rho$ , c'est-à-dire une linéarisation de la pression autour d'une densité de référence

$$p - p_0 = c_0^2(\rho - \rho_0) + O((\rho - \rho_0)^2). \quad (3.43)$$

Le rapprochement de (3.42) et (3.43) a montré que  $\xi = c_0^2$ . Afin de minimiser l'atténuation des modes sonores en présence d'une vitesse d'advection, les concepteurs de la méthode (voir Lallemand-Luo [LL2k]) et les références incluses) ont proposé de choisir

$$c_0 = \frac{\lambda}{\sqrt{3}}, \quad \lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t} \quad (3.44)$$

pour la célérité des ondes sonores.

- Il reste maintenant à définir le membre de droite de (3.41) en fonction des variables conservées, c'est-à-dire  $\rho$  et  $q$ . On a bien entendu la relation classique

$$u = \frac{q}{\rho} \quad (3.45)$$

qui conduit à

$$\varepsilon^{\text{eq}} = \frac{1}{2} \frac{|q|^2}{\rho} + c_0^2 \rho. \quad (3.46)$$

- L'état de l'art actuel en matière de gaz sur réseaux consiste à se restreindre à des moments à l'équilibre qui sont des **polynômes** par rapport aux variables conservées. Comme pour l'approximation (3.43) de la pression, on suppose que la densité est voisine d'une valeur de référence  $\rho_0$  et l'énergie cinétique à l'équilibre utilisée dans le modèle  $D_2Q_9$  vaut finalement, compte tenu de (3.44) :

$$\varepsilon^{\text{eq}} = \frac{1}{2\rho_0} |q|^2 + \frac{\lambda^2}{3} \rho. \quad (3.47)$$

- La valeur d'équilibre de  $m_3$  est une conséquence directe de (3.14) et (3.47) :

$$m_3^{\text{eq}} = -2\rho + \frac{3}{\lambda^2 \rho_0} |q|^2. \quad (3.48)$$

- Le moment suivant,  $m_4$  est lié au carré de l'énergie cinétique  $\chi$  et aux moments  $\rho \equiv m_0$  et  $m_3$  via la relation (3.20). On adopte pour  $\chi^{\text{eq}}$  la relation (très) approchée proposée à l'Annexe (relation (A.15)) :

$$\chi^{\text{eq}} = 2c_0^4 \rho + \frac{5}{4} c_0^2 \rho |u|^2, \quad (3.49)$$

soit avec les approximations précédentes concernant la densité et le choix (3.44) pour la célérité des ondes sonores :

$$\chi^{\text{eq}} = \frac{2}{9} \lambda^4 \rho + \frac{5}{12} \frac{\lambda^2}{\rho_0} |q|^2. \quad (3.50)$$

Compte tenu de la relation (3.20), il vient

$$m_4^{\text{eq}} = \frac{18}{\lambda^4} \left( \frac{2}{9} \lambda^4 \rho + \frac{5}{12} \frac{\lambda^2}{\rho_0} |q|^2 \right) - 10\rho - \frac{7}{2} \left( -2\rho + \frac{3}{\lambda^2 \rho_0} |q|^2 \right)$$

soit

$$m_4^{\text{eq}} = \rho - \frac{3}{\rho_0 \lambda^2} |q|^2. \quad (3.51)$$

- Pour le flux de chaleur  $\varphi$ , la valeur à l'équilibre approchée pour une distribution Gaussienne correspond à (cf. relations (A.13) et (A.14)) :

$$\varphi^{\text{eq}} = 2c_0^2 q. \quad (3.52)$$

Donc compte tenu des définitions (3.24) et (3.25) des moments  $m_5$  et  $m_6$ , on a pour l'équilibre

$$m_5^{\text{eq}} = -\frac{1}{\lambda} q^1 \quad (3.53)$$

$$m_6^{\text{eq}} = -\frac{1}{\lambda} q^2. \quad (3.54)$$

- Les deux derniers moments  $m_7$  et  $m_8$  sont définis aux relations (3.33) et (3.34) à partir de combinaisons de moments d'ordre deux. Or les moments à l'équilibre sont calculés par la relation (3.42). Compte tenu du choix d'une "super acoustique non linéaire", on a

$$F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \frac{1}{\rho_0} q^\alpha q^\beta + \frac{\lambda^2}{3} \rho \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.55)$$

- La valeur à l'équilibre de  $m_7$  est donc une conséquence directe de (3.33) et (3.55) :

$$m_7^{\text{eq}} = \frac{1}{\rho_0 \lambda^2} [(q_x)^2 - (q_y)^2] \quad (3.56)$$

avec

$$q_x \equiv q^1, \quad q_y \equiv q^2. \quad (3.57)$$

Pour  $m_8$ , on déduit de (3.34) et (3.55) :

$$m_8^{\text{eq}} = \frac{1}{\rho_0 \lambda^2} q_x q_y. \quad (3.58)$$

**Proposition 12. Moments à l'équilibre.**

Avec la matrice  $M$  proposée à la relation (3.37), le modèle  $D_2Q_9$  a une distribution d'équilibre  $G_j(W)$  telle que les composantes 3 à 8 de  $M \bullet G(W)$  sont données par les relations (3.48), (3.51), (3.53), (3.54), (3.56) et (3.58).

**Proposition 13. Distribution d'équilibre.**

Avec les choix faits plus haut, la distribution à l'équilibre thermodynamique  $G_j(W)$  s'écrit

$$G_j(W) = w_j \left[ \rho + \frac{3}{\lambda} (e_j \bullet q) + \frac{9}{2\rho_0 \lambda^2} (e_j \bullet q)^2 - \frac{3}{2\rho_0 \lambda^2} |q|^2 \right] \quad (3.59)$$

avec  $(e_j)_{0 \leq j \leq 8}$  donnés (dans cet ordre !) à la relation (3.3) et  $(w_j)_{0 \leq j \leq 8}$  tels que

$$w_0 = \frac{4}{9}; \quad w_1 \text{ à } w_4 = \frac{1}{9}; \quad w_5 \text{ à } w_8 = \frac{1}{36}. \quad (3.60)$$

**Preuve de la Proposition 13.**

- On explicite les neuf composantes de la distribution d'équilibre, puis on calcule les neuf moments à l'aide de la matrice  $M$ .

$$G_0(W) = \frac{4}{9} \rho - \frac{2}{3\rho_0 \lambda^2} |q|^2,$$

$$G_1(W) = \frac{1}{9} \rho + \frac{1}{3\lambda} q_x + \frac{1}{2\rho_0 \lambda^2} q_x^2 - \frac{1}{6\rho_0 \lambda^2} (q_x^2 + q_y^2),$$

$$G_2(W) = \frac{1}{9} \rho + \frac{1}{3\lambda} q_x + \frac{1}{3\lambda^2 \rho_0} q_x^2 - \frac{1}{6\rho_0 \lambda^2} q_y^2,$$

$$G_3(W) = \frac{1}{9} \rho + \frac{1}{3\lambda} q_y - \frac{1}{6\rho_0 \lambda^2} q_x^2 + \frac{1}{3\rho_0 \lambda^2} q_y^2,$$

$$G_4(W) = \frac{1}{9} \rho - \frac{1}{3\lambda} q_x + \frac{1}{3\rho_0 \lambda^2} q_x^2 - \frac{1}{6\rho_0 \lambda^2} q_y^2,$$

$$G_5(W) = \frac{1}{9} \rho - \frac{1}{3\lambda} q_y - \frac{1}{6\rho_0 \lambda^2} q_x^2 + \frac{1}{3\rho_0 \lambda^2} q_y^2,$$

$$G_6(W) = \frac{1}{36} \rho + \frac{1}{12\lambda} (q_x + q_y) + \frac{1}{8\lambda^2 \rho_0} (q_x + q_y)^2 - \frac{1}{24\rho_0 \lambda^2} (q_x^2 + q_y^2),$$

$$G_7(W) = \frac{\rho}{36} + \frac{1}{12\lambda} (q_x + q_y) + \frac{1}{12\rho_0 \lambda^2} (q_x^2 + q_y^2) + \frac{1}{4\rho_0 \lambda^2} q_x q_y,$$

$$G_8(W) = \frac{\rho}{36} + \frac{1}{12\lambda} (-q_x + q_y) + \frac{1}{12\rho_0 \lambda^2} (q_x^2 + q_y^2) - \frac{1}{4\rho_0 \lambda^2} q_x q_y,$$

$$G_9(W) = \frac{\rho}{36} - \frac{1}{12\lambda} (q_x + q_y) + \frac{1}{12\rho_0 \lambda^2} (q_x^2 + q_y^2) + \frac{1}{4\rho_0 \lambda^2} q_x q_y,$$

$$G_{10}(W) = \frac{\rho}{36} + \frac{1}{12\lambda} (q_x - q_y) + \frac{1}{12\rho_0 \lambda^2} (q_x^2 + q_y^2) - \frac{1}{4\rho_0 \lambda^2} q_x q_y.$$

- Il vient ensuite :

$$m_0^{\text{eq}} = G_0 + G_1 + G_2 + G_3 + G_4 + G_5 + G_6 + G_7 + G_8 = \rho,$$

$$m_1^{\text{eq}} = \lambda(G_1 - G_3 + G_5 - G_6 - G_7 + G_8) = q_x,$$

$$m_2^{\text{eq}} = \lambda(G_2 - G_4 + G_5 + G_6 - G_7 - G_8) = q_y,$$

$$m_3^{\text{eq}} = -4G_0 - (G_1 + G_2 + G_3 + G_4) + 2(G_5 + G_6 + G_7 + G_8) \quad \text{c.f. (3.16),}$$

$$= -2\rho + \frac{3}{\rho_0 \lambda^2} |q|^2, \quad \text{en accord avec (3.48),}$$

$$m_4^{\text{eq}} = 4G_0 - 2(G_1 + G_2 + G_3 + G_4) + (G_5 + G_6 + G_7 + G_8) \quad \text{c.f. (3.19),}$$

$$= \rho - \frac{3}{\rho_0 \lambda^2} |q|^2, \quad \text{en accord avec (3.51),}$$

$$m_5^{\text{eq}} = -2G_1 + 2G_3 + G_5 - G_6 - G_7 + G_8 \quad \text{c.f. (3.26),}$$

$$= -\frac{1}{\lambda} q_x, \quad \text{ce qui confirme (3.53),}$$

$$m_6^{\text{eq}} = -2G_2 + 2G_4 + G_5 + G_6 - G_7 - G_8 \quad \text{c.f. (3.27),}$$

$$= -\frac{1}{\lambda} q_y, \quad \text{en accord avec (3.54),}$$

$$m_7^{\text{eq}} = G_1 - G_2 + G_3 - G_4 \quad \text{c.f. (3.35),}$$

$$= \frac{1}{\rho_0 \lambda^2} (q_x^2 - q_y^2), \quad \text{déjà trouvé en (3.56),}$$

$$m_8^{\text{eq}} = G_5 - G_6 + G_7 - G_8 \quad \text{c.f. (3.36),}$$

$$= \frac{1}{\rho_0 \lambda^2} q_x q_y, \quad \text{en accord avec la relation (3.58).}$$

La Proposition est donc établie. Ouf ! □

- La distribution d'équilibre (3.59)-(3.60) correspond à une distribution classique dans les modèles de type BGK, ainsi que le signalent Lallemand et Luo [LL2k].

#### d) Termes visqueux

- Nous avons vu lors du développement asymptotique général que si on pousse l'analyse du schéma équivalent à l'ordre deux en  $\Delta t$ , en introduisant le défaut de conservation  $\theta_k$  du  $k^{\text{ième}}$  moment (relation (2.48)), c'est-à-dire

$$\theta_k \equiv \frac{\partial}{\partial t} m_k^{\text{eq}} + \sum_j M_{kj} v_j^\beta \partial_\beta f_j^{\text{eq}}; \quad k \geq 3, \quad (3.61)$$

et le tenseur  $\Lambda_k^{\alpha\beta}$  des moments-vitesses (relation (2.52)), c'est-à-dire

$$\Lambda_k^{\alpha\beta} = \sum_j v_j^\alpha v_j^\beta (M^{-1})_{jk}, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq 2, \quad 0 \leq k \leq 2, \quad (3.62)$$

alors on a les équations de Navier-Stokes suivantes :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} q = O(\Delta t^2) \quad (3.63)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} q^\alpha + \partial_\beta F_{\alpha\beta}^{\text{eq}} = \Delta t \sum_{k \geq 3} \left( \frac{1}{s_k} - \frac{1}{2} \right) \Lambda_k^{\alpha\beta} \partial_\beta \theta_k + O(\Delta t^2), \quad 1 \leq \alpha \leq 2 \quad (3.64)$$

comme équations équivalentes du schéma de Boltzmann à l'ordre deux. Dans la relation (3.64), les coefficients de relaxation  $s_k$  sont compris entre 0 et 2 et, compte tenu des relations (2.27) et celles qui précèdent, définissent le défaut d'équilibre  $m_k \rightarrow m_k^*$  des moments non conservés.

- Afin d'expliciter les coefficients  $s_k$  qui définissent le schéma en fonction des viscosités de cisaillement  $\mu$  et de volume  $\zeta$  de sorte que à deux dimensions d'espace

$$\tau_{\alpha\beta} = \frac{\mu}{\rho_0} (\partial_\alpha q^\beta + \partial_\beta q^\alpha) + \frac{-\mu + \zeta}{\rho_0} (\operatorname{div} q) \delta_\alpha^\beta, \quad 1 \leq \alpha, \beta \leq 2, \quad (3.65)$$

nous écrivons les équations de Navier-Stokes dans l'approximation acoustique (3.43)

$$\frac{\partial q^\alpha}{\partial t} + \partial_\beta F_{\alpha\beta} = \partial_\beta \tau_{\alpha\beta} \equiv \frac{\mu}{\rho_0} \Delta q^\alpha + \frac{\zeta}{\mu_0} \partial_\alpha (\operatorname{div} q), \quad 1 \leq \alpha \leq 2, \quad (3.66)$$

nous calculons d'abord le tenseur des moments-vitesses, compte tenu de l'explicitation (3.38) de la matrice  $M^{-1}$ .

**Proposition 14. Tenseur des moments-vitesses.**

Avec le choix (3.38) pour  $M^{-1}$  (i.e. (3.37) pour la matrice  $M$ ) et les relations classiques  $M_{\alpha j} \equiv v_j^\alpha$ , on a

$$\Lambda_0 = \frac{2}{3} \lambda^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.67)$$

$$\Lambda_3 = \frac{\lambda^2}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.68)$$

$$\Lambda_7 = \frac{\lambda^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

$$\Lambda_8 = \lambda^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.70)$$

$$\Lambda_1 = \Lambda_2 = \Lambda_4 = \Lambda_5 = \Lambda_6 = 0. \quad (3.71)$$

- La preuve de la Proposition 14 est un calcul algébrique à la fois long et facile qui peut se faire de tête sans difficulté et demande simplement une bonne concentration sur l'expression (3.38) de la matrice  $M^{-1}$ .
- On explicite ensuite les défauts de conservation  $\theta_3$ ,  $\theta_7$  et  $\theta_8$ , en ne conservant que les termes **linéaires** par rapport à  $q$ .

**Proposition 15. Défauts de conservation.**

Compte tenu de (3.61), (3.37) et (3.59), on a :

$$\theta_3 = 2 \operatorname{div} q + O(|q|^2) + O(\Delta t) \quad (3.72)$$

$$\theta_7 = \frac{2}{3} (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + O(|q|^2) \quad (3.73)$$

$$\theta_8 = \frac{1}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) + O(|q|^2). \quad (3.74)$$

**Preuve de la Proposition 15.**

- On calcule d'abord  $\theta_3$  et en particulier  $\sum_j M_{3j} v_j^\beta f_j$ . Pour  $\beta = 1$ , on a

$$\sum_j M_{3j} v_j^1 f_j = q_x + \lambda m_5.$$

De même pour  $\beta = 2$ ,

$$\sum_j M_{3j} v_j^2 f_j = q_y + \lambda m_6$$

Compte tenu des valeurs (3.53) et (3.54) des moments  $m_5$  et  $m_6$  à l'équilibre, il vient

$$\sum_j M_{3j} v_j^\beta f_j^{\text{eq}} = 0. \quad (3.75)$$

Donc par linéarisation de (3.48),

$$\theta_3 = -2 \partial_t \rho + O(|q|^2) = 2 \operatorname{div} q + O(|q|^2) + O(\Delta t)$$

ce qui montre (3.72).

- Les moments  $m_7$  et  $m_8$  sont des fonctions d'ordre deux par rapport à l'impulsion. Il suffit donc de regarder le second terme du membre de droite de la relation (3.61) pour capturer l'approximation linéaire. On a d'abord

$$\begin{aligned} \sum_j M_{7j} v_j^1 f_j &= \lambda(f_1 - f_3) \quad \text{et} \quad \lambda(G_1 - G_3) = \frac{2}{3} q_x, \\ \sum_j M_{7j} v_j^2 f_j &= \lambda(-f_2 + f_4) \quad \text{et} \quad \lambda(-G_2 + G_4) = -\frac{2}{3} q_y. \end{aligned}$$

D'où la relation (3.73).

- Enfin,

$$\sum_j M_{8j} v_j^1 f_j = \lambda(f_5 + f_6 - f_7 - f_8) = \frac{2}{3} q_y + \frac{\lambda}{3} m_6,$$

et

$$\sum_j M_{8j} v_j^2 f_j = \lambda(f_5 - f_6 - f_7 + f_8) = \frac{2}{3} q_x + \frac{\lambda}{3} m_5,$$

Les valeurs à l'équilibre de ces deux moments valent respectivement  $\frac{1}{3} q_y$  et  $\frac{1}{3} q_x$ , ce qui établit la relation (3.74). D'où la propriété.  $\square$

- Il ne reste plus qu'à regrouper les résultats issus des Propositions 14 et 15 pour aboutir au :

### **Théorème 2. Equation équivalente au second ordre du modèle $D_2Q_9$ .**

Sous l'hypothèse

$$s_7 = s_8 \quad (3.76)$$

l'équation équivalente au second ordre du modèle  $D_2Q_9$  de gaz de Boltzmann sur réseau décrit dans cette section, linéarisée en ce qui concerne les effets visqueux, s'écrit (3.63) pour la conservation de la masse et (3.66) pour le transfert de l'impulsion, avec

$$\mu = \rho_0 \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left( \frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right), \quad (3.77)$$

$$\zeta = \rho_0 \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left( \frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right), \quad (3.78)$$

qui constituent les "relations de D'Humières" [DH92].

#### **Preuve du Théorème 2.**

- Il suffit d'expliciter le membre de droite de la relation (3.64). On a :

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

$$\begin{aligned}
& + \left( \frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \lambda^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \left[ \frac{1}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \right] \\ \partial_y \left[ \frac{1}{3} (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \right] \end{pmatrix} \Bigg\} \\
= & \Delta t \left\{ \left( \frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \frac{\lambda^2}{3} \nabla(\operatorname{div} q) + \frac{\lambda^2}{3} \left( \frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \begin{pmatrix} \partial_x (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + \partial_y (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \\ -\partial_y (\partial_x q_x - \partial_y q_y) + \partial_x (\partial_x q_y + \partial_y q_x) \end{pmatrix} \right\} \\
= & \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left( \frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right) \nabla(\operatorname{div} q) + \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left( \frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right) \Delta q
\end{aligned}$$

et le résultat est une conséquence immédiate du rapprochement entre la ligne qui précède et le membre de droite de (3.66).  $\square$

#### 4. EN GUISE DE CONCLUSION

- Tout d’abord, cette introduction n’est pas suffisante pour l’implémentation complète de la méthode. Il faut bien entendu spécifier les paramètres  $s_4$ ,  $s_5$ ,  $s_6$  qui participent de la définition du schéma mais n’apparaissent pas explicitement dans les équations limites à l’ordre deux. Nous renvoyons le lecteur à l’article de Pierre Lallemand et Li Shi Luo [LL2k]. Nous n’avons pas traité non plus les conditions aux limites ni les conditions initiales. La référence pour ces sujets est Bouzidi-Firdaouss-Lallemand [BFL01].
- Nous pouvons noter que contrairement à la dénomination qui fait référence à l’équation de Boltzmann, un “schéma de Boltzmann” n’approche pas *a priori* la solution de l’équation cinétique de Boltzmann. Toutefois l’algorithme simule directement une dynamique typique de l’équation de Boltzmann et l’on peut parler de “méthode particulière sur réseau”. Un schéma de Boltzmann permet d’approcher (au sens de l’équation équivalente au moins) le modèle fluide obtenu en isolant les grandeurs à l’équilibre thermodynamique. Toutefois, un schéma de Boltzmann est plus riche qu’une méthode de volumes finis classique car il contient en plus des “moments à l’équilibre” des “moments hors équilibre” qui demeurent oscillants même si les variables conservées se stabilisent.
- Notons aussi qu’un schéma de Boltzmann ne possède pas *a priori* de propriété de positivité générale et la stabilité de la méthode est en conséquence réduite aux “petites” perturbations autour d’une valeur constante. Toutefois, le modèle de gaz de Boltzmann sur réseau est un excellent modèle numérique de fluide de plus en plus utilisé dans diverses applications couplées, comme en témoignent les Actes (à paraître) du congrès ICMMES qui a eu lieu en juillet 2005 à Hong Kong (voir par exemple Yu *et al* [YGL05]).
- Parmi les problèmes ouverts, la modélisation a été volontairement limitée aux basses vitesses et une sorte de “super acoustique” non linéaire est actuellement opérationnelle. Notons aussi qu’il ne s’agit pas d’un modèle incompressible car les ondes acoustiques, de vitesse finie, sont toujours présentes dans la modélisation. Il conviendra à l’avenir de réfléchir au cas du fluide fortement compressible et des écoulements transsoniques en particulier, où les moments d’équilibre ne sont plus des polynômes des variables conservées mais des fractions rationnelles. Avec l’introduction de conditions d’entropie (voir à ce sujet les travaux de Karlin et ses collaborateurs [KGSB98] [KSO99] [AK02]), il devrait être possible de franchir le “mur des ondes soniques”.
- N’oublions pas la possibilité de régler les paramètres du schéma par une méthodologie classique de contrôle optimal et le travail pionnier réalisé par le groupe d’Orsay [TBDL06] !

## ANNEXE : INTÉGRALES GAUSSIENNES

- Dans le cas de deux dimensions d'espace, la distribution continue des vitesses  $f_0(v)$  est donnée par la relation (0.3), c'est-à-dire

$$f_0(v) = \rho \frac{\beta}{2\pi} \exp\left(-\frac{\beta}{2}|v-u|^2\right), \quad v \in \mathbb{R}^2 \quad (\text{A.1})$$

où  $\beta > 0$  est homogène à l'inverse du carré d'une vitesse. Nous calculons dans cette Annexe les valeurs de plusieurs moments  $m_{pq}$  de la forme

$$m_{pq} = \int_{\mathbb{R}^2} v_1^p v_2^q f_0(v) dv. \quad (\text{A.2})$$

- On calcule d'abord des intégrales à une seule dimension d'espace, sachant que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\beta}{2}\theta^2\right) d\theta = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}. \quad (\text{A.3})$$

On a bien sûr par antisymétrie

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta \exp\left(-\frac{\beta}{2}\theta^2\right) d\theta = 0 \quad (\text{A.4})$$

et on remarque que

$$d\left(\exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right)\right) = -\beta\theta \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta.$$

Donc

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \theta^2 \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta &= -\frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \theta d\left(\exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right)\right) = \\ &= -\frac{1}{\beta} \left[\theta \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right)\right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}. \end{aligned}$$

On en déduit

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta^2 \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta = \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}. \quad (\text{A.5})$$

- Toujours grâce à l'imparité, on a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \theta^3 \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta = 0 \quad (\text{A.6})$$

et

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \theta^4 \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta &= -\frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \theta^3 d\left[\exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right)\right] \\ &= -\frac{1}{\beta} \left[\theta^3 \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right)\right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{3}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} \theta^2 \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta \\ &= 0 + \frac{3}{\beta} \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \\ \int_{-\infty}^{\infty} \theta^4 \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta &= \frac{3}{\beta^2} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

- Le moment d'ordre zéro de  $f_0(\bullet)$  s'obtient sans difficulté :

$$\int_{\mathbb{R}^2} f_0(v) dv = \rho. \quad (\text{A.8})$$

Pour le moment d'ordre 1,  $m_{10}$  pour fixer les idées, on a :

$$m_{10} = \int_{\mathbb{R}^2} v_1 f_0(v) dv =$$

$$\begin{aligned}
&= \rho \frac{\beta}{2\pi} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1 + \theta) \exp\left(-\frac{\beta\theta^2}{2}\right) d\theta \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\beta}{2}|v_2 - u_2|^2\right) dv \right) \\
&= \rho \frac{\beta}{2\pi} \left( u_1 \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} + 0 \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} = \rho u_1 \\
&\int_{\mathbb{R}^2} v_j f_0(v) dv = \rho u_j.
\end{aligned} \tag{A.9}$$

C'est classique ...

- A l'ordre deux, on sépare le cas de  $m_{20}$  de celui de  $m_{11}$ . On a :

$$\begin{aligned}
m_{20} &= \int_{\mathbb{R}^2} v_1^2 f_0(v) dv = \frac{\rho\beta}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (u_1 + \theta)^2 e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\beta|v_2 - u_2|^2}{2}} dv_2 \\
&= \frac{\rho\beta}{2\pi} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1^2 + 2u_1\theta + \theta^2) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \\
&= \frac{\rho\beta}{2\pi} \left( u_1^2 + \frac{1}{\beta} \right) \frac{2\pi}{\beta} = \rho \left( u_1^2 + \frac{1}{\beta} \right). \\
&\int_{\mathbb{R}^2} v_j^2 f_0(v) dv = \rho u_j^2 + \frac{\rho}{\beta}.
\end{aligned} \tag{A.10}$$

$$\begin{aligned}
m_{11} &= \int_{\mathbb{R}^2} v_1 v_2 f_0(v) dv \\
&= \frac{\rho\beta}{2\pi} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1 + \theta) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_2 + \theta) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \right) \\
&= \frac{\rho\beta}{2\pi} (u_1 + 0) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} (u_2 + 0) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} = \rho u_1 u_2 \\
&\int_{\mathbb{R}^2} v_1 v_2 f_0(v) dv = \rho u_1 u_2.
\end{aligned} \tag{A.11}$$

- Les moments d'ordre trois s'évaluent avec la même approche :

$$\begin{aligned}
m_{30} &= \int_{\mathbb{R}^2} v_1^3 f_0(v) dv = \frac{\rho\beta}{2\pi} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1 + \theta)^3 e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \\
&= \frac{\rho\beta}{2\pi} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1^3 + 3u_1^2\theta + 3u_1\theta^2 + \theta^3) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \right) \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \\
&= \frac{\rho\beta}{2\pi} \left( u_1^3 + 3\frac{u_1}{\beta} \right) \left( \frac{2\pi}{\beta} \right) = \rho u_1 \left( u_1^2 + \frac{3}{\beta} \right) \\
&\int_{\mathbb{R}^2} v_j^3 f_0(v) dv = \left( \frac{3}{\beta} + u_j^2 \right) \rho u_j.
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Pour l'approche discrète des gaz sur réseaux, on ne garde que le terme d'ordre le plus bas en  $u_j$  :

$$\int_{\mathbb{R}^2} v_j^3 f_0(v) dv \simeq \frac{3}{\beta} \rho u_j. \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
m_{21} &= \int_{\mathbb{R}^2} v_1^2 v_2 f_0(v) dv \\
&= \rho \frac{\beta}{2\pi} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1 + \theta)^2 e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_2 + \theta) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} d\theta \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \rho \left( u_1^2 + \frac{1}{\beta} \right) u_2 \\
&\qquad \int_{\mathbb{R}^2} v_1^2 v_2 f_0(v) \, dv = \rho \left( u_1^2 + \frac{1}{\beta} \right) u_2. \tag{A.14}
\end{aligned}$$

- Le modèle  $D_2Q_9$  demande d'évaluer le moment du carré de l'énergie cinétique :

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^2} \left( \frac{1}{2} |v|^2 \right)^2 f_0(v) \, dv = \\
&= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^2} (v_1^2 + v_2^2)^2 f_0(v) \, dv = \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^2} (v_1^4 + 2v_1^2 v_2^2 + v_2^4) f_0(v) \, dv \\
&= \frac{1}{4} \frac{\rho\beta}{2\pi} \left\{ \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1^4 + 4u_1^3\theta + 6u_1^2\theta^2 + 4u_1\theta^3 + \theta^4) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} \, d\theta \right) \times \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \right. \\
&+ 2 \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_1^2 + 2u_1\theta + \theta^2) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} \, d\theta \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_2^2 + 2u_2\theta + \theta^2) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} \, d\theta \right) \\
&+ \left. \sqrt{\frac{2\pi}{\beta}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (u_2^4 + 4u_2^3\theta + 6u_2^2\theta^2 + 4u_2\theta^3 + \theta^4) e^{-\frac{\beta\theta^2}{2}} \, d\theta \right) \right\} \\
&= \frac{\rho}{4} \left\{ \left( u_1^4 + \frac{6}{\beta} u_1^2 + \frac{3}{\beta^2} \right) + 2 \left( u_1^2 + \frac{1}{\beta} \right) \left( u_2^2 + \frac{1}{\beta} \right) + \left( u_2^4 + \frac{6}{\beta} u_2^2 + \frac{3}{\beta^2} \right) \right\} \\
&= \frac{\rho}{4} \left\{ |u|^4 + \frac{8}{\beta} |u|^2 + \frac{8}{\beta^2} \right\}.
\end{aligned}$$

- Pour le modèle bidimensionnel à neuf vitesses, tout se passe (voir P. Lallemand et L.S Luo [LL2k]) comme si

$$\int_{\mathbb{R}^2} \left( \frac{1}{2} |v|^2 \right)^2 f_0(v) \, dv \simeq \frac{\rho}{4} \left( \frac{8}{\beta^2} + \frac{5}{\beta} |u|^2 \right)! \tag{A.15}$$

On se réfère à la relation  $\delta_4 = -18$  (relation (54b)) de Lallemand-Luo [LL2k] page 6554 du volume 61, numéro 6 de la "Physical Review E".

## REFERENCES

- [AK02] S. Ansumali, I.V. Karlin, "Entropy Function Approach for a Lattice Boltzmann Method", *Journal of Statistical Physics*, vol. **107**, n° 122, p. 291-307, avril 2002.
- [BGK54] P. Bhatnagar, E. Gross, M. Krook, "A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems", *Physical Review*, vol. **94**, p. 511-525, 1954.
- [1872] L. Boltzmann, "Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen", *Wiener Berichte*, vol. **66**, p. 275-370, 1872.
- [BFL01] M. Bouzidi, M. Firdaouss, P. Lallemand, "Momentum transfer of a Boltzmann lattice fluid with boundaries", *Physics of Fluids*, vol. **13**, n° 11, p. 3452-3459, novembre 2001.
- [Br64] J. Broadwell, "Study of a rarefied shear flow by the discrete velocity method", *Journal of Fluid Mechanics*, vol. **7**, p. 367, 1964.
- [Ca57] T. Carleman. *Problèmes Mathématiques dans la Théorie Cinétique des Gaz*, Almqvist & Wiksell, Uppsala, 1957.
- [CC39] S. Chapman, T. G. Cooling, *The mathematical theory of non-uniform gases*, Cambridge University Press, 1939.
- [DH92] D. D'Humières, "Generalized Lattice-Boltzmann Equations" in *AIAA Rarefied Gas Dynamics: Theory and Applications*, *Progress in Astronautics and Aeronautics*, vol. **159**, p. 450-458, 1992.
- [DLF86] D. D'Humières, P. Lallemand, U. Frisch, "Lattice gas models for 3D-hydrodynamics", *Europhysics Letters*, vol. **2**, n° 4, p. 291-297, 1986.
- [DGLR89] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, *Physique Statistique*, Hermann, Paris, 1989.
- [Du06] F. Dubois, "Equivalent partial differential equations of a lattice Boltzmann scheme", *ICMMES Conference*, juillet 2005, à paraître dans *Computers and Mathematics with Applications*.

- [FHP86] U. Frisch, B. Hasslacher, Y. Pomeau, "Lattice gas automata for the Navier Stokes equation", *Physical Review Letters*, vol. **56**, n° 14, p. 1505-1508, 1986.
- [Ga75] R. Gatignol, *Théorie cinétique des gaz à répartition discrète de vitesses*, *Lecture Notes in Physics*, vol. **36**, Springer Verlag, Berlin, 1975.
- [Go71] Godbillon, *Eléments de Topologie Algébrique*, Hermann, Paris, 1971.
- [HPP76] J.O. Hardy, O. de Pazzis, Y. Pomeau, "Molecular dynamics of a classical lattice gaz transport properties and time correlation functions", *Physical Review A.*, vol. **13**, p. 1949-1961, 1976.
- [HSB89] F. Higuera, S. Succi, R. Benzi, "Lattice gas dynamics with enhanced collisions", *Europhysics Letters*, vol. **9**, n° 7, p. 663-668, 1989.
- [KGSB98] I. V. Karlin, A.N. Gorban, S. Succi, V. Boffi, "Maximum Entropy Principle for Lattice Kinetic Equations", *Physical Review Letters*, vol. **81**, n° 1, p. 6-9, 1998.
- [KSO99] I.V. Karlin, S. Succi, S. Orszag, "Lattice Boltzmann method for irregular grids", *Physical Review Letters*, vol. **82**, p. 5245-5248, 1999.
- [LL2k] P. Lallemand, L.S. Luo, "Theory of the lattice Boltzmann method: Dispersion, dissipation, isotropy, Galilean invariance, and stability", *Physical Review E*, vol. **61**, n° 6, p. 6546-6562, juin 2000.
- [Le81] A. Lerat, "Sur le calcul des solutions faibles des systèmes hyperboliques de lois de conservation à l'aide de schémas aux différences", Thèse de Doctorat d'Etat, *Université Paris 6*, février 1981.
- [LP74] A. Lerat, R. Peyret, "Noncentered Schemes and Shock Propagation Problems", *Computers and Fluids*, vol. **2**, p. 35-52, 1974.
- [1860] J.C. Maxwell, "Illustrations of the dynamical theory of gases", *Philosophical Magazine*, vol. **4**, n° 19, p. 19-32 et vol. **4**, n° 20, p. 21-37, 1860.
- [MZ88] G. Mc Namara, G. Zanetti, "Use of Boltzmann equation to simulate lattice gas automata", *Physical Review Letters*, vol. **61**, n° 20, p. 2332-2335, 1988.
- [QDL92] Y.H. Qian, D. D'Humières, P. Lallemand, "Lattice BGK for Navier-Stokes equation", *Europhysics Letters*, vol. **17**, n° 6, p. 479-484, 1992.
- [TBDL06] M. Tekitek, F.M. Bouzidi, F. Dubois, P. Lallemand, "Adjoint Lattice Boltzmann Equation for Parameter Identification", *Computers and Fluids*, vol. **35**, numéros 8-9, p. 805-813, octobre 2006.
- [WH74] R.F. Warming, B.J. Hyett, "The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite difference methods", *Journal of Computational Physics*, vol. **14**, p. 159-179, 1974.
- [YGL05] H. Yu, S.G. Girimaji, L.S. Luo, "Lattice Boltzmann simulation of decaying homogeneous isotropic turbulence", *Physical Review E* **71**, 016708, 2005.