



HAL
open science

Méthodes numériques préservant l'asymptotique pour des modèles aux moments de la physique des plasmas

Thomas Vigier

► **To cite this version:**

Thomas Vigier. Méthodes numériques préservant l'asymptotique pour des modèles aux moments de la physique des plasmas. Modélisation et simulation. Université de Bordeaux, 2024. Français. NNT : 2024BORD0477 . tel-04901697

HAL Id: tel-04901697

<https://theses.hal.science/tel-04901697v1>

Submitted on 20 Jan 2025

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.

THÈSE PRÉSENTÉE
POUR OBTENIR LE GRADE DE
DOCTEUR
DE L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX
ET DE BORDEAUX INP
ÉCOLE DOCTORALE MATHÉMATIQUES ET
INFORMATIQUE
SPÉCIALITÉ MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES ET CALCUL SCIENTIFIQUE

par Thomas VIGIER

Méthodes numériques préservant l'asymptotique pour des
modèles aux moments de la physique des plasmas

Sous la direction de : Luc MIEUSSENS
Co-directeur : Julien MATHIAUD

Soutenue le 19 décembre 2024 à Talence (France),

Membres du jury :

M.	MIEUSSENS, Luc	Professeur des Universités	Bordeaux INP	Directeur
M.	MATHIAUD, Julien	Professeur des Universités	Université de Rennes	Co-directeur
M.	DESPRÉS, Bruno	Professeur des Universités	Sorbonne Université	Rapporteur
M.	REY, Thomas	Professeur des Universités	Université Côte d'Azur	Rapporteur
Mme	BEAUGENDRE, Héloïse	Professeure des Universités	Bordeaux INP	Examinatrice
Mme	CRESTETTO, Anaïs	Maître de Conférences	Nantes Université	Examinatrice
M.	PICHARD, Teddy	Professeur Assistant	École Polytechnique	Examinateur
M.	TURPAULT, Rodolphe	Professeur des Universités	Bordeaux INP	Président

Membre invité :

M.	FEUGEAS, Jean-Luc	Directeur Recherche CEA	Université de Bordeaux	Co-encadrant
----	-------------------	-------------------------	------------------------	--------------

Méthodes numériques préservant l'asymptotique pour des modèles aux moments de la physique des plasmas

Résumé : Dans le cadre de la recherche pour la production d'énergie par fusion par confinement inertiel, le développement de nouvelles méthodes numériques est primordial. En effet, les simulations permettent non seulement d'affiner la compréhension des phénomènes physiques complexes ayant lieu sous les conditions thermodynamiques extrêmes nécessaires à la fusion, mais aussi d'aider à la conception de nouveaux dispositifs expérimentaux. Au sein des simulations numériques pour la fusion, le calcul du flux de chaleur des électrons est un enjeu central. Du fait des conditions extrêmes de la matière, la théorie usuelle de Spitzer-Härm devient insuffisante pour décrire la conduction thermique. Aussi pour restituer les effets cinétiques à moindre coût, des modèles aux moments à l'échelle mésoscopique sont utilisés à la place pour décrire le comportement des électrons.

Ce manuscrit de thèse se concentre sur la résolution numérique de ces modèles aux moments ; tout d'abord dans le cadre simplifié du transport linéaire puis dans celui du transport électronique. La nature multi-échelle de ces modèles complique l'élaboration de schémas numériques, capables de correctement résoudre tous les régimes : pour ce faire, une classe particulière de méthodes, dites préservant l'asymptotique, a émergé. Une des plus récentes et des plus prometteuses est l'*Unified Gas Kinetic Scheme* (UGKS) : ce schéma volumes finis pour les équations cinétiques de type relaxation s'appuie sur la solution intégrale obtenue à partir de la méthode des caractéristiques. Dans ce manuscrit, une méthode est proposée pour obtenir des schémas cinétiques préservant l'asymptotique pour des modèles aux moments à partir d'UGKS. L'idée principale introduite est d'appliquer une fermeture à l'échelle numérique dans les flux d'UGKS.

Dans les deux cas d'application étudiés, cette nouvelle méthode se révèle particulièrement performante et la poursuite de son développement semble pertinent dans l'objectif de résoudre des modèles physiques plus complexes. De plus, son caractère générique et sa flexibilité en font une alternative intéressante aux schémas usuels préservant l'asymptotique. Des premiers résultats de stabilité sont notamment démontrés sur ce nouveau schéma et une extension sur maillage non structuré est proposée.

Mots clés : Méthode des Volumes Finis, Schémas Préservant l'Asymptotique, Modèles aux Moments, Théorie Cinétique, UGKS

Asymptotic preserving numerical methods for moment models of plasma physics

Abstract : As part of the research on energy production through inertial confinement fusion, the development of new numerical methods is crucial. Indeed, simulations not only allow to refine the understanding of complex physical phenomena occurring under the extreme thermodynamic conditions necessary for fusion but also permit to assist in the design of new experimental devices. Within numerical simulations for fusion, the calculation of the electron heat flux is a central issue. Due to the extreme conditions of matter, the conventional Spitzer-Härm theory becomes insufficient to describe thermal conduction. Thus, to capture kinetic effects at a lower computational cost, moment models at the mesoscopic scale are used instead to describe the electron behaviour.

This thesis manuscript focuses on the numerical resolution of these moment models, first in the simplified framework of linear transport and then in the context of electronic transport. The multi-scale nature of these models complicates the development of numerical schemes, which must accurately resolve all regimes : to do this, a particular class of methods, known as asymptotic-preserving methods, has emerged. One of the most recent and promising one is the Unified Gas Kinetic Scheme (UGKS) : this finite volume scheme for relaxation-type kinetic equations relies on the integral solution obtained from the method of characteristics. In this manuscript, a method is proposed to derive asymptotic-preserving kinetic schemes for moment models based on UGKS. The main idea which is introduced is to apply a closure at the numerical scale in the UGKS fluxes.

In the two studied application cases, this new method reveals to be particularly effective and continuing its development seems relevant in order to solve more complex physical models. Moreover, its generic nature and flexibility make it a pertinent alternative to conventional asymptotic-preserving schemes. Moreover, some stability results are also demonstrated for this new scheme, and an extension to unstructured meshes is proposed.

Keywords : Finite Volume Method, Asymptotic Preserving Schemes, Moments Models, Kinetic Theory, UGKS

Remerciements

Pour entamer ces remerciements, je souhaiterais tout d'abord exprimer ma gratitude envers mes directeurs de thèse, Luc Mieussens, Julien Mathiaud et Jean-Luc Feugeas, tout d'abord pour m'avoir proposé ce sujet de doctorat à la fin de mon cursus d'ingénieur avec eux, mais aussi pour m'avoir si bien encadré au cours de ces trois dernières années. Ils m'ont chacun apporté des choses différentes et j'ai le sentiment d'avoir beaucoup appris à leurs côtés, tant sur le plan scientifique que sur le plan humain. En plus des connaissances scientifiques qu'ils m'ont transmises, j'ai mesuré l'importance de la rigueur, de la curiosité et de la persévérance. Grâce à eux, cette thèse a été une expérience riche en apprentissages et en opportunités, que ce soit à travers les différentes conférences et rencontres ou encore dans la découverte de l'enseignement et du milieu de la recherche. La confiance et la liberté qu'ils m'ont accordées ont été essentielles pour que je puisse pleinement m'épanouir dans ce travail. Je les remercie très chaleureusement pour ces trois années passées ensemble.

Je me dois d'adresser une reconnaissance particulière envers Bruno Després ainsi que Thomas Rey pour avoir accepté la lourde tâche de rapporter ce manuscrit. Le regard extérieur qu'ils ont apporté sur ce travail a aidé à nourrir ma réflexion ! J'aimerais également exprimer mes remerciements à Héloïse Beaugendre, Anaïs Crestetto, Teddy Pichard ainsi qu'à Rodolphe Turpault pour avoir accepté de composer le jury.

Ma thèse s'est déroulée sous le signe de plusieurs collaborations qu'il me tient d'honorer ici. Ma reconnaissance s'adresse notamment à Bruno Dubroca, dont les bons conseils ont permis de surmonter plusieurs difficultés. J'exprime aussi mes remerciements envers Laurent Boudin et Ayman Moussa pour l'expertise qu'ils m'ont apporté dans leur domaine et leur accueil à Jussieu.

Durant ces trois années au CELIA, j'ai eu l'occasion de travailler et de côtoyer bon nombre de personnes formidables que je ne saurais toutes remercier sans en oublier certaines. Je ne pourrais toutefois m'en sortir aussi aisément sans accorder quelques mentions particulières. Je retiendrai tout d'abord l'amitié que j'ai développée avec Antoine Chrisment au cours des moments que nous avons partagés ensemble à divaguer sur des sujets aussi riches que variés. Je me rappellerai aussi des relations amicales que j'ai entretenues avec les doctorants, post-doctorants et stagiaires du laboratoire. Merci à Alexandre, Ali, Clément, Clément, Corisande, Florent, Howel, Lena, Margaux, Nicolas, Thomas (et tous les autres bien sûr), pour leur joyeuse compagnie ! La pluralité de nos sujets d'étude a été source de discussions très enrichissantes.

J'aimerais aussi adresser une pensée particulière à mes amis les plus proches, Lou-Anne, Romain et Xavier, qui m'ont épaulé, chacun à leur manière, pendant cette thèse.

Je ne pourrais conclure ces remerciements sans adresser une pensée particulière à mes parents ainsi qu'à toute ma famille. Cette thèse représente l'apogée de longues années d'études et je leur suis infiniment reconnaissant de tout le soutien qu'ils m'ont apporté au fil de ce parcours, de la classe préparatoire jusqu'à maintenant.

Table des matières

Introduction générale	1
La production d'énergie par fusion nucléaire	1
Les enjeux de calcul scientifique	3
Motivations et plan du manuscrit	3
I État de l'art	5
1 Modèles cinétiques pour la physique des plasmas	7
1.1 Introduction	8
1.2 Le modèle du transport linéaire	8
1.2.1 Équation cinétique	8
1.2.2 Propriétés	10
1.2.3 Limite fluide	11
1.2.4 Modèles aux moments	14
1.3 Le transport électronique	23
1.3.1 Équation cinétique	23
1.3.2 Limite fluide	25
1.3.3 Modèles aux moments angulaires	28
2 Méthodes numériques	33
2.1 Introduction	34
2.2 Le cas hyperbolique unidimensionnel	34
2.2.1 Advection linéaire scalaire	35
2.2.2 Système d'advection linéaire avec terme source	45
2.2.3 Équations hyperboliques non linéaires	46
2.3 Le cas parabolique unidimensionnel	49
2.3.1 Équation de diffusion	49
2.3.2 Systèmes de diffusion	52
2.4 Extensions bidimensionnelles	53
2.4.1 Maillage cartésien	53
2.4.2 Maillage non structuré	56
2.5 Les schémas préservant l'asymptotique	62
2.5.1 Contexte et principe général	62
2.5.2 HLL modifié	63

II	UGKS pour les modèles aux moments	65
3	Le transport linéaire	67
3.1	Introduction	68
3.2	UGKS pour le transport linéaire	68
3.2.1	Une formulation volumes finis	69
3.2.2	Une méthode basée sur les caractéristiques	70
3.2.3	Analyse asymptotique et stabilité	73
3.2.4	Diffusion implicite	75
3.2.5	Conditions aux limites	76
3.3	Fermetures aux moments d'UGKS	77
3.3.1	UGKS-M1	77
3.3.2	UGKS-P1	82
3.3.3	Fermetures d'ordre élevé	82
3.4	Réalisabilité des schémas pour les modèles aux moments	88
3.4.1	Principe général	88
3.4.2	Positivité d'UGKS	89
3.4.3	Modification d'UGKS-M1 pour assurer la réalisabilité	89
3.5	Résultats	97
3.5.1	UGKS-M1	98
3.5.2	UGKS-P1	102
3.5.3	UGKS-M2	103
3.5.4	UGKS-PN	105
4	Le transport électronique	107
4.1	Introduction	108
4.2	UGKS	108
4.2.1	Formulation volumes finis	108
4.2.2	Une méthode basée sur les caractéristiques	109
4.2.3	Analyse asymptotique et stabilité	113
4.2.4	Conditions aux limites	113
4.2.5	Schémas de diffusion alternatifs	115
4.3	UGKS-M1	116
4.3.1	Une fermeture entropique d'UGKS	116
4.3.2	Demi-moments angulaires de la fonction de distribution M1	118
4.3.3	Discrétisation de l'espace des vitesses	119
4.3.4	Ordre élevé en espace	120
4.4	Extension aux maillages non structurés	122
4.4.1	UGKS	122
4.4.2	Définition des états macroscopiques	124
4.4.3	UGKS-M1	129
4.5	Résultats	131
4.5.1	Maillage Cartésien	132
4.5.2	Maillage non structuré triangulaire	141
	Conclusion et Perspectives	155
	Conclusion générale	155
	Perspectives	156
	Bibliographie	157

Annexes	165
A Coefficients d'intégration d'UGKS (Chapitres 3 et 4)	165
B Demi-moments de la fonction de distribution M1 unidimensionnelle (chapitre 3)	165
C Flux d'UGKS-M1 d'ordre 2 pour le transport linéaire (chapitre 3)	166
D Moments de la Maxwellienne (chapitres 1 et 4)	167
E Moments de la fonction de distribution M1 sur la sphère (chapitres 1 et 4) . .	167
F Demi-moments de la fonction de distribution M1 sur la sphère (chapitre 4) . .	168
G Flux d'UGKS-M1 d'ordre 2 pour le transport électronique (chapitre 4)	169

Introduction générale

La production d'énergie par fusion nucléaire

Actuellement, l'un des enjeux sociétaux majeurs est l'urgence climatique. Le principal phénomène mis en cause est l'augmentation de la température moyenne terrestre. En effet, une élévation d'environ 1,1 °C a été constatée depuis la période préindustrielle, et la tendance générale est préoccupante. Les conséquences de cette augmentation sont multiples, notamment la recrudescence d'épisodes climatiques extrêmes, la chute de la biodiversité, et la montée des eaux. Ce changement brutal de l'environnement a des répercussions économiques et sociétales conséquentes et menace les populations, en particulier celles déjà les plus vulnérables. Par ailleurs, le dérèglement global du climat est largement imputable aux activités humaines, en particulier à la production d'énergie, qui constitue une source non négligeable d'émissions de gaz à effet de serre (dioxyde de carbone, méthane, etc).

Dans ce contexte, il apparaît important d'explorer des solutions alternatives de production d'énergie. La fusion nucléaire est un des axes actuellement étudiés et fait l'objet de recherches très actives. D'une manière générale, la réaction de fusion nucléaire est une réaction nucléaire dans laquelle des atomes de petite taille fusionnent pour former des noyaux plus lourds. Cette réaction est celle à l'oeuvre dans les étoiles et produit de l'énergie. Cependant, celle-ci nécessite des conditions thermodynamiques (en termes de température et de pression) extrêmes pour être déclenchée. En effet, les forces d'interactions coulombiennes entre les atomes doivent être vaincues. Par rapport à la fission nucléaire, la fusion présente l'avantage d'utiliser un combustible abondant mais aussi d'exploiter une réaction essentiellement propre. Actuellement, deux voies principales sont étudiées pour produire de l'énergie par fusion ; la fusion par confinement magnétique (FCM) et la fusion par confinement inertiel (FCI). Dans le premier cas, les conditions thermodynamiques sont atteintes en chauffant un plasma confiné dans un champ magnétique. Dans le second, elles le sont en comprimant un plasma avec un laser.

Plus précisément, la FCI repose sur une cible sphérique sur laquelle se concentre un flux de photons (le laser), se transformant d'abord en énergie cinétique d'implosion (phase de compression), puis, lors de la stagnation, en énergie interne (phase d'allumage). Deux modes différents se distinguent pour transférer l'énergie laser à la cible. Le premier est direct ; dans celui-ci, les lasers illuminent directement la cible. Le second mode est indirect et une enceinte à haut numéro atomique (appelée *hohlraum*) est employée pour absorber l'énergie laser avant d'être réémise sous forme de rayons X, qui entraînent ensuite l'implosion. La cible est une coquille sphérique à faible numéro atomique contenant du combustible de deutérium (D) et de tritium (T). Sous l'effet du laser, la coquille est ablatée ; l'absorption de photons augmente la pression à l'extérieur de celle-ci, provoquant une expansion du plasma externe qui, par conservation de la quantité de mouvement, accélère la coquille vers l'intérieur. Ainsi, une

fraction significative du flux de photons incident est absorbée et une partie est convertie sous forme d'énergie cinétique. Au fur et à mesure de l'implosion, la réduction de volume due à la convergence sphérique, combinée au chauffage par choc (dans le schéma d'allumage par choc), provoque l'apparition d'un "point chaud" central à basse densité et à haute pression au centre de la coquille de combustible dense. La pression centrale décélère la coquille convergente, convertissant l'énergie cinétique de la coquille en énergie interne et comprimant le point chaud. Si la température du point chaud comprimé et le produit densité-rayon sont suffisamment importants, des particules α de fusion sont émises et s'arrêtent dans le point chaud, le chauffant davantage et provoquant l'émission de particules α supplémentaires. Une onde de combustion thermonucléaire se propage ensuite dans la coquille, créant un dégagement d'énergie net.

Afin de pouvoir utiliser ce mécanisme de fusion nucléaire pour globalement produire de l'énergie, il est nécessaire de développer une compréhension plus fine des phénomènes physiques complexes à l'oeuvre. Une expertise tant expérimentale que théorique est alors requise dans le domaine de l'hydrodynamique des cibles, de l'interaction du laser et de la matière, et des sources de particules et de rayonnements intenses. Le contexte de cette thèse s'articule en particulier autour d'un des facteurs essentiels de l'ablation de la surface externe de la cible qui est la conduction thermique électronique. Ce processus est impliqué lors de la conversion de l'énergie du laser en énergie cinétique pendant la phase d'implosion de la cible. Dans les expériences de FCI, les conditions de la matière sont telles que l'énergie thermique ne se propage plus de proche en proche au sein du plasma comme elle le ferait classiquement localement autour d'une source de chaleur. En effet, les plasmas n'étant pas à l'équilibre thermodynamique (du fait des conditions extrêmes créées par le laser), le flux de chaleur des électrons ne peut pas être décrit par la théorie classique (dite de Spitzer-Härm). Puisque le libre parcours moyen des particules est très largement supérieur à la longueur des gradients de température, des phénomènes dits non-locaux apparaissent où l'état hydrodynamique à un endroit donné du système dépend des états à distance.

De ce fait, des modèles plus fins ont été développés pour restituer les effets cinétiques et ainsi correctement estimer le flux de chaleur des électrons. Les phénomènes non-locaux peuvent par exemple être modélisés en utilisant un opérateur de convolution sur les flux locaux dans l'espace tout entier [49]. Cette approche a notamment été étendue au cas multidimensionnel au sein de l'équipe IFCIA au CELIA par Schurtz-Nicolaï-Busquet dans [54]. Ce nouveau modèle repose alors sur une équation de transport multi-groupe. Une nouvelle extension a plus tard été proposée pour tenir compte des champs magnétiques par Nicolaï-Feugeas-Schurtz [51]. Cependant, ce dernier modèle présente une grande complexité, en particulier dans sa mise en oeuvre dans les codes de calcul. Une autre approche reposant sur des modèles aux moments entropiques a également été étudiée au cours de la thèse de Dario Del Sorbo [18, 17] et d'Antoine Chrisment [12, 13, 11]. Ces modèles sont construits à partir d'une description purement cinétique des électrons, dans laquelle l'évolution de la densité de probabilité des particules est décrite dans l'espace des phases. Dans les conditions physiques de la fusion, une hypothèse sur la forme de la fonction de distribution peut souvent être formulée ce qui permet de considérer des modèles simplifiés, dit aux moments. Du fait de leur origine cinétique, ceux-ci présentent l'intérêt de pouvoir facilement prendre en compte de nombreux phénomènes physiques, en particulier les champs magnétiques. Cette thèse s'inscrit dans la continuité de ces études sur les modèles aux moments pour le transport thermique non-local et se focalise en particulier sur la résolution numérique de ceux-ci.

Les enjeux de calcul scientifique

Les expériences de FCI sont complexes et coûteuses à mettre en oeuvre, en particulier du fait de la complexité des dispositifs expérimentaux. Par ailleurs, la plupart des modèles physiques élaborés pour décrire les phénomènes physiques à l'oeuvre dans ces expériences, ne peuvent *a priori* pas être résolus de manière exacte. Dans les faits, des solutions approchées sont employées à la place.

D'une manière générale, les techniques de calcul scientifique et d'analyse numérique permettent de proposer des méthodes pour résoudre de manière approchée des problèmes issus de la physique. Ces méthodes sont ensuite transcrites algorithmiquement et implémentées au sein de codes de calcul. Des simulations numériques peuvent alors être réalisées afin de tester les modèles pour guider l'élaboration, le dimensionnement ou encore les réglages de dispositifs.

Dans une certaine mesure, les codes de calcul permettent de limiter ou de remplacer les expériences et donc de réduire le coût, tant en besoins matériels que financier et humain, qui leur sont associés. Cependant, les codes industriels requièrent souvent de fortes puissances de calcul et donc des installations modernes et très consommatrices d'énergie. L'enjeu de la pollution numérique doit donc être pris en compte, à la fois dans l'utilisation des codes mais aussi dans le développement de méthodes efficaces et à faible complexité algorithmique. Par ailleurs, les enjeux du calcul haute performance doivent aussi être considérés afin d'optimiser le fonctionnement des codes sur les grappes de serveurs.

Pour des modèles physiques complexes, comme ceux de la FCI, le développement des méthodes peut s'avérer complexe pour correctement résoudre les problèmes et donc approcher la solution exacte. Dans le cadre de la conduction thermique électronique, l'une des principales difficultés numériques provient de la cohabitation de plusieurs phénomènes physiques à différentes échelles. Plus précisément, pour décrire la phase d'implosion de la cible, l'évolution des grandeurs thermodynamiques (température, densité, vitesse et pression) doit être décrite à l'échelle hydrodynamique. Cependant du fait des conditions extrêmes de la matière, une description plus fine à l'échelle cinétique (des particules) doit être adoptée pour calculer le flux de chaleur des électrons. D'un point de vue numérique, résoudre correctement et simultanément toutes les échelles, et ce à un coût raisonnable, est compliqué et nécessite de développer des méthodes particulières qui préserve les asymptotiques des modèles.

Un autre enjeu numérique important est celui du traitement des géométries complexes dans les simulations. Dans de nombreux cas pratiques, les simulations doivent être réalisées dans des domaines non réguliers qui nécessitent des maillages non structurés. Une attention particulière dans la création des schémas doit alors être adoptée.

Motivations et plan du manuscrit

L'objectif principal de cette thèse est de proposer une nouvelle méthode numérique performante préservant l'asymptotique pour résoudre les modèles aux moments du transport électronique. Ce manuscrit s'articule autour de quatre chapitres différents.

Dans le chapitre 1, un premier modèle cinétique simplifié du transport linéaire est introduit. Ses principales propriétés sont mises en avant et les modèles aux moments associés sont décrits. Puis le modèle d'intérêt du transport électronique est présenté.

Dans le chapitre 2, des éléments de base de la méthode des volumes finis sont rappelés pour

résoudre des équations hyperboliques et paraboliques en lien avec la physique des plasmas. Certains enjeux liés à la préservation de l'asymptotique et aux types de maillage sont évoqués.

Dans le chapitre 3, un nouveau schéma numérique préservant l'asymptotique est proposé pour résoudre les modèles aux moments du transport linéaire en une dimension d'espace et à partir de l'*Unified Gas Kinetic Scheme*. Des extensions sont notamment développées pour augmenter l'ordre du schéma et assurer la réalisabilité.

Dans le chapitre 4, une démarche similaire est suivie pour construire un nouveau schéma préservant l'asymptotique pour le modèle M1 du transport électronique en deux dimensions d'espace. La méthode est ensuite étendue aux maillages non-structurés.

Première partie

État de l'art

Chapitre 1

Modèles cinétiques pour la physique des plasmas

Sommaire

1.1	Introduction	8
1.2	Le modèle du transport linéaire	8
1.2.1	Équation cinétique	8
1.2.2	Propriétés	10
1.2.3	Limite fluide	11
1.2.4	Modèles aux moments	14
1.3	Le transport électronique	23
1.3.1	Équation cinétique	23
1.3.2	Limite fluide	25
1.3.3	Modèles aux moments angulaires	28

Résumé

Dans ce chapitre, le contexte physique de cette thèse est tout d'abord exposé. Deux modèles cinétiques sont introduits et leurs principales propriétés sont décrites. Dans les deux cas, des modèles réduits, dits aux moments, sont présentés.

1.1 Introduction

Dans ce premier chapitre, des modèles cinétique issus de la physique sont tout d'abord présentés. Les aspects numériques concernant la résolution de ceux-ci sont discutés dans les chapitres suivants.

Dans un premier temps, le modèle élémentaire du transport linéaire est tout d'abord étudié. Celui-ci intervient dans plusieurs champs d'application physique, mais peut notamment être interprété comme un modèle simplifié du transfert radiatif dans lequel le terme de couplage avec la matière est négligé. Plus précisément, l'équation cinétique qui constitue ce modèle permet de modéliser de manière statistique une population de particules qui interagit avec un milieu à travers des collisions. Le nombre de Knudsen est représentatif du taux de collision dans le domaine et permet de mettre en avant différents régimes de fonctionnement ; du transport libre aux régimes intermédiaires, jusqu'à la diffusion. Dans de nombreux cas d'applications, il est pertinent de pouvoir correctement restituer les régimes intermédiaires sans pour autant adopter une description purement cinétique (pour limiter le coût numérique). Les modèles aux moments s'inscrivent dans cette démarche et reposent sur une ansatz représentative de la forme de la fonction de distribution des particules. La construction de ces modèles est entre autres discutée et leurs principales propriétés, décrites.

Dans un second temps, le modèle plus représentatif du transport électronique est présenté. En pratique, dans les codes hydro-dynamiques pour la fusion par confinement inertiel, le flux de chaleur est une inconnue qui doit être reliée à l'état hydrodynamique du système. Des modèles dit "locaux" (comme par exemple la loi de Spitzer-Härm) peuvent être utilisés mais ceux-ci, bien que peu coûteux, se révèlent souvent fortement imprécis, en particulier lorsque le système est hors équilibre. À la place, des modèles cinétiques ont été proposés spécifiquement pour cela [18, 13]. L'équation cinétique du transport électronique présentée dans ce chapitre est un de ces modèles. La description cinétique des électrons permet de rendre compte d'effets supplémentaires dans les conditions thermodynamiques des plasmas. Dans le cas le plus simple (qui est considéré dans cette thèse), aucune force extérieure n'agit sur le système. Cependant, contrairement aux modèles usuels pour calculer le flux de chaleur [54, 51], cette description permet de considérer les champs magnétiques. Tout comme pour le modèle du transport linéaire, cette équation met en avant plusieurs régimes. Dans le cadre de la FCI, la description purement cinétique ne se révèle pas utilisable en pratique (du fait du coût numérique de résolution) et des hypothèses sur le système physique sont souvent formulées pour construire des modèles intermédiaires, dits aux moments. Ces modèles sont aussi présentés.

1.2 Le modèle du transport linéaire

1.2.1 Équation cinétique

Le premier modèle d'intérêt pour cette thèse est celui du transport linéaire. D'un point de vue physique, celui-ci modélise l'évolution d'une population de particules dans l'espace au cours du temps. Ces particules sont transportées à une vitesse c dans l'espace et sont soumises à une interaction avec le milieu. La répartition des particules est décrite de manière statistique à travers une fonction de distribution $\phi(t, \mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega})$, à valeur dans l'espace des phases. Celle-ci représente la densité de particules à un instant $t \in \mathbb{R}_+$, à une position $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$ (un ouvert de \mathbb{R}^3) et ayant un vecteur vitesse de direction $\boldsymbol{\Omega} \in \mathcal{S}^2$ (la sphère unité en dimension 3). L'évolution de cette fonction de distribution est régie par l'équation cinétique du transport linéaire :

$$\frac{1}{c} \partial_t \phi + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \phi = \sigma \left(\frac{1}{4\pi} \int_{\mathcal{S}^2} \phi d\boldsymbol{\Omega} - \phi \right), \quad (1.1)$$

où $\sigma(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}_+$ est le coefficient d'absorption du milieu (appelé opacité par la suite). Le membre de gauche de l'équation exprime le transport des particules à la vitesse c dans la direction Ω . Le membre de droite modélise les interactions avec le milieu en fonction de son opacité et représente le taux de variation de la fonction de distribution. Dans ce modèle, un opérateur simplifié de type relaxation (analogue à BGK) est considéré plutôt que l'opérateur non-linéaire de Boltzmann. Celui-ci agit comme un terme de relaxation vers l'état d'équilibre, qui est la distribution uniforme de particules en vitesse. Autrement dit, en temps long, les vitesses des particules tendent à suivre une distribution uniforme. Dans cette thèse, la version unidimensionnelle de cette équation est étudiée.

Proposition 1.2.1 (Équation unidimensionnelle)

En une dimension d'espace, l'équation du transport linéaire est

$$\frac{1}{c} \partial_t f + v \partial_x f = \sigma (\rho - f), \quad (1.2)$$

où $v = \Omega_x \in [-1, 1]$ est le cosinus de la colatitute θ dans la système de coordonnées sphérique (θ, φ) (orienté selon \mathbf{e}_x), où $f(t, x, v) = \int_0^{2\pi} \phi(t, x, v, \varphi) d\varphi$ est la moyenne de la fonction de distribution dans la direction longitudinale et où

$$\rho(t, x) = \frac{1}{2} \int_0^\pi f(t, x, \cos \theta) \sin(\theta) d\theta = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f(t, x, v) dv, \quad (1.3)$$

est la densité de la fonction de distribution.

Démonstration : En une dimension, les dérivées dans les directions \mathbf{e}_y et \mathbf{e}_z sont nulles. L'équation cinétique est intégrée selon la direction longitudinale et l'intégrale du terme de collision est décomposée dans le système des coordonnées sphériques. Puis, le changement de variable $v = \cos \theta$ est utilisé. ■

Par la suite, la moyenne de n'importe quelle fonction de v sera notée $\langle \cdot \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \cdot dv$. Par exemple, le densité est $\rho = \langle f \rangle$. Pour des questions numériques (afin de manipuler des quantités proches de l'unité) et pour étudier les régimes limites, il est préférable de considérer la forme adimensionnelle de cette équation.

Proposition 1.2.2 (Équation adimensionnelle)

L'équation du transport linéaire sous forme adimensionnelle est

$$\partial_t f + \frac{v}{\eta} \partial_x f = \nu (\rho - f), \quad (1.4)$$

où $\nu = \frac{\sigma}{\epsilon \eta}$ est la fréquence de collision et (η, ϵ) sont deux nombres adimensionnels. Ceux-ci sont définis par :

$$\eta = \frac{L/\tau}{c}, \quad \epsilon = \frac{\lambda}{L}, \quad (1.5)$$

où L est une longueur caractéristique, λ est l'inverse d'une opacité caractéristique (et est homogène à une longueur) et τ est un temps caractéristique.

Démonstration : Plusieurs variables adimensionnelles sont introduites à partir des quantités caractéristiques : $f' = f/f^*$, $t' = t/\tau$, $x' = x/L$ et $\sigma' = \sigma\lambda$, où f^* est une valeur caractéristique de la fonction de distribution. En écrivant l'équation cinétique en fonction de ces variables les deux nombres adimensionnels apparaissent. ■

Le premier nombre adimensionnel η est analogue au nombre de Strouhal et est défini comme étant le quotient d'une vitesse relative à l'échelle de transport par la vitesse des particules.

Il caractérise l'échelle de transport des particules. Le deuxième nombre adimensionnel ϵ est le nombre de Knudsen. Celui-ci représente le rapport entre le libre parcours moyen λ des particules, c'est-à-dire la distance moyenne parcourue par une particule avant de subir une collision, et une longueur caractéristique L relative à l'échelle d'observation. Lorsque le nombre de Knudsen tend vers l'infini, l'effet des collisions tend à disparaître et l'équation limite est celle du transport

libre :

$$\partial_t f + \frac{v}{\eta} \partial_x f = 0. \quad (1.6)$$

A l'inverse, lorsque le nombre de Knudsen tend vers zéro, le mécanisme de collision tend à prédominer devant le transport. Le régime limite associé est étudié par la suite.

1.2.2 Propriétés

L'opérateur de collision de ce modèle assure plusieurs propriétés élémentaires. La plus élémentaire concerne l'évolution de la quantité totale de particules.

Proposition 1.2.3 (Préservation de la masse)

La densité de la fonction de distribution vérifie la loi de conservation :

$$\partial_t \rho + \frac{1}{\eta} \partial_x j = 0, \quad (1.7)$$

où $j = \langle v f \rangle$ est la densité de courant.

Du fait du processus de collision, les particules tendent localement vers la distribution d'équilibre en un temps caractéristique $\tau = \nu^{-1}$. D'un point de vue physique, une faible perturbation hors de cet état conduit à une augmentation de l'entropie physique dans le domaine avant de retourner à l'équilibre. Mathématiquement, ce processus irréversible se caractérise par la diminution d'une certaine fonctionnelle appelée entropie (mathématique).

Proposition 1.2.4 (Dissipation de l'entropie - Théorème H)

Soit $h : f \rightarrow h(f)$ une fonctionnelle convexe, l'entropie $\langle h(f) \rangle$ vérifie l'inégalité suivante :

$$\eta \partial_t \langle h(f) \rangle + \partial_x \langle v h(f) \rangle \leq 0. \quad (1.8)$$

Démonstration : L'équation cinétique (1.4) est multipliée par $h'(f)$ puis intégrée sur l'espace des vitesses, ce qui donne une équation de transport sur l'entropie :

$$\eta \partial_t \langle h(f) \rangle + \partial_x \langle v h(f) \rangle = \frac{\sigma}{\epsilon} \langle h'(f) \rho - h'(f) f \rangle.$$

Le terme source peut se réécrire sous la forme suivante :

$$\frac{\sigma}{\epsilon} [\langle h'(\rho)(\rho - f) \rangle - \langle (h'(\rho) - h'(f))(\rho - f) \rangle].$$

Le premier terme est nul puisque $h'(\rho)$ est indépendant de v et $\langle \rho - f \rangle = 0$. Le second terme est négatif puisque par convexité, la dérivée de h est croissante. ■

Remarque 1.2.1 (Conditions périodiques)

Les deux énoncés précédents sont des propriétés locales. Pour obtenir la conservation globale de la masse et la dissipation globale de l'entropie, il est nécessaire de décrire le comportement de la solution aux bords du domaine. Avec des conditions de bord périodiques, une simple intégration en espace de (1.7) et de (1.8) permet de montrer que la

masse totale $M = \int_{\mathcal{D}} \rho$ est conservée au cours du temps :

$$\frac{dM}{dt} = 0,$$

et que l'entropie totale $H = \int_{\mathcal{D}} \langle h(f) \rangle$ est dissipée au cours du temps :

$$\frac{dH}{dt} \leq 0.$$

1.2.3 Limite fluide

Une propriété importante de l'équation cinétique est son comportement asymptotique lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0. Dans cette limite, le mécanisme de collision tend à prédominer devant celui du transport. Tout d'abord, il est aisé de remarquer que si les dérivées en temps et en espace de la fonction de distribution sont bornées par rapport à ϵ alors :

$$\rho - f = \frac{\epsilon}{\sigma} (\eta \partial_t f + v \partial_x f) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0.$$

De ce fait, à l'échelle microscopique, la fonction de distribution tend vers sa propre densité. La fonction de distribution est alors à l'équilibre. Cependant, l'évolution de sa densité dans le temps n'apparaît pas explicitement dans l'équation cinétique. Il est donc nécessaire d'étudier plus précisément le régime limite.

Proposition 1.2.5 (*Limite de diffusion*)

Supposons que $\eta = \epsilon$ et que le domaine est \mathbb{R} . Lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, la densité vérifie une équation de diffusion à l'ordre 1 en ϵ :

$$\partial_t \rho = \partial_x \frac{1}{3\sigma(x)} \partial_x \rho + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (1.9)$$

Démonstration : Les développements de Hilbert de la fonction de distribution et de la densité sont

$$f = \sum_{i \geq 0} \epsilon^i f^{(i)}, \quad \rho = \sum_{i \geq 0} \epsilon^i \rho^{(i)},$$

avec comme condition de compatibilité : $\rho^{(i)} = \langle f^{(i)} \rangle$. Les fonctions ainsi développées doivent vérifier l'équation cinétique (1.4) :

$$\partial_t \sum_{i \geq 0} \epsilon^{i+1} f^{(i)} + v \partial_x \sum_{i \geq 0} \epsilon^i f^{(i)} = \sigma \sum_{i \geq 0} \epsilon^{i-1} (\rho^{(i)} - f^{(i)}).$$

L'expression ainsi obtenue peut être écrite sous la forme d'un polynôme nul en ϵ . En domaine infini, toutes les dérivées restent bornées par rapport à ϵ du fait de l'absence de couches limites. De ce fait, ce polynôme est nul si et seulement si chaque terme devant les puissances de ϵ est nul. Les trois relations suivantes peuvent alors être écrites :

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= \rho^{(0)}, \\ v \partial_x f^{(0)} &= \sigma (\rho^{(1)} - f^{(1)}), \\ \partial_t f^{(0)} + v \partial_x f^{(1)} &= \sigma (\rho^{(2)} - f^{(2)}). \end{aligned}$$

La condition de compatibilité des développements impose que la moyenne du terme de gauche de la troisième équation est nul. En utilisant le fait que le premier terme du développement de la fonction de distribution est $\rho^{(0)}$, il est alors possible d'écrire la condition de solvabilité :

$$\partial_t \rho^{(0)} = -\partial_x \langle v f^{(1)} \rangle.$$

Or la deuxième équation fournit une expression de $f^{(1)}$, et donc par intégration, de $\langle v f^{(1)} \rangle$:

$$\langle v f^{(1)} \rangle = -\frac{\langle v^2 \rangle}{\sigma} \partial_x \rho^{(0)}.$$

Le résultat final est obtenu en combinant cette dernière équation avec la contrainte de solvabilité et en utilisant le fait que $\rho = \rho^{(0)} + \mathcal{O}(\epsilon)$. ■

Remarque 1.2.2 (*Approximation d'ordre supérieur*)

Il est possible d'écrire une 4ème relation à partir des développements de Hilbert pour obtenir une approximation d'ordre supérieur du régime de diffusion :

$$\partial_t f^{(1)} + v \partial_x f^{(2)} = \sigma(\rho^{(3)} - f^{(3)}).$$

La nouvelle contrainte de solvabilité est alors

$$\partial_t \rho^{(1)} + \partial_x \langle v f^{(2)} \rangle = 0.$$

Le flux inconnu est exprimé à partir de la troisième relation :

$$\langle v f^{(2)} \rangle = -\frac{\langle v^2 \rangle}{\sigma} \partial_x \rho^{(1)}.$$

Ainsi $\rho^{(1)}$ vérifie la même équation de diffusion (1.9) que ρ^0 et $\rho = \rho^{(0)} + \epsilon \rho^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$. L'approximation d'ordre supérieur de la fonction de distribution est quant à elle : $f = \rho^{(0)} + \epsilon \rho^{(1)} - \epsilon \frac{v}{\sigma} \partial_x \rho^{(0)} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$.

L'équation de diffusion (1.9) a pu être établie dans le cadre simplifié d'un domaine infini et dans l'hypothèse où la dérivée de la fonction de distribution reste bornée par rapport à ϵ . Cette hypothèse est raisonnable en considérant l'équation cinétique sans conditions aux limites. Dans le cas contraire, une couche limite peut apparaître aux bords et rendre les dérivées non bornées.

Considérons désormais le cas où le domaine est un intervalle $[a, b]$ de \mathbb{R} . L'équation cinétique est munie de conditions aux limites sur chacun des bords. Une demi-fonction de distribution est imposée pour les particules entrantes dans le domaine. Par exemple sur le bord gauche, celle-ci est de la forme

$$\forall v > 0, f(t, a, v) = f_G(t, v). \tag{1.10}$$

Si la condition aux limites est à l'équilibre ($f_G = \rho_G$), alors la démonstration précédente reste valide et le développement de Hilbert reste compatible sur le bord en posant $f^{(0)}(t, a, v) = \rho_G$, pour $v > 0$. Ainsi, la densité vérifie l'équation de diffusion (1.9) munie des conditions aux limites $\rho(t, a) = \rho_G(t)$ et $\rho(t, b) = \rho_D(t)$ à l'ordre 1 en ϵ (où ρ_D est la densité imposée sur le bord droit).

Si la condition aux limites n'est pas à l'équilibre, alors la démonstration n'est plus valable. En effet, la dérivée de la fonction de distribution au bord est de l'ordre de ϵ^{-1} puisque l'écart entre la fonction de distribution et sa densité est non nul. Ainsi, lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, une couche limite apparaît au bord dans laquelle la dérivée de la fonction de distribution n'est pas bornée. La taille de cette couche est du même ordre de grandeur que le nombre de Knudsen. De ce fait, l'hypothèse selon laquelle les dérivées spatiales sont bornées n'est plus valide. De plus, le développement de Hilbert de la fonction de distribution n'est plus compatible à l'intérieur de la couche limite. Il est donc nécessaire d'étudier le comportement

de la fonction de distribution à l'intérieur de celle-ci pour en déduire la bonne condition aux limites à imposer sur la densité.

Proposition 1.2.6 (*Limite de diffusion avec condition de bord anisotrope*)

Soit $\eta = \epsilon$. Lorsque ϵ tend vers 0, la densité en dehors de la couche limite satisfait l'équation de diffusion (1.9) munie des conditions aux limites :

$$\rho(t, a) = \rho_G(t) = \int_0^1 W(v) f_G(v, t) dv, \quad (1.11a)$$

$$\rho(t, b) = \rho_D(t) = \int_{-1}^0 W(-v) f_D(v, t) dv, \quad (1.11b)$$

où $W(v) \approx \frac{3}{2}v^2 + v$.

Démonstration : Prouvons ce résultat sur le bord gauche. Du fait de l'incompatibilité du développement de Hilbert usuel dans la couche limite, celui-ci doit être modifié pour prendre en compte le comportement singulier de la fonction de distribution à cet endroit. Des correcteurs de couche limite $(\varphi^{(i)})_{i \geq 0}$ sont donc introduits. Ceux-ci ne doivent pas avoir d'effets en dehors de la couche limite, ils vérifient donc : $\varphi^{(i)}(t, y, v) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} 0$, où $y = \frac{x}{\epsilon}$. Les développements de Hilbert modifiés de la fonction de distribution et de la densité sont alors

$$f(t, x, v) = \sum_{i \geq 0} \epsilon^i (f^{(i)}(t, x, v) + \varphi^{(i)}(t, \frac{x}{\epsilon}, v)),$$

$$\rho(t, x) = \sum_{i \geq 0} \epsilon^i (\rho^{(i)}(t, x) + \psi^{(i)}(t, \frac{x}{\epsilon})),$$

avec comme conditions de compatibilité : $\rho^{(i)} = \langle f^{(i)} \rangle$ et $\psi^{(i)} = \langle \varphi^{(i)} \rangle$. De la même manière que précédemment, les développements sont employés dans l'équation cinétique (1.4). Une séparation des variables entre les correcteurs de couches limites et les développements est imposée. Six relations peuvent alors être écrites :

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= \rho^{(0)}, \\ v \partial_y \varphi^{(0)} &= \sigma(\psi^{(0)} - \varphi^{(0)}), \\ v \partial_x f^{(0)} &= \sigma(\rho^{(1)} - f^{(1)}), \\ v \partial_y \varphi^{(1)} &= \sigma(\psi^{(1)} - \varphi^{(1)}), \\ \partial_t f^{(0)} + v \partial_x f^{(1)} &= \sigma(\rho^{(2)} - f^{(2)}), \\ \partial_t \varphi^{(0)} + v \partial_y \varphi^{(2)} &= \sigma(\psi^{(2)} - \varphi^{(2)}). \end{aligned}$$

La condition de compatibilité du développement de Hilbert sur le bord est :

$$\rho^{(0)}(t, a) + \varphi^{(0)}(t, a, v) = f_G(t, v). \quad (1.12)$$

Du fait de la séparation des variables, la condition de solvabilité est identique et l'équation de diffusion sur $\rho^{(0)}$ peut être établie par le même raisonnement. En dehors de la couche limite, la densité est $\rho = \rho^{(0)} + \mathcal{O}(\epsilon)$. De ce fait celle-ci vérifie la même équation de diffusion que précédemment en dehors de la couche limite. Cependant, à l'intérieur de celle-ci, la densité est altérée par le correcteur :

$$\rho = \rho^0 + \psi^{(0)} + \mathcal{O}(\epsilon).$$

Il est donc nécessaire de déterminer la valeur à imposer à $\rho^{(0)}$ sur le bord gauche pour évaluer la densité (à l'ordre 1 en ϵ) en dehors de la couche limite. L'équation (1.12), permet de comprendre pourquoi il n'est pas possible de choisir $\rho^{(0)}(0) = \langle f_G(v) \rangle$. La valeur à imposer va être entièrement déterminée par la contrainte sur la limite du correcteur de couche limite lors de la résolution du problème de Milne [42, 38]. Ce problème apparaît sur $\varphi = \varphi^{(0)}$ en

combinant la première équation sur le correcteur ainsi que la contrainte sur le bord (1.12) :

$$\begin{cases} v\partial_y\varphi = \sigma(\langle\varphi\rangle - \varphi), \\ \forall v > 0, \varphi(t, 0, v) = \varphi_G, \end{cases}$$

avec $\varphi_G = f_G(t, v) - \rho^{(0)}(t, 0, v)$. De part la structure du problème, il peut être montré que : $\exists\varphi_\infty, \forall v > 0, \varphi(t, y, v) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} \varphi_\infty$. Or la forme $\varphi_G \mapsto \varphi_\infty$ est linéaire et continue. Ainsi le théorème de représentation de Riesz permet d'écrire que :

$$\exists!W \in \mathcal{L}^2([0, 1], \mathbb{R}_+), \varphi_\infty = \langle W, \varphi_G \rangle = \int_0^1 W(v)\varphi_G(v)dv.$$

Il peut être démontré que $\int_0^1 W(v)dv = 1$ et qu'une bonne approximation de cette fonction est $W(v) \approx \frac{3}{2}v^2 + v$. Or, la contrainte sur les correcteurs de couche limite impose que φ_∞ soit nul. Ainsi, de part la définition de φ_∞ , la densité à imposer au bord est :

$$\rho^{(0)}(t, a) = \int_0^1 W(v)f_G(t, v)dv. \quad \blacksquare$$

Remarque 1.2.3

Cette donnée de bord pour une condition limite anisotrope est toujours valable si la fonction de distribution en entrée est isotrope car $\int_0^1 W = 1$. En pratique, la densité à l'intérieur de la couche limite n'est souvent pas accessible puisque celle-ci est de taille inférieure au maillage. La densité dans la couche est donc approximée par $\rho^{(0)}$. Néanmoins, l'utilisation de la bonne condition de bord est primordial pour obtenir la bonne limite de diffusion dans l'ensemble du domaine. En particulier, la densité de la fonction de distribution sur le bord n'est pas une bonne approximation et engendre souvent une erreur très importante qui se répercute dans l'ensemble du domaine (voir Figure 1.1).

Remarque 1.2.4 (*Couche limite temporelle*)

Un problème similaire apparaît en introduisant une condition initiale anisotrope. En effet, si à l'instant initial, l'écart entre la fonction de distribution et sa densité est non nul alors la dérivée temporelle de la fonction de distribution est de l'ordre de ϵ^{-2} ce qui provoque cette fois l'apparition d'une couche limite temporelle.

1.2.4 Modèles aux moments

1.2.4.1 Principe général

L'équation du transport linéaire est coûteuse à résoudre numériquement puisque la fonction de distribution est définie dans l'espace des phases. En une dimension d'espace, le coût reste encore raisonnable (équivalent à une résolution 2D) mais celui-ci devient vite prohibitif en dimension supérieure. L'objectif des modèles aux moments est de fournir une approximation de l'équation cinétique tout en réduisant le nombre de variables cinétiques. Pour ce faire, la forme de la fonction de distribution est supposée en fonction de ses moments puis des équations sont écrites pour décrire l'évolution de ceux-ci. Cette hypothèse est souvent motivée par un argument physique comme la minimisation de l'entropie de la fonction de distribution ou la troncature d'un développement. L'équation cinétique est donc remplacée par un système d'équations sur les moments de la fonction de distribution. Tout d'abord, précisons la notion de moment.

Définition 1.2.1 (*Moments*)

Soit $\mathbf{m}(v)$ un vecteur regroupant les éléments d'une base de $\mathbb{R}_n[X]^1$ sur $[-1, 1]$. Le vecteur

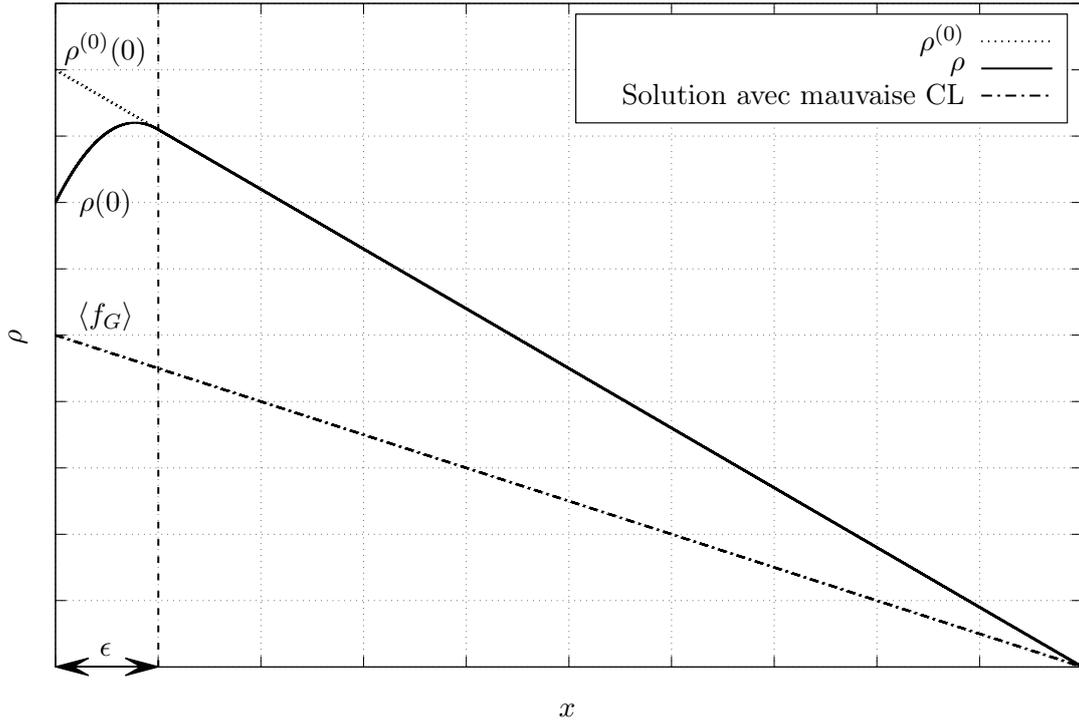


FIGURE 1.1 – Illustration de la solution stationnaire dans le régime de diffusion avec une donnée de bord anisotrope à gauche

des moments $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n+1}$ d'une fonction de distribution f est l'intégrale de celle-ci contre \mathbf{m} sur l'espace des vitesses :

$$\mathbf{U} = \langle \mathbf{m}f \rangle = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mathbf{m}(v) f(v) dv. \quad (1.13)$$

La description de l'évolution des moments de la fonction de distribution est obtenue en intégrant l'équation du transport linéaire (1.4) contre le vecteur de la base de polynôme. Une hiérarchie de moments de l'équation cinétique est alors formée :

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F} = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad (1.14)$$

où $\mathbf{U} = \langle \mathbf{m}f \rangle$ est le vecteur des moments, $\mathbf{F} = \frac{1}{\eta} \langle v \mathbf{m}(v) f(\cdot, \cdot, v) \rangle$ est le vecteur des flux et $\mathbf{S}(\mathbf{U}) = \nu (\langle \mathbf{m} \rangle \rho - \mathbf{U})$ est le terme source. Le vecteur flux ne peut pas s'exprimer en fonction des moments puisque l'ordre du dernier polynôme est $n+1$. Cette observation est une conséquence de la perte d'information issue du processus d'intégration qui permet d'éliminer la variable cinétique. La fermeture de la hiérarchie consiste à exprimer le flux \mathbf{F} en fonction des moments \mathbf{U} pour obtenir un modèle complet bien défini. Une manière indirecte de procéder est de supposer que la fonction de distribution f adopte une certaine forme $\hat{f}(\mathbf{U})$ qui dépend des moments \mathbf{U} . Cette nouvelle fonction de distribution réalise les mêmes moments ($\langle \mathbf{m} \hat{f} \rangle = \mathbf{U}$) et permet de calculer le vecteur flux en posant

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \frac{1}{\eta} \langle v \mathbf{m}(v) \hat{f}(\mathbf{U})(v) \rangle. \quad (1.15)$$

1. Les polynômes de degré au plus n .

A titre d'illustration, la plus petite hiérarchie de moment permettant de restituer une anisotropie est celle donnée par le vecteur $\mathbf{m}(v) = (1 \quad v)^T$ (issu de la base canonique) :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \frac{1}{\eta} \partial_x j &= 0 \\ \partial_t j + \frac{1}{\eta} \partial_x q &= -\nu j \end{cases}, \quad (1.16)$$

où ρ est la densité, $j = \langle v f(\cdot, \cdot, v) \rangle$ est la densité de courant et $q = \langle v^2 f(\cdot, \cdot, v) \rangle$ est le troisième moment de la fonction de distribution. La première équation n'est rien d'autre que l'équation de conservation de la masse. Dans ce cas, la fermeture consiste simplement à exprimer le dernier flux en fonction de $\mathbf{U} = (\rho, j)$, en posant :

$$q = \langle v^2 \hat{f}(\mathbf{U})(v) \rangle. \quad (1.17)$$

D'une manière générale, pour toute hiérarchie formée avec la base canonique, la fermeture consiste simplement à exprimer le dernier flux en fonction des moments. Dans les sections suivantes, deux méthodes différentes seront présentées pour supposer la forme de la fonction de distribution \hat{f} . Une première remarque importante porte sur la construction de la hiérarchie en pratique.

Remarque 1.2.5 (*Polynôme de Legendre*)

Un choix naturel de base pour la hiérarchie est celle des polynômes de Legendre $(P_i)_{i \leq n}$, qui sont orthogonaux sur $[-1, 1]$. Cette propriété permet d'obtenir un terme source diagonal :

$$(\mathbf{S}(\mathbf{U}))_i = \begin{cases} 0 & \text{si } i = 0 \\ -(\mathbf{U})_i & \text{sinon} \end{cases}, \quad (1.18)$$

ce qui est intéressant d'un point de vue numérique. Cependant, le vecteur des flux s'exprime plus difficilement en fonction des moments. La formule de récurrence de Bonnet permet de montrer que la i -ème composante du flux est

$$\mathbf{F}(\mathbf{U})_i = \frac{1}{\eta} \left(\frac{i+1}{2i+1} (\mathbf{U})_{i+1} + \frac{i}{2i+1} (\mathbf{U})_{i-1} \right), \quad (1.19)$$

avec comme convention $(\mathbf{U})_{-1} = 0$ et $(\mathbf{U})_{n+1} = \langle P_{n+1} \hat{f} \rangle$. Dans ce cas, la fermeture consiste à exprimer $(\mathbf{U})_{n+1}$ dans le dernier flux.

Une notion importante pour la suite est celle de la réalisabilité.

Définition 1.2.2 (*Réalisabilité*)

Un vecteur de moment \mathbf{U} est dit réalisable s'il existe une fonction de distribution positive f telle que :

$$\langle \mathbf{m} f \rangle = \mathbf{U}. \quad (1.20)$$

Dans le cas de la hiérarchie donnée par le vecteur $\mathbf{m}(v) = (1 \quad v)^T$, le critère de réalisabilité s'exprime facilement.

Proposition 1.2.7

Soient $\mathbf{U} = (\rho \quad j)^T$ et $u = j/\rho$. Le vecteur des moments est réalisable si et seulement si $\rho > 0$ et $|u| < 1$, ou $\mathbf{U} = \mathbf{0}$.

Démonstration : Si \mathbf{U} est réalisable alors $\rho = \langle f \rangle \geq 0$. Si $\rho = 0$, alors $f = 0$ et donc $j = 0$ et $\mathbf{U} = \mathbf{0}$. Si $\rho > 0$, alors $|j| \leq \langle |v| f \rangle < \langle f \rangle = \rho$ puisque $|v| \leq 1$, et donc $|u| < 1$. La réciproque peut être prouvée en utilisant la distribution M1 introduite dans la section 1.2.4.3 ■

1.2.4.2 Les modèles Pn

Un idée naturelle pour construire \hat{f} est d'utiliser un développement tronqué de la fonction de distribution sur la base des polynômes de Legendre. Le développement à l'ordre n s'écrit alors sous la forme :

$$\forall v \in [-1, 1], \hat{f}(v) = \sum_{j=0}^n \Lambda_j P_j, \quad (1.21)$$

où P_j est le j -ème polynôme de Legendre et $\Lambda \in \mathbb{R}^{n+1}$ sont les composantes dans cette base. Ce dernier est fixé par la contrainte sur la réalisation des $n + 1$ premiers moments de la fonction de distribution :

$$\mathbf{U} = \langle \mathbf{m} \hat{f} \rangle. \quad (1.22)$$

Si le vecteur de la hiérarchie est celui de la base des polynômes de Legendre alors Λ prend une forme simple (en utilisant le fait que le carré de la norme du j -ème polynôme de Legendre est $\frac{1}{2j+1}$) :

$$\Lambda_j = (2j + 1)U_j. \quad (1.23)$$

Dans le cas de la base canonique, les composantes ne prennent pas une forme aussi simple et il est nécessaire d'explicitier les polynômes de Legendre pour les exprimer.

Explicitons la fonction de distribution Pn dans le cas particulier de la hiérarchie élémentaire (1.16).

Proposition 1.2.8 (Modèle P1)

Si $\mathbf{m}(v) = (1 \quad v)^T$, alors la fonction de distribution P1 prend la forme :

$$\forall v \in [-1, 1], \hat{f}(v) = \rho + 3jv, \quad (1.24)$$

et le flux fermé est

$$q = \langle v^2 \hat{f}(v) \rangle = \frac{\rho}{3}. \quad (1.25)$$

Proposition 1.2.9 (Structure du modèle P1)

Le modèle P1 est hyperbolique.

Démonstration : La Jacobienne du flux est

$$\mathbf{J}_{\mathbf{F}}(\mathbf{U}) = (\partial_{U_j} F_i)_{i,j} = \frac{1}{\eta} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de la jacobienne sont : $\lambda^{\pm} = \pm \frac{1}{\sqrt{3}\eta}$. Le système P1 est donc bien hyperbolique. ■

Remarque 1.2.6

Dans cette manière d'introduire le modèle P1, le développement est obtenu en supposant les projections d'ordre supérieur nulles. Il peut paraître discutable de définir le flux de cette manière au regard de cette hypothèse. Une autre manière de voir cette fermeture est de remarquer que l'hypothèse $\langle P_2 \hat{f} \rangle = 0$ peut se réécrire sous la forme :

$$\left\langle \frac{1}{2} (3v^2 - 1) \hat{f} \right\rangle = 0, \quad (1.26)$$

ce qui est équivalent à (1.25). Le modèle P1 peut donc être défini seulement en supposant

que la projection de la fonction de distribution sur le deuxième polynôme de Legendre est nulle. Ces questions ont été abordées dans un cadre plus général dans [13]. Dans le cadre des développements numériques ultérieurs, l'hypothèse de la nullité des projections d'ordre supérieur est cependant nécessaire.

1.2.4.3 Les modèles entropiques

Les modèles entropiques ont été introduit pour la première fois dans [47] et ont plus tard été repris par [21]. Ces modèles utilisent un argument d'entropie pour supposer la forme de la fonction de distribution et ainsi fermer la hiérarchie de moments (1.14).

Modèle Mn

Tout d'abord, le modèle est établi dans le cas général d'une hiérarchie de taille $n + 1$ obtenue avec une hiérarchie arbitraire donnée par le vecteur $\mathbf{m}(v) \in \mathbb{R}^{n+1}$.

Proposition 1.2.10 (*Fermeture Mn*)

Soit $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n+1}$ un vecteur de moments réalisable. Si la densité est non nulle, alors la fonction de distribution $\hat{f} \in \mathcal{C}^\infty([-1, 1], \mathbb{R}_+^*)$ qui minimise la fonctionnelle d'entropie de Boltzmann $\langle h(f) \rangle = \langle f \ln f - f \rangle$ sous la contrainte $\langle \mathbf{m}\hat{f} \rangle = \mathbf{U}$ est

$$\hat{f}(\mathbf{U}) = e^{\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m}}, \quad (1.27)$$

où le vecteur des variables entropiques $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n+1}$ est défini à partir de la contrainte sur la réalisation des moments.

Démonstration : La fonction de distribution Mn \hat{f} vérifie le problème de minimisation sous contrainte suivant :

$$\hat{f} = \underset{f \in \mathcal{S}}{\operatorname{argmin}} \langle g(f) \rangle,$$

où $\mathcal{S} = \{f \in \mathcal{L}^2([-1, 1], \mathbb{R}_+) / \langle \mathbf{m}f \rangle = \mathbf{U}\}$. Le Lagrangien associé à ce problème est

$$\mathcal{L}(f) = \langle h(f) \rangle + \mathbf{\Lambda} \cdot (\mathbf{U} - \langle \mathbf{m}f \rangle),$$

où $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n+1}$ est le vecteur des multiplicateurs de Lagrange. La fonction \hat{f} annule la dérivée fonctionnelle de ce Lagrangien : $\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta f}(\hat{f}) = 0$, ce qui implique :

$$h'(\hat{f}) = \langle \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m} \rangle,$$

et donc

$$\hat{f} = e^{\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m}}. \quad (1.28)$$

La valeur des multiplicateurs est obtenue implicitement en traduisant la contrainte $\langle \mathbf{m}\hat{f} \rangle = \mathbf{U}$. ■

Le système constitué de la hiérarchie (1.14) et fermé avec la fonction de distribution (1.27) est le modèle aux moments Mn. Par rapport au modèle Pn, celui-ci présente l'avantage d'avoir une fonction de distribution sous-jacente positive. Cependant la fermeture n'est pas analytique dans le cas général; ni le flux du modèle aux moments, ni les variables entropiques $\mathbf{\Lambda}$ ne peuvent s'écrire analytiquement en fonction des variables conservatives \mathbf{U} .

Ce système d'équations aux dérivées partielles a plusieurs avantages qui sont exposées dans les propositions suivantes. Ces résultats ont été prouvés dans le cadre du transfert radiatif dans [21], et sont ici partiellement repris et adaptés dans le contexte du transport linéaire. Une première propriété importante pour les méthodes numériques est l'hyperbolicité.

Proposition 1.2.11 (Hyperbolicité)

Le modèle aux moments Mn est hyperbolique.

Démonstration : La fonction de distribution fermée \hat{f} peut être interprétée comme une fonction dans $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}^{n-1}, \mathbb{R}_+^*)$ des variables entropique $\mathbf{\Lambda}$. Tout d'abord, développons les dérivées en temps et en espace par rapport à $\mathbf{\Lambda}$ dans le modèle Mn :

$$\eta \langle \mathbf{m} \partial_{\mathbf{\Lambda}} \hat{f} \rangle \partial_t \mathbf{\Lambda} + \langle v \mathbf{m} \partial_{\mathbf{\Lambda}} \hat{f} \rangle \partial_x \mathbf{\Lambda} = \frac{\sigma}{\epsilon} \langle \mathbf{m}(\rho - \hat{f}) \rangle.$$

La dérivée de l'application $\mathbf{\Lambda} \rightarrow \hat{f}(\mathbf{\Lambda})$ est $\mathbf{m} \hat{f}$, le modèle se réécrit donc sous la forme :

$$\eta \langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \hat{f} \rangle \partial_t \mathbf{\Lambda} + \langle v \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \hat{f} \rangle \partial_x \mathbf{\Lambda} = \frac{\sigma}{\epsilon} \langle \mathbf{m}(\rho - \hat{f}) \rangle. \quad (1.29)$$

Soient $\mathbf{Q}(\mathbf{\Lambda}) = \langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \hat{f} \rangle$ et $\mathbf{R}(\mathbf{\Lambda}) = \langle v \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \hat{f} \rangle$. La matrice \mathbf{Q} est symétrique définie positive. En effet, ces deux dernières propriétés dérivent de la forme exponentielle de la fermeture qui garantit la positivité de la fonction de distribution :

$$\forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{n+1}, \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{Q}(\mathbf{\Lambda}) \boldsymbol{\beta} = \langle (\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{m})^2 \hat{f} \rangle \geq 0,$$

$$\forall \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{n+1}, \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{Q}(\mathbf{\Lambda}) \boldsymbol{\beta} = 0 \iff \boldsymbol{\beta} = 0.$$

De plus, la matrice \mathbf{Q} est inversible. Soit $Q^{1/2}$ la racine carrée de celle-ci ayant les mêmes sous-espaces propres que \mathbf{Q} . La matrice du système se décompose alors sous la forme suivante :

$$Q^{-1}(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{R}(\mathbf{\Lambda}) = Q^{-1/2}(\mathbf{\Lambda}) Q^{-1/2}(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{R}(\mathbf{\Lambda}) Q^{-1/2}(\mathbf{\Lambda}) Q^{1/2}(\mathbf{\Lambda})$$

La matrice $Q^{-1}(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{R}(\mathbf{\Lambda})$ du système (1.29) est diagonalisable à valeurs propres réelles puisque semblable à la matrice symétrique réelle $Q^{-1/2}(\mathbf{\Lambda}) \mathbf{R}(\mathbf{\Lambda}) Q^{-1/2}(\mathbf{\Lambda})$. Le système (1.29) en $\mathbf{\Lambda}$ est donc hyperbolique.

Montrons dans un second temps que l'hyperbolicité de ce système implique celle du modèle aux moments. La matrice du système Mn est :

$$J(\mathbf{\Lambda}) = \frac{d\mathbf{F}}{d\mathbf{U}}(\mathbf{U}) = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \alpha} \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{\Lambda}} \right)^{-1} = \mathbf{R}(\mathbf{\Lambda}) Q^{-1}(\mathbf{\Lambda}).$$

On remarque que la Jacobienne du système est semblable à la matrice du système précédent, qui est diagonalisable à valeurs propres réelles. Le modèle aux moments Mn est donc bien hyperbolique. ■

Il a été démontré dans la section précédente que l'équation du transport linéaire dissipe l'entropie de Boltzmann et d'une manière générale, toute fonction convexe. Le modèle aux moments Mn étant construit à partir d'une fermeture entropique de l'équation cinétique, il apparaît naturel que le modèle aux moments dissipe aussi l'entropie. Prouvons ce résultat.

Proposition 1.2.12 (Dissipation de l'entropie)

L'entropie de Boltzmann $h(f) = f \ln f - f$, est une entropie mathématique pour le modèle aux moments Mn.

Démonstration : Tout d'abord multiplions le modèle Mn par $\mathbf{\Lambda}$:

$$\eta \partial_t \langle \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m} \hat{f} \rangle + \partial_x \langle v \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m} \hat{f} \rangle = \frac{\sigma}{\epsilon} \langle \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m}(\rho - \hat{f}) \rangle.$$

De part la définition de la fermeture : $\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m} = -\frac{\delta h}{\delta \hat{f}}(\hat{f})$. Le modèle se réécrit donc sous la forme :

$$\begin{aligned} \eta \frac{\delta g}{\delta \hat{f}}(\hat{f}) \partial_t \langle \hat{f} \rangle + \frac{\delta g}{\delta \hat{f}}(\hat{f}) \partial_x \langle v \hat{f} \rangle &= \frac{\sigma}{\epsilon} \left\langle \frac{\delta g}{\delta \hat{f}}(\hat{f}) (\rho - \hat{f}) \right\rangle, \\ \eta \partial_t \langle g(\hat{f}) \rangle + \partial_x \langle v g(\hat{f}) \rangle &= \frac{\sigma}{\epsilon} \left\langle \left(g'(\hat{f}) - g'(\rho) \right) (\rho - \hat{f}) \right\rangle + \left\langle g'(\rho) (\rho - \hat{f}) \right\rangle. \end{aligned}$$

Or la fonctionnelle d'entropie est convexe. De ce fait, sa dérivée est croissante et donc le premier terme du second membre est négatif. De plus, le deuxième terme est de moyenne nulle puisque $g = h'(\rho)$ est indépendant de v . L'entropie est donc bien dissipée :

$$\eta \partial_t \langle g(\hat{f}) \rangle + \partial_x \langle v g(\hat{f}) \rangle \leq 0. \quad (1.30) \quad \blacksquare$$

Les modèles aux moments étant des descriptions intermédiaires entre le cinétique et la limite fluide de diffusion, il apparaît naturel que cette dernière soit incluse dans les modèles aux moments Mn. Prouvons le dans le cas où n est strictement plus grand que 2 et dans le cas où la hiérarchie est obtenue avec la base canonique de polynôme. Le cas $n = 2$ est traité séparément dans la prochaine section.

Proposition 1.2.13 (Limite de diffusion formelle)

Soit $n > 2$. A l'échelle de la diffusion $\eta = \epsilon$, lorsque ϵ tend vers 0, la densité du modèle aux moments Mn satisfait l'équation de diffusion (1.9).

Démonstration : Les trois premières équations de la hiérarchie sont

$$\begin{cases} \epsilon \partial_t \rho + \partial_x j &= 0, \\ \epsilon \partial_t j + \partial_x q &= \frac{-\sigma}{\epsilon} j, \\ \epsilon \partial_t q + \partial_x k &= \frac{\sigma}{\epsilon} (\langle v^2 \rangle \rho - f^{(2)}), \end{cases}$$

où $k = \langle v^3 f \rangle$. Dans un premier temps, les deux premières équations sont combinées pour éliminer la densité de courant :

$$\partial_t \rho = \partial_x \frac{1}{\sigma} \partial_x q + \mathcal{O}(\epsilon).$$

La troisième équation permet d'exprimer le troisième moment de la fonction de distribution :

$$q = \frac{\rho}{3} + \mathcal{O}(\epsilon).$$

En combinant ces deux relations, l'équation de diffusion apparaît bien sur ρ à l'ordre 1 en ϵ . \blacksquare

Remarque 1.2.7 (Pn)

Dans toute cette section, le modèle Mn a été développé avec l'entropie de Boltzmann. Cependant, les différents résultats restent correct pour toute fonctionnelle h convexe. Un cas particulier intéressant est celui de $h(f) = \frac{1}{2} f^2$. Dans ce cas, la fonction de distribution issue de la fermeture est

$$\hat{f} = \Lambda \cdot \mathbf{m},$$

qui n'est rien d'autre que la fonction de distribution Pn. Cela signifie que ce modèle peut être réinterprété comme un modèle entropique pour une entropie particulière.

Modèle M1

Dans un second temps, le modèle M1 est explicité. Celui-ci est défini à partir de la hiérarchie de moments de taille 2 (1.16) donné par le vecteur $\mathbf{m}(v) = (1 \quad v)^T$. Les résultats généraux du modèle Mn s'appliquent. Dans ce cas particulier, la fermeture peut être explicitée de manière semi-analytique.

Proposition 1.2.14 (Fonction de distribution M1)

Soit $\mathbf{U} = (\rho, j)$ un couple de moment réalisable. Si la densité est non nulle, alors la fonction

$\hat{f} \in \mathcal{C}^\infty([-1, 1], \mathbb{R}_+^*)$ minimisant la fonctionnelle d'entropie de Boltzmann $h(f) = f \ln f - f$ sous la contrainte $\langle \mathbf{m} \hat{f} \rangle = \mathbf{U}$ est :

$$\hat{f}(v) = e^{\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m}} = \rho \frac{\beta}{\sinh \beta} e^{\beta v}, \quad (1.31)$$

où $\mathbf{\Lambda} = (\alpha \ \beta)^T$ est le vecteur des variables entropiques et $\alpha = \ln(\rho \frac{\beta}{\sinh \beta})$. La variables d'anisotropie β est implicitement définie par la relation :

$$u = z(\beta), \quad (1.32)$$

où le facteur d'anisotropie est $u = \frac{j}{\rho} \in [-1, 1]$ et z est la fonction définie par

$$z(\beta) = \coth \beta - \frac{1}{\beta} \quad (1.33)$$

Démonstration : Dans le cas particulier de la fermeture M1, la fonction de distribution prend la forme

$$\hat{f}(v) = e^{\alpha + \beta v},$$

où les deux premiers multiplicateurs de Lagrange $(\alpha, \beta) \in \mathbb{R}^2$ sont définis à partir des contraintes sur la réalisation des moments

$$\begin{cases} \rho = e^\alpha \langle e^{\beta v} \rangle = \frac{e^\alpha}{\beta} \sinh \beta \\ j = e^\alpha \langle v e^{\beta v} \rangle = \frac{e^\alpha}{\beta} \left(\cosh \beta - \frac{1}{\beta} \sinh \beta \right) \end{cases} \quad (1.34)$$

La première équation permet d'éliminer le premier multiplicateur et d'exprimer la fonction de distribution M1 sous la forme voulue. La relation satisfaite par β est obtenue en combinant les deux équations :

$$j = \rho \left(\coth \beta - \frac{1}{\beta} \right). \quad \blacksquare$$

Proposition 1.2.15

Si le couple de moment (ρ, j) est réalisable, alors l'équation (1.32) admet une unique solution.

Démonstration : La fonction z est impaire et non définie en 0, on limite son étude pour $\beta > 0$. Celle-ci admet un développement en série entière en 0 qui est

$$z(\beta) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{2^{2n}}{(2n)!} B_{2n} x^{2n-1}, \quad (1.35)$$

où B_{2n} sont les nombres de Bernoulli. Elle est donc prolongeable par continuité en 0 (en posant $z(0) = 0$). La dérivée de z est

$$z'(\beta) = \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{\sinh x} \right) \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{\sinh x} \right) \quad (1.36)$$

Un développement en série entière de la fonction sinus hyperbolique permet de remarquer que :

$$\frac{1}{\sinh x} = \frac{1}{x} \frac{1}{1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{x^{2n}}{(2n+1)!}} \leq \frac{1}{x} \quad (1.37)$$

Ainsi la fonction z est croissante. De plus, la limite de z en $+\infty$ est 1. C'est donc une bijection de \mathbb{R} dans $] -1, 1[$. Ainsi, il existe une unique solution à l'équation $u = z(\beta)$ si et seulement si $|u| < 1$. ■

En pratique, dans le cas particulier du modèle M1, le dernier flux à fermer s'exprime en fonction des variables conservatives et entropiques.

Proposition 1.2.16 (Fermeture M1)

Le troisième moment de la fonction de distribution est

$$q = \langle v^2 \hat{f} \rangle = \rho \left(1 - 2 \frac{u}{\beta} \right). \quad (1.38)$$

Dans le cas où la densité est nulle, la fermeture n'est plus applicable puisque la vitesse u n'est plus définie. Cependant, par continuité de la fonctionnelle entropique en $f = 0$, il est possible de poser $\hat{f} = 0$ et donc $q = 0$. Par ailleurs dans la limite où u tend vers 0, le troisième moment tend vers $\frac{\rho}{3}$ (voir proposition suivante), ce qui correspond à la fermeture P1.

Finalement, la hiérarchie (1.16) fermée avec la fonction de distribution M1 (1.38), permet de définir le modèle aux moments M1 du transport linéaire. Celui-ci s'écrit alors sous la forme :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \frac{1}{\eta} \partial_x j & = 0 \\ \partial_t j + \frac{1}{\eta} \partial_x \rho \left(1 - 2 \frac{u}{\beta} \right) & = -\nu j \end{cases}, \quad (1.39)$$

où $\nu = \frac{\sigma}{\epsilon \eta}$ est la fréquence de collision. Tout comme pour le modèle Mn, la limite de diffusion est incluse dans le système. La hiérarchie étant seulement de taille 2, une stratégie différente de celle utilisée pour le modèle Mn doit être adoptée pour prouver ce résultat.

Proposition 1.2.17 (Limite de diffusion)

Lorsque ϵ tend vers 0, la densité du modèle M1, satisfait l'équation de diffusion (1.9).

Démonstration : Dans un premier temps, montrons que lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, la vitesse u tend aussi vers 0. Lorsque la densité est non nulle, la deuxième équation du modèle M1 permet d'écrire que

$$u = -\frac{\epsilon}{\sigma \rho} (\eta \partial_t j + \partial_x q).$$

En supposant que les dérivées restent bornées par rapport à ϵ , on a $u \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$. Dans un second temps, les deux équations du modèle M1 sont combinées pour obtenir la relation suivante :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= \partial_x \frac{1}{\sigma} \partial_x q + \mathcal{O}(\epsilon), \\ \partial_t \rho &= \partial_x \frac{1}{\sigma} \partial_x \rho \left(1 - 2 \frac{u}{\beta} \right) + \mathcal{O}(\epsilon). \end{aligned}$$

Il est désormais nécessaire d'étudier le rapport $u/z^{-1}(u)$ en $u = 0$. Tout d'abord, z et z^{-1} sont prolongeables par continuité en 0 et valent 0 en ce point. Donc, le rapport $\frac{z^{-1}(u)}{u}$ est le taux de variation de z^{-1} en 0. Le nombre dérivé de z en 0 étant $1/3$, il vient que :

$$\frac{u}{z^{-1}(u)} \xrightarrow{u \rightarrow 0} \frac{1}{(z^{-1})'(0)} = z' \circ z^{-1}(0) = \frac{1}{3}.$$

La limite du troisième moment lors le facteur d'anisotropie est donc

$$q \xrightarrow{u \rightarrow 0} \frac{\rho}{3}.$$

Finalement, la limite lorsque ϵ tend vers 0 est (par composition des limites)

$$\langle v^2 \hat{f} \rangle \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\rho}{3}.$$

La densité satisfait donc bien l'équation de diffusion (1.9). ■

Par ailleurs, le modèle M1 (en tant que membre des modèles Mn) est hyperbolique mais ses valeurs propres ne sont pas analytiques. Il est cependant possible de les calculer numériquement et de montrer que celles-ci sont comprises dans $[-\frac{1}{\eta}, \frac{1}{\eta}]$. Celles-ci sont représentées sur la figure 1.2.

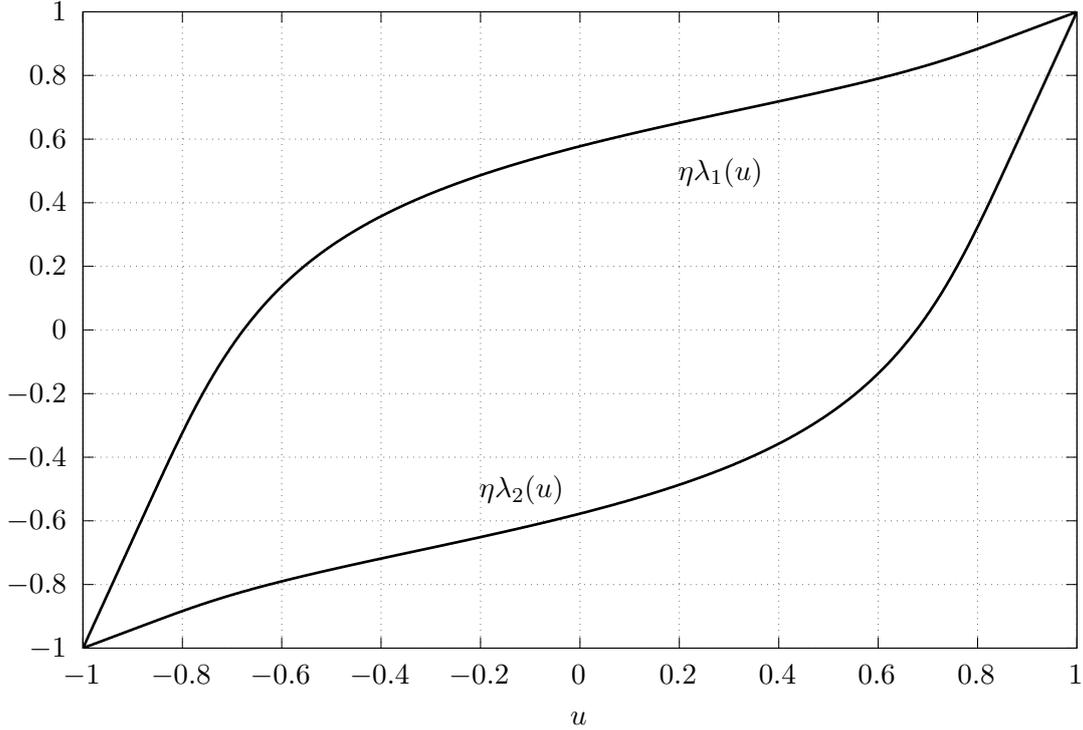


FIGURE 1.2 – Valeurs propres du modèle M1 en fonction de u

1.3 Le transport électronique

1.3.1 Équation cinétique

Le deuxième modèle physique étudié dans cette thèse est celui du transport électronique. Celui-ci est présenté dans sa formulation la plus simple sans prendre en compte d'éventuels champs magnétiques. Le transport des électrons est modélisé de manière statistique à travers une équation cinétique. Celle-ci décrit l'évolution de la fonction de distribution des électrons $f(t, \mathbf{x}, v, \boldsymbol{\Omega})$ au cours du temps t et dans l'espace des phases $(\mathbf{x}, v, \boldsymbol{\Omega})$. Le vecteur position \mathbf{x} est à valeur dans un ouvert \mathcal{D} de \mathbb{R}^2 et le vecteur vitesse est décomposé dans le système de coordonnées sphériques, en une norme $v \in \mathbb{R}_+$ et une direction $\boldsymbol{\Omega} \in \mathcal{S}^2$. L'équation cinétique s'écrit alors sous la forme usuelle :

$$\partial_t f + v \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \frac{1}{\tau} (M[f] - f). \quad (1.40)$$

Dans celle-ci, τ est un temps de collision et $M[f]$ est la maxwellienne de f . Afin de définir ces deux quantités, il est tout d'abord nécessaire de définir l'état macroscopique $\mathbf{W} = (\rho \ q)^T$

associé à la fonction de distribution f . La densité ρ et l'énergie q sont les moments de f sur l'espace des variables cinétiques :

$$\mathbf{W} = \int_{\mathcal{S}^2} \int_0^{+\infty} \Psi f(\cdot, v, \boldsymbol{\Omega}) v^2 dv d\boldsymbol{\Omega}, \quad (1.41)$$

où $\Psi = (1 \ \frac{1}{2}v^2)^T$ est le vecteur des invariants collisionnels. Par la suite, l'intégrale de n'importe quelle fonction de $(v, \boldsymbol{\Omega})$ sur $\mathbb{R}^+ \times \mathcal{S}^2$ sera notée $\langle\langle \cdot \rangle\rangle = \int_{\mathcal{S}^2} \int_{\mathbb{R}^+} \cdot v^2 dv d\boldsymbol{\Omega}$. Avec cette notation, le vecteur des variables macroscopiques est $\mathbf{W} = \langle\langle \Psi f \rangle\rangle$. La température T est définie à partir de ces deux quantités et vaut :

$$T = \frac{2q}{3\rho}. \quad (1.42)$$

Cette dernière permet de définir simplement l'opacité σ , qui est l'inverse du temps de collision :

$$\sigma(\mathbf{W}) = C \frac{\rho}{T^{3/2}}, \quad (1.43)$$

où C est une constante physique (dont la définition est discutée dans [18, 17]). Dans ce modèle, l'opérateur de collision considéré est de type BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) [3]. Tout comme pour l'équation du transport linéaire, celui-ci est un opérateur de relaxation qui permet de modéliser le retour à l'équilibre de la fonction de distribution. La distribution d'équilibre est la maxwellienne et dépend seulement de l'état macroscopique de f :

$$\forall v \in \mathbb{R}^+, M[f](v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right). \quad (1.44)$$

En temps long, la fonction de distribution tend donc à devenir isotrope (indépendante de $\boldsymbol{\Omega}$) et la vitesse des électrons tend à suivre cette distribution. La définition de cet état d'équilibre conditionne les quantités préservées par la processus de collision. En effet, les moments de la maxwellienne sont \mathbf{W} (voir annexe D). La densité et l'énergie sont donc conservées dans le temps, ce qui permet d'écrire deux lois de conservation :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \nabla \cdot \langle\langle v \boldsymbol{\Omega} f \rangle\rangle &= 0 \\ \partial_t q + \nabla \cdot \left\langle \left\langle \frac{1}{2} v^3 \boldsymbol{\Omega} f \right\rangle \right\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Dans ce modèle, la vitesse moyenne des particules n'est pas une grandeur conservée puisque la maxwellienne est centrée en 0 (et ne dépend donc pas de la vitesse moyenne des particules $\langle\langle v f \rangle\rangle$). Ce choix de modélisation traduit le fait que la vitesse moyenne des électrons est nulle en temps long. En plus de cette propriété de conservation, il est possible de montrer que cet opérateur vérifie le théorème H et assure donc la décroissance de l'entropie de Boltzmann $\langle\langle f \ln f - f \rangle\rangle$.

De même que pour le modèle précédent, il est plus pratique de considérer l'équation adimensionnelle pour étudier les régimes limites et pour des raisons numériques.

Proposition 1.3.1 (*Équation adimensionnelle*)

L'équation du transport électronique sous forme adimensionnelle est

$$\partial_t f + \frac{v}{\eta} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \nu (M[f] - f), \quad (1.45)$$

où $\nu = \frac{\sigma}{\epsilon \eta}$ est la fréquence de collision et (η, ϵ) sont deux nombres adimensionnels. Ceux-ci sont définis par :

$$\eta = \frac{L/\tau_t}{c}, \quad \epsilon = \frac{c\tau_c}{L}, \quad (1.46)$$

où L est une longueur caractéristique, c est une vitesse caractéristique, τ_t est un temps caractéristique lié au transport, τ_c est un temps caractéristique de collision.

Le premier nombre adimensionnel est toujours analogue à celui de Strouhal. Le deuxième est toujours le nombre de Knudsen, dans lequel la quantité $c\tau_c$ est une longueur qui correspond au libre parcours moyen des électrons. Lorsque le nombre de Knudsen tend vers l'infini, l'opérateur de collision tend à disparaître et l'équation limite est celle du transport libre. À l'inverse, lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, les fonctions de distribution tendent à être des maxwelliennes. Les équations régissant l'évolution des grandeurs macroscopiques \mathbf{W} sont établies dans la section suivante.

1.3.2 Limite fluide

Tout comme dans le cadre du transport linéaire, l'équation cinétique admet un régime asymptotique particulier lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0. En effet, dans cette limite les fonctions de distribution tendent vers l'équilibre Maxwellien $M[f]$ dépendant de l'état macroscopique \mathbf{W} . L'évolution de la densité et de l'énergie dans le temps peut être étudiée à l'aide de développements de Hilbert.

Proposition 1.3.2 (*Limite de diffusion formelle*)

Supposons que $\eta = \epsilon$ et que le domaine est \mathbb{R}^2 . Lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, les variables macroscopiques vérifient un système d'équation couplé à l'ordre 1 en ϵ :

$$\begin{cases} \partial_t \rho &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{2}{3\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} q \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \\ \partial_t q &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{5}{3} \frac{2}{3\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \left(\frac{q^2}{\rho} \right) \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \end{cases}. \quad (1.47)$$

Démonstration : Les développements de Hilbert de la fonction de distribution et de la maxwellienne sont

$$f = \sum_{i \geq 0} \epsilon^i f^{(i)}, \quad M[f] = \sum_{i \geq 0} \epsilon^i M^{(i)},$$

avec comme condition de compatibilité $M^{(i)} = \langle \langle f^{(i)} \rangle \rangle$. Ces développements sont introduits dans l'équation cinétique à l'échelle de la diffusion ($\eta = \epsilon$) :

$$\sum_{i \geq 0} \epsilon^{i+1} \partial_t f^{(i)} + \sum_{i \geq 0} \epsilon^i v \Omega \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f^{(i)} = \sum_{i \geq 0} \sigma \epsilon^{i-1} (M^{(i)} - f^{(i)}).$$

Si les dérivées restent bornées par rapport à ϵ , des relations peuvent être écrites pour chaque puissance de ϵ :

$$\begin{aligned} f^{(0)} &= M^{(0)}, \\ v \Omega \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f^{(0)} &= \sigma (M^{(1)} - f^{(1)}), \\ \partial_t f^{(0)} + v \Omega \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f^{(1)} &= \sigma (M^{(2)} - f^{(2)}). \end{aligned}$$

La contrainte de solvabilité est obtenue en intégrant la dernière équation contre le vecteur des invariants collisionnels $\Psi(v)$:

$$\partial_t \mathbf{W}^{(0)} = - \left\langle \left\langle v \Psi(v) \Omega \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f^{(1)} \right\rangle \right\rangle.$$

La deuxième relation issue des développement de Hilbert permet d'exprimer ce flux :

$$f^{(1)} = M^{(1)} - \frac{v}{\sigma} \Omega \cdot \nabla_{\mathbf{x}} M^{(0)}.$$

En utilisant le fait que les $M^{(i)}$ sont indépendants de $\mathbf{\Omega}$, une simple intégration donne finalement :

$$\begin{cases} \partial_t \rho^{(0)} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{2}{3\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \left\langle \left\langle \frac{1}{2} v^2 M^{(0)} \right\rangle \right\rangle \\ \partial_t q^{(0)} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{2}{3\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \left\langle \left\langle \frac{1}{4} v^4 M^{(0)} \right\rangle \right\rangle \end{cases}.$$

Le résultat final est obtenu en utilisant les expressions des moments de la maxwellienne (voir annexe D). ■

Il apparaît dans ce cas que les variables macroscopiques vérifient un système de diffusion non-linéaire couplé. Il est important de noter que dans ces expressions, l'opacité est une fonction de \mathbf{W} et ne peut donc pas être sortie des gradients. Il est possible de montrer quelques propriétés élémentaires sur ce système de diffusion. Par exemple, l'entropie associée à la maxwellienne est une fonction de Liapounov de ce système.

Lemme 1.3.1

L'entropie de Boltzmann de la maxwellienne $S(\mathbf{W}) = \langle \langle M[\mathbf{W}] \ln M[\mathbf{W}] - M[\mathbf{W}] \rangle \rangle$, s'écrit sous la forme :

$$S(\mathbf{W}) = \frac{1}{2} \rho \left(5 \ln \rho - 3 \ln q + 3 \ln \left(\frac{3}{4\pi} \right) - 5 \right). \quad (1.48)$$

Proposition 1.3.3 (Fonction de Liapounov)

L'entropie de Boltzmann de la maxwellienne est une fonction de Liapounov pour le système de diffusion (1.47).

Démonstration : Pour prouver ce résultat, l'intégrale en espace de la dérivée en temps de $S(\mathbf{W})$ est calculée :

$$\int_{\mathcal{D}} \partial_t S = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} \left[(\partial_t \rho) (5 \ln \rho - 3 \ln q + C_0) + \rho \left(5 \frac{\partial_t \rho}{\rho} - 3 \frac{\partial_t q}{q} \right) \right],$$

où $C_0 = 3 \ln \left(\frac{3}{4\pi} \right) - 5$. Puis les intégrales en temps des grandeurs macroscopiques sont remplacées par leurs expressions données par le système de diffusion :

$$\int_{\mathcal{D}} \partial_t S = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} \left[(\nabla \cdot \nabla q) (5 \ln \rho - 3 \ln q + C_0) - 5 \frac{\rho}{q} \nabla \cdot \left(\frac{q^2}{\rho} \left(2 \frac{\nabla q}{q} - \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) \right) \right]$$

Une intégration par partie permet finalement de montrer que :

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{D}} \partial_t S &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} \left[(-\nabla q) \cdot \left(5 \frac{\nabla \rho}{\rho} - 3 \frac{\nabla q}{q} \right) + 5q \left(\frac{\nabla \rho}{\rho} - \frac{\nabla q}{q} \right) \cdot \left(2 \frac{\nabla q}{q} - \frac{\nabla \rho}{\rho} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} X^T \mathbf{A} X, \end{aligned}$$

où $X^T = \left(\frac{\nabla \rho}{\rho} \quad \frac{\nabla q}{q} \right)$ et $\mathbf{A} = q \begin{pmatrix} -5 & 5 \\ 5 & -7 \end{pmatrix}$. Cette dernière matrice est symétrique définie négative (puisque de trace négative : $\text{Tr}(\mathbf{A}) = -12q$ et de déterminant positif : $|\mathbf{A}| = 10q^2$). De ce fait, $S(\mathbf{W})$ est globalement dissipée au cours du temps. ■

Pour s'assurer que ce système n'est pas dégénéré et bien représentatif d'un phénomène de diffusion, il est pertinent de le réécrire sous une forme faisant apparaître la divergence d'une matrice définie positive. Pour ce faire, le jeu de variables entropiques $\mathbf{\Lambda} = \left(\frac{-\mu}{T} \quad \frac{-1}{T} \right)^T$ est introduit. Celui-ci est défini de telle manière que la maxwellienne s'écrive sous la forme :

$$M[f](v) = \exp(\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{\Psi}(v)).$$

Les variables entropiques sont donc

$$-\frac{\mu}{T} = \ln\left(\frac{\rho^{5/2}}{q^{3/2}}\right) + \frac{3}{2} \ln\left(\frac{3}{4\pi}\right), \quad (1.49a)$$

$$-\frac{1}{T} = -\frac{3\rho}{2q}. \quad (1.49b)$$

Proposition 1.3.4

Le système de diffusion (1.47) est équivalent à

$$\partial_t \mathbf{W} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{D}(T) \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{\Lambda}, \quad (1.50)$$

où le gradient est défini par $\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{\Lambda} = \left(\frac{\partial \Lambda_i}{\partial x_j}\right)$ et la divergence par $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{M} = \left(\sum_k \frac{\partial M_{i,k}}{\partial x_k}\right)$ (\mathbf{M} est la matrice telle que $\mathbf{M} = \mathbf{D}(T) \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{\Lambda}$) et où \mathbf{D} est une matrice symétrique définie positive dépendant uniquement de la température :

$$\mathbf{D}(T) = \frac{T^{5/2}}{4C} \begin{pmatrix} 4 & 10T \\ 10T & 35T^2 \end{pmatrix}. \quad (1.51)$$

Démonstration : Tout d'abord, les gradients des variables entropiques sont

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} \left(-\frac{\mu}{T}\right) &= \frac{5}{2} \frac{\nabla_{\mathbf{x}} \rho}{\rho} - \frac{3}{2} \frac{\nabla_{\mathbf{x}} q}{q}, \\ \nabla_{\mathbf{x}} \left(-\frac{1}{T}\right) &= \frac{3\rho}{2q} \left(-\frac{\nabla_{\mathbf{x}} \rho}{\rho} + \frac{\nabla_{\mathbf{x}} q}{q}\right). \end{aligned}$$

Pour obtenir la forme voulue, le gradient de q et de $\frac{q^2}{\rho}$ sont exprimés en fonction du gradient des variables entropiques :

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} q &= q \nabla_{\mathbf{x}} \left(\frac{-\mu}{T}\right) + \frac{5q^2}{3\rho} \nabla_{\mathbf{x}} \left(\frac{-1}{T}\right), \\ -\frac{\nabla_{\mathbf{x}} \rho}{\rho} + 2 \frac{\nabla_{\mathbf{x}} q}{q} &= q \nabla_{\mathbf{x}} \left(\frac{-\mu}{T}\right) + \frac{7q^2}{3\rho} \nabla_{\mathbf{x}} \left(\frac{-1}{T}\right). \end{aligned}$$

Le système s'écrit alors sous la forme voulue et la matrice en fonction des variables conservatives est

$$\mathbf{D} = \frac{2q}{3\sigma} \begin{pmatrix} 1 & \frac{5q}{3\rho} \\ \frac{5q}{3\rho} & \frac{35q^2}{9\rho^2} \end{pmatrix}. \quad \blacksquare$$

La matrice du système est symétrique définie positive (puisque de trace positive : $\text{Tr}(\mathbf{D}) = \frac{T^{5/2}}{4C}(4 + 35T^2)$ et de déterminant positif : $|\mathbf{D}| = \frac{5T^7}{2C^2}$). De ce fait, dans ce jeu de variable le système n'apparaît pas comme dégénéré.

Remarque 1.3.1

Avec ce jeu de variable, la propriété de dissipation de l'entropie s'obtient plus facilement. En effet, la différentielle de l'entropie de Boltzmann de la maxwellienne est

$$dS(\mathbf{W}) = \left(-\frac{\mu}{T} - \frac{5}{2}\right) d\rho - \frac{1}{T} dq.$$

L'intégrale sur le domaine de la dérivée en temps de S est alors

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{D}} \partial_t S &= \int_{\mathcal{D}} -\frac{5}{2} \partial_t \rho - \frac{\mu}{T} \partial_t \rho - \frac{1}{T} \partial_t q, \\ &= \int_{\mathcal{D}} -\frac{5}{2} \partial_t \rho + \mathbf{\Lambda} \cdot \partial_t \mathbf{W}.\end{aligned}$$

La masse est globalement conservée donc le terme en $\partial_t \rho$ disparaît. En remplaçant la dérivée en temps par la nouvelle expression du système écrit en fonction des variables entropique puis en réalisant une intégration par partie, l'expression devient :

$$\begin{aligned}\int_{\mathcal{D}} \partial_t S &= \int_{\mathcal{D}} \mathbf{\Lambda} \cdot (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{D}(T) \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{\Lambda}), \\ &= \int_{\mathcal{D}} -\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{\Lambda} : \mathbf{D}(T) \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{\Lambda}.\end{aligned}$$

La matrice D étant symétrique définie positive, l'entropie est bien dissipée.

1.3.3 Modèles aux moments angulaires

Pour cette équation du transport électronique, des modèles aux moments dit "angulaires" sont considérés. Ceux-ci sont constitués d'une hiérarchie de moments en direction $\mathbf{\Omega}$ de l'équation cinétique (1.40). Une hypothèse est ensuite formulée sur la forme de la fonction de distribution pour fermer le flux de la hiérarchie. Le procédé global est similaire à celui décrit dans le cadre du transport linéaire. Cependant, une variable cinétique de vitesse v est conservée dans le modèle. Tout d'abord, précisons la notion de moment angulaire.

Définition 1.3.1 (*Moment angulaire*)

Les moments angulaires $\mathbf{f}^{(i)}$ d'une fonction de distribution f sont définis par :

$$\forall i \geq 0, \forall v \in \mathbb{R}_+, \mathbf{f}^{(i)}(v) = \int_{\mathbb{S}^2} \mathbf{\Omega}^{\otimes i} f(v, \mathbf{\Omega}) d\Omega, \quad (1.52)$$

où $\mathbf{f}^{(i)}$ est un tenseur de rang i . Au rang 0, on note $\mathbf{f}^{(0)} = f^{(0)}$.

Par la suite, l'intégrale de n'importe quelle fonction de $\mathbf{\Omega}$ sur la sphère sera notée $\langle \cdot \rangle = \int_{\mathcal{S}^2} \cdot d\Omega$. Avec cette notation les moments sont : $\mathbf{f}^{(i)}(v) = \langle \mathbf{\Omega}^{\otimes i} f(v, \mathbf{\Omega}) \rangle$. Il doit être remarqué que la famille composée des $(\mathbf{\Omega}^{\otimes i})_{i \leq n}$ n'est pas une base de polynômes sur la sphère mais simplement une famille génératrice. La première relation linéaire apparaît sur les composantes du troisième moment et permet d'exprimer le premier : $f_{xx}^{(2)} + f_{yy}^{(2)} + f_{zz}^{(2)} = f^{(0)}$. De ce fait, il pourrait être préférable d'utiliser la base des harmoniques sphériques mais ceux-ci sont moins pratiques à utiliser dans ce contexte.

Le modèle aux moments étudié est celui donné par le vecteur $\mathbf{m}(\mathbf{\Omega}) = (1 \ \mathbf{\Omega})^T$. La hiérarchie de moments formée par ce vecteur est obtenue en intégrant l'équation cinétique (1.45) contre celui-ci sur la sphère. Elle s'écrit alors sous la même forme que précédemment :

$$\partial_t \mathbf{U} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \nu \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad (1.53)$$

où $\mathbf{U} = \langle m(\mathbf{\Omega}) f(\cdot, \mathbf{\Omega}) \rangle = (f^{(0)} \ \mathbf{f}^{(1)})^T$ est le vecteur des variables mésoscopiques, $\mathbf{S}(\mathbf{U}) = (4\pi M[\mathbf{U}] \ \mathbf{0})^T - \mathbf{U}$ est le terme source et $\mathbf{F} = \frac{\nu}{\eta} (\mathbf{f}^{(1)} \ \mathbf{f}^{(2)})^T$ est le flux. La Maxwellienne dépend désormais de \mathbf{U} et est calculée à partir des moments de $f^{(0)}$. La deuxième composante de ce flux est inconnue et résulte de la perte d'information issue du processus d'intégration. La fermeture de la hiérarchie consiste à exprimer $\mathbf{f}^{(2)}$ en fonction de \mathbf{U} pour finalement construire

un modèle aux moments. Pour ce faire, une manière indirecte de procéder est de supposer la forme angulaire de la fonction de distribution \hat{f} en fonction de \mathbf{U} , ce qui permet ensuite de poser :

$$\mathbf{f}^{(2)} = \left\langle \boldsymbol{\Omega} \otimes \boldsymbol{\Omega} \hat{f}(\mathbf{U})(\boldsymbol{\Omega}) \right\rangle. \quad (1.54)$$

Pour la suite, il sera pratique de décomposer $\mathbf{f}^{(1)}$ sous la forme suivante :

$$\mathbf{f}^{(1)} = u \mathbf{d} f^{(0)}, \quad (1.55)$$

où $u = \frac{\|\mathbf{f}^{(1)}\|}{f^{(0)}}$ est le facteur d'anisotropie et $\mathbf{d} = \frac{\mathbf{f}^{(1)}}{\|\mathbf{f}^{(1)}\|}$ est le vecteur unitaire de direction. La notion de réalisabilité de \mathbf{U} est similaire à précédemment ; un vecteur \mathbf{U} est réalisable s'il existe une fonction de distribution positive f telle que $\mathbf{U} = \langle mf \rangle$. Cette propriété se caractérise de la manière suivante.

Proposition 1.3.5

Le vecteur des variables mésoscopiques \mathbf{U} est réalisable si et seulement si $f^{(0)} > 0$ et $u < 1$ ou $\mathbf{U} = \mathbf{0}$.

Démonstration : La preuve de cette proposition est similaire à celle de la proposition 1.2.7. ■

Dans les deux sections suivantes, les fermetures P1 et M1 sont détaillées pour les modèles aux moments angulaires. Ces fermetures sont obtenues pour une vitesse donnée dans la hiérarchie.

1.3.3.1 Modèle P1

Le modèle P1 repose sur un développement de la fonction de distribution sur la base des harmoniques sphériques.

Proposition 1.3.6 (Fermeture P1)

La fonction de distribution P1 est

$$\forall \boldsymbol{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \hat{f}(\boldsymbol{\Omega}) = f^{(0)} + 3\mathbf{f}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\Omega}. \quad (1.56)$$

Par ailleurs, le troisième moment de la fonction de distribution M1 est

$$\mathbf{f}^{(2)} = \frac{f^{(0)}}{3} \mathbf{I}_3. \quad (1.57)$$

Démonstration : La fonction de distribution P1 se décompose sous la forme générale :

$$\hat{f}(\boldsymbol{\Omega}) = \alpha + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}.$$

La valeur des variables entropiques $(\alpha, \boldsymbol{\beta})$ est fixée par la contrainte sur la réalisation des moments. Ces résultats sont obtenus en utilisant le fait que $\langle \boldsymbol{\Omega} \rangle = 0$ et que $\langle \boldsymbol{\Omega} \otimes \boldsymbol{\Omega} \rangle = \frac{1}{3} \mathbf{I}_3$. ■

1.3.3.2 Modèle M1

Tout comme pour le transport linéaire, le modèle M1 repose sur un argument entropique pour supposer la forme angulaire de la fonction de distribution et donc fermer la hiérarchie de moments.

Proposition 1.3.7 (Fermeture M1)

Soit $\mathbf{U} = (f^{(0)} \quad \mathbf{f}^{(1)})^T$ un couple de moments réalisables. Si $f^{(0)} > 0$, alors la fonction de

distribution \hat{f} qui minimise la fonctionnelle d'entropie de Boltzmann $h(f) = \langle f \ln f - f \rangle$ sous la contrainte $\langle \mathbf{m} \hat{f} \rangle = \mathbf{U}$ est

$$\forall \boldsymbol{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \hat{f}(\boldsymbol{\Omega}) = e^{\boldsymbol{\Lambda} \cdot \mathbf{m}(\boldsymbol{\Omega})} = f^{(0)} \frac{\|\boldsymbol{\Omega}\|}{4\pi \sinh \|\boldsymbol{\Omega}\|} e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}}, \quad (1.58)$$

où $\boldsymbol{\Lambda} = (\alpha \ \boldsymbol{\beta})^T$ est le vecteur des variables entropiques défini à partir des relations suivantes :

$$\alpha = \ln \left(f^{(0)} \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|}{4\pi \sinh \|\boldsymbol{\beta}\|} \right), \quad (1.59a)$$

$$\boldsymbol{\beta} = \|\boldsymbol{\beta}\| \mathbf{d}, \quad \|\boldsymbol{\beta}\| = z^{-1}(u). \quad (1.59b)$$

La fonction z^{-1} est la fonction réciproque de $z : x \rightarrow \coth x - \frac{1}{x}$. Par ailleurs, le troisième moment de la fonction de distribution M1 est

$$\mathbf{f}^{(2)} = f^{(0)} \frac{u}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \mathbf{I}_3 + f^{(0)} \left(1 - 3 \frac{u}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \right) \frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \otimes \frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|}. \quad (1.60)$$

Démonstration : La preuve de cette proposition est similaire à celle de la proposition 1.2.10 (dans le cadre du transport linéaire). Le détail du calcul des moments de la fonction de distribution M1 est dans l'annexe E. ■

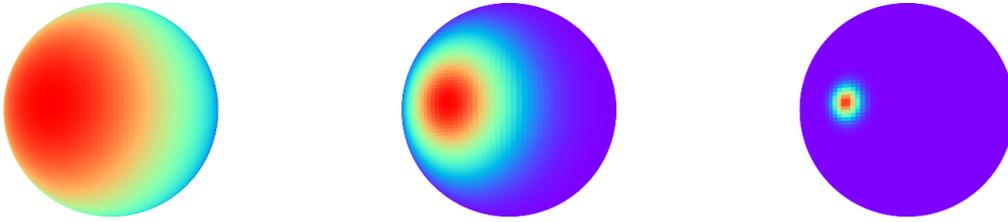


FIGURE 1.3 – Fonctions de distribution M1 normalisées sur la sphère pour $u = 0, 1, u = 0, 8$ et $u = 0, 99$ dans une même direction \mathbf{d} .

La hiérarchie de moments (1.53) de l'équation cinétique, fermée avec la relation (1.60), est le modèle aux moments M1 pour le transport électronique. Des exemples de fonctions de distributions M1 sont représentées sur la figure 1.3. Le modèle sous forme développée est

$$\begin{cases} \partial_t f^{(0)} + \frac{v}{\eta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{f}^{(1)} &= \nu (M_0[\mathbf{U}] - f^{(0)}) \\ \partial_t \mathbf{f}^{(1)} + \frac{v}{\eta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{f}^{(2)} &= -\nu \mathbf{f}^{(1)} \end{cases}, \quad (1.61)$$

où la fréquence de collision est $\nu(\mathbf{U}) = \frac{\sigma(\mathbf{U})}{\epsilon \eta}$ (l'opacité σ est définie par (1.43)), où la maxwellienne réduite est

$$M_0[\mathbf{U}](v) = 4\pi \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-\frac{v^2}{2T}},$$

et où la température est $T = \frac{2q}{3\rho}$. Les variables macroscopiques sont reliées aux variables M1 de la manière suivante :

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho \\ q \end{pmatrix} = \int_{\mathbb{R}_+} \boldsymbol{\Psi}(v) f^{(0)}(v) v^2 dv.$$

Enfin le dernier flux $\mathbf{f}^{(2)}$ est donné par (1.60). Dans le cas où le premier moment $f^{(0)}$ est nul, il est possible de poser $\hat{f} = 0$ et donc $\mathbf{f}^{(2)} = 0$. Tout comme pour le transport linéaire, il est possible de montrer que le modèle ainsi défini est hyperbolique, contient la limite de diffusion et assure la décroissance de l'entropie. Montrons ce deuxième point.

Proposition 1.3.8 (*Limite de diffusion*)

A l'échelle de la diffusion ($\eta = \epsilon$), lorsque ϵ tend vers 0, le vecteur des variables macroscopiques \mathbf{W} satisfait le système de diffusion (1.47) à l'ordre 1 en ϵ .

Démonstration : La preuve de ce résultat est sensiblement similaire à celle de la proposition 1.2.17. Tout d'abord la deuxième équation du modèle M1 permet d'écrire que :

$$u = \frac{\epsilon}{f^{(0)}\sigma} \|\eta \partial_t \mathbf{f}^{(1)} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{f}^{(2)}\|.$$

Si les différentes dérivées et l'opacité restent bornées par rapport à ϵ alors u tend vers 0 lorsque ϵ tend vers 0. De ce fait, il est possible d'exprimer la dérivée en temps de $f^{(0)}$ en fonction de $\mathbf{f}^{(2)}$ (en remplaçant $\mathbf{f}^{(1)}$ dans la première équation du modèle par son expression donnée par la deuxième) :

$$\partial_t f^{(0)} = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{1}{\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot v^2 \mathbf{f}^{(2)} + \nu \left(M_0[\mathbf{U}] - f^{(0)} \right) + \mathcal{O}(\epsilon).$$

Lorsque u tend vers 0, le flux $\mathbf{f}^{(2)}$ tend vers $\frac{f^{(0)}}{3} \mathbf{I}_3$ (puisque le quotient $\frac{u}{\beta}$ tend vers $\frac{1}{3}$). Par ailleurs, puisque l'opérateur de collision conserve la masse et la quantité de mouvement, en multipliant cette dernière expression par Ψ puis en intégrant sur l'espace des vitesses, on obtient les deux équations scalaires suivantes :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{1}{\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \left(\int_{\mathbb{R}_+} v^2 f^{(0)} v^2 dv \right) + \mathcal{O}(\epsilon) \\ \partial_t q &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \frac{1}{\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \left(\int_{\mathbb{R}_+} \frac{1}{2} v^4 f^{(0)} v^2 dv \right) + \mathcal{O}(\epsilon). \end{aligned}$$

Or, d'après la première équation du modèle, $f^{(0)} = M_0[\mathbf{W}] + \mathcal{O}(\epsilon)$. Ainsi, en utilisant les expressions des moments de la maxwellienne données dans l'annexe D, on retrouve l'expression des flux du système de diffusion. ■

Chapitre 2

Méthodes numériques

Sommaire

2.1	Introduction	34
2.2	Le cas hyperbolique unidimensionnel	34
2.2.1	Advection linéaire scalaire	35
2.2.2	Système d'advection linéaire avec terme source	45
2.2.3	Équations hyperboliques non linéaires	46
2.3	Le cas parabolique unidimensionnel	49
2.3.1	Équation de diffusion	49
2.3.2	Systèmes de diffusion	52
2.4	Extensions bidimensionnelles	53
2.4.1	Maillage cartésien	53
2.4.2	Maillage non structuré	56
2.5	Les schémas préservant l'asymptotique	62
2.5.1	Contexte et principe général	62
2.5.2	HLL modifié	63

Résumé

Dans ce chapitre, la méthode des volumes finis est brièvement présentée pour résoudre des problèmes en lien avec la physique des plasmas. Pour ce faire, différentes équations aux dérivées partielles, hyperboliques et paraboliques, sont étudiées. Plusieurs schémas et extensions classiques sont proposés pour ces équations. Par ailleurs, certains problèmes numériques relatifs à la dimension 2 et à la préservation de l'asymptotique sont abordés.

2.1 Introduction

Dans le chapitre 1, des modèles de la physique des plasmas ont été présentés. D'un point de vue pratique, il est pertinent de pouvoir les résoudre afin de prédire l'évolution de systèmes complexes dans le temps. Cela permet entre autres d'affiner la compréhension de phénomènes physiques, de comprendre des systèmes complexes ou encore de dimensionner et concevoir des dispositifs.

Les équations cinétiques (1.4-1.40), les modèles aux moments (les hiérarchies (1.14-1.53) fermés avec la fonction de distribution P_n ou M_n) ou les équations des limites fluides (1.9-1.47) sont des équations aux dérivées partielles (EDP). D'un point de vue mathématique, celles-ci décrivent l'évolution de fonctions dans l'espace et dans le temps à travers des opérateurs différentiels. Dans la plupart des cas, aucune solution analytique n'est connue pour ces équations. Autrement dit, la solution du problème ne peut *a priori* pas être exprimée simplement. De ce fait, des méthodes numériques ont été développées pour résoudre ces équations de manière approchée. La mémoire des ordinateurs étant finie, les grandeurs représentables le sont forcément aussi ; ces méthodes font donc appel à une forme de discrétisation pour représenter les grandeurs continues par des quantités discrètes manipulables numériquement. Dans la plupart des cas, la discrétisation consiste en un partitionnement de l'espace et un découpage du temps en différents instants. Les quantités discrètes sont alors les grandeurs aux noeuds ou au centre des mailles formée par le partitionnement à un instant donné. Un schéma numérique est un algorithme décrivant l'évolution de ces quantités entre chaque pas de temps. Pour être efficace, cette méthode doit être consistante avec le modèle continu, c'est-à-dire que plus la discrétisation est fine, plus l'erreur engendrée par le schéma doit être faible. Cette propriété est essentielle pour garantir une résolution correcte du problème. La précision de la méthode ainsi que sa capacité à converger rapidement vers la solution exacte sont aussi des critères importants.

Plusieurs méthodes générales existent pour construire ces schémas. Une première approche est celle des différences finies : celle-ci consiste à fournir une approximation des opérateurs différentiels aux noeuds des mailles. Une autre méthode usuelle est celle des éléments finis et repose sur une approximation des espaces de fonction par des espaces de dimension finie dans la formulation variationnelle des EDP. La méthode utilisée dans cette thèse est celle des volumes finis et consiste quant à elle à construire une approximation des flux entre les mailles. Le développement de cette dernière méthode diffère sensiblement en fonction de la classe de l'EDP considérée. Dans les sections suivantes, plusieurs schémas volumes finis de base sont rappelés pour des équations élémentaires de différents types. Les propriétés de ceux-ci ainsi que certains problèmes numériques sont discutés.

2.2 Le cas hyperbolique unidimensionnel

D'une manière générale, les équations hyperboliques forment une classe d'équations aux dérivées partielles représentant des phénomènes de propagation dans l'espace au cours du temps. Celles-ci permettent de décrire une grande variété de phénomènes physiques dans lesquelles des quantités physiques sont transportées à vitesse finie. Entre autres, cette propriété fondamentale permet de les distinguer des modèles paraboliques et elliptiques dans lesquels l'information physique est propagée à vitesse infinie. Autrement dit, dans un modèle hyperbolique, une perturbation locale de l'état du système a une répercussion différée à distance de celle-ci. L'information est propagée de manière ondulatoire le long des lignes caractéristiques de l'EDP.

Ces modèles apparaissent dans de nombreux domaines physiques, en particulier en mécanique des fluides, mécanique des solides et en physique des plasmas.

2.2.1 Advection linéaire scalaire

L'équation hyperbolique la plus élémentaire est celle de l'advection linéaire scalaire. Le mécanisme de l'advection est celui du transport passif d'une unique quantité physique par le mouvement du milieu environnant. La propagation se fait alors sans rétroaction sur celui-ci. Cette quantité peut par exemple être la concentration d'un élément chimique dans un fluide l'entraînant dans son mouvement.

2.2.1.1 Construction

Dans un premier temps, le domaine spatial est restreint à un ouvert \mathcal{D} de \mathbb{R} . La quantité physique est représentée par une fonction scalaire notée $u : (t, x) \mapsto u(t, x)$ du temps $t \in \mathbb{R}_+$ et de l'espace $x \in \mathcal{D}$. Celle-ci est advectée à la vitesse $v \in \mathbb{R}^*$. Une manière courante d'établir l'équation d'advection linéaire est d'introduire la notion de dérivée particulière. Lors d'une durée infinitésimale Δt , une particule est transportée de sa position x vers sa nouvelle position $x + v\Delta t$ (voir figure 2.1). Tout d'abord, le taux d'accroissement de u entre (t, x) et

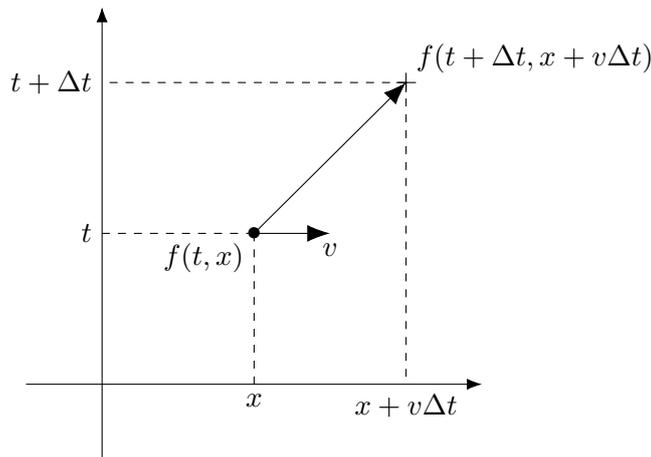


FIGURE 2.1 – Diagramme espace-temps représentant l'advection d'une quantité scalaire

$(t + \Delta t, x + v\Delta t)$ s'exprime grâce à un développement de Taylor :

$$\forall (t, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathcal{D}, \frac{u(t + \Delta t, x + v\Delta t) - u(t, x)}{\Delta t} = \frac{\partial u}{\partial t}(t, x) + v \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) + \mathcal{O}(\Delta t).$$

La limite de ce taux lorsque Δt tend vers 0 est la dérivée particulière de u et est notée $\frac{Du}{Dt}$:

$$\frac{Du}{Dt} = \partial_t u + v \partial_x u.$$

Dans le cas de l'advection linéaire, la quantité physique est conservée lors du transport dans le milieu. La dérivée particulière est donc nulle et l'équation d'advection linéaire est trivialement

$$\partial_t u + v \partial_x u = 0. \quad (2.1)$$

Définition 2.2.1 (*Problème de Cauchy*)

Le problème qui consiste à chercher une solution de l'EDP qui vérifie une certaine donnée initiale u_0 est le problème de Cauchy de l'équation cinétique. Celui-ci s'écrit alors sous la

forme :

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x f(u) = 0 \\ u(0, x) = u_0(x), \quad x \in \mathcal{D} \end{cases}, \quad (2.2)$$

où $f(u) = vu$ est le flux physique de l'équation.

Proposition 2.2.1 (Méthodes des caractéristiques)

Supposons $\mathcal{D} = \mathbb{R}$ et soit u_0 une fonction de classe C^1 sur \mathcal{D} . La solution générale du problème de Cauchy (2.2) est

$$\forall (t, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}, \quad u(t, x) = u_0(x - vt). \quad (2.3)$$

Démonstration : Ce résultat peut être démontré grâce à la méthode des caractéristiques. D'un point de vue général, cette méthode consiste à résoudre l'EDP à partir des lignes caractéristiques de l'équation, le long desquelles la solution vérifie une équation aux dérivées ordinaires (EDO). Soit $s \mapsto (t(s), x(s))$ une courbe caractéristique paramétrée par $s \in \mathbb{R}_+$. La dérivée de $u(t(\cdot), x(\cdot))$ le long de cette courbe est

$$\forall s \in \mathbb{R}_+, \quad \frac{du(t(\cdot), x(\cdot))}{ds} = \frac{dt}{ds} \partial_t u + \frac{dx}{ds} \partial_x u.$$

Lorsque $\frac{dt}{ds} = 1$ et $\frac{dx}{ds} = v$, $u(t(\cdot), x(\cdot))$ est solution de l'équation et u est constant le long des lignes. La courbe caractéristique est choisie telle que son pied soit en $t = 0$, ainsi :

$$\forall s \in \mathbb{R}_+, \quad \begin{cases} t(s) = s, \\ x(s) = vt(s) + x(0) \end{cases}.$$

Il reste désormais à déterminer la valeur de la constante le long de la caractéristique à partir de la donnée initiale :

$$\begin{aligned} \frac{du}{ds} = 0 &\Leftrightarrow \forall s \in \mathbb{R}_+, \quad u(t(s), x(s)) = u(t(0), x(0)) \\ &= u_0(x(0)) \\ &= u_0(x(s) - vt(s)). \end{aligned}$$

La valeur de la solution en (t, x) est celle de la donnée initiale au pied de la caractéristique, ce qui permet finalement d'obtenir le résultat voulu. ■

Dans les cas pratiques, le domaine est borné et se limite à un segment $[x_G, x_D]$. Il est alors nécessaire de fournir (en plus de la donnée initiale), des conditions aux limites représentatives des phénomènes aux bords du domaine. Par exemple, la condition de Dirichlet consiste à imposer les quantités entrantes dans le domaine. En fonction du signe de la vitesse, celle-ci est imposée à gauche ou à droite de celui-ci, telle que :

$$\forall t \geq 0, \quad u(t, x_{GD}) = u_{GD}(t),$$

où u_{GD} sont les quantités imposées aux bords gauche et droit. Dans le cas d'un domaine borné, la solution générale de l'équation d'advection fait désormais intervenir ces quantités.

Proposition 2.2.2 (Solution forte)

Supposons $\mathcal{D} = [x_G, x_D]$ (avec $x_G < x_D$) et $v > 0$. Soient u_0 une fonction de classe C^1 sur \mathcal{D} et u_G une fonction de classe C^1 sur \mathbb{R}_+ . Si la donnée initiale est compatible avec la condition de bord ($u_0(x_G) = u_G(0)$ et $-vu'_0(x_G) = u'_G(0)$), alors la solution forte de l'équation d'advection linéaire (2.1) est

$$\forall (t, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}, u(t, x) = \begin{cases} u_0(x - vt) & \text{si } x - vt \in [x_G, x_D] \\ u_G(t - \frac{x - x_G}{v}) & \text{si } x - vt < x_G \end{cases}. \quad (2.4)$$

Démonstration : La solution de l'équation dépend de la position du pied de la caractéristique. Si celui-ci se trouve dans le domaine alors le résultat précédent sur domaine infini est toujours valable. Dans le cas contraire où la caractéristique intersecte le bord gauche alors la solution dépend de la donnée à cet endroit. Le point d'intersection dans l'espace temps est alors $(x_G, t - \frac{x - x_G}{v})$. ■

La solution exacte du problème d'advection est représentée sur la figure (2.2) dans le cas particulier d'une vitesse positive, d'une donnée initiale sinusoïdale et d'une condition au bord gauche stationnaire. Il apparaît alors bien que prescrire les quantités sortantes du domaine sur le bord droit n'est pas compatible avec le problème physique.

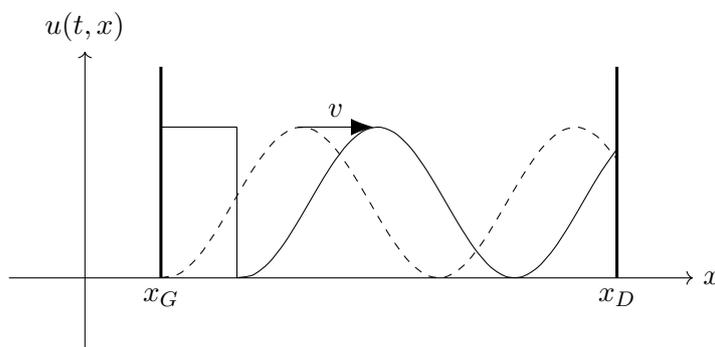


FIGURE 2.2 – Advection d'une donnée initiale sinusoïdale pour une vitesse $v > 0$ et une condition de bord u_G stationnaire

Remarque 2.2.1 (*Régularité des solutions*)

Dans la figure 2.2, la donnée de bord n'est pas compatible avec la donnée initiale ce qui donne lieu à une solution présentant une discontinuité. La formulation de la solution de l'équation (2.4) prend toujours du sens si celle-ci n'est pas dérivable ni même continue. Cependant, l'écriture de l'EDP nécessite que la solution soit C^1 . Pour donner du sens à ces solutions moins régulières, il est nécessaire de les chercher au sens des distributions (solutions faibles) dans un certain cadre fonctionnel qui ne sera pas décrit ici (voir [45] pour plus de détails).

Afin de construire des méthodes numériques, il est pertinent de s'intéresser à la solution locale de l'EDP pour une donnée initiale représentant un saut. Ce saut traduit les discontinuités qui apparaissent en manipulant les grandeurs discrètes.

Définition 2.2.2 (*Problème de Riemann*)

Soit $(u_G, u_D) \in \mathbb{R}^2$ avec $u_G \neq u_D$, le problème de Riemann de l'EDP est

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x f(u) = 0 \\ u(0, x) = \begin{cases} u_G & \text{si } x < 0 \\ u_D & \text{si } x > 0 \end{cases} \end{cases}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (2.5)$$

Proposition 2.2.3

Soit $v > 0$, la solution (au sens faible) du problème de Riemann (2.5) est

$$\forall (t, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}, u(t, x) = \mathcal{R}\left(\frac{x}{t}, u_G, u_D\right) = \begin{cases} u_G & \text{si } \frac{x}{t} > v \\ u_D & \text{si } \frac{x}{t} < v \end{cases} . \quad (2.6)$$

Dans ce cas, la solution du problème de Riemann consiste simplement en deux régions délimitées par la droite caractéristique d'équation $t = \frac{x}{v}$ (voir figure 2.3). La discontinuité est alors advectée à la vitesse v .

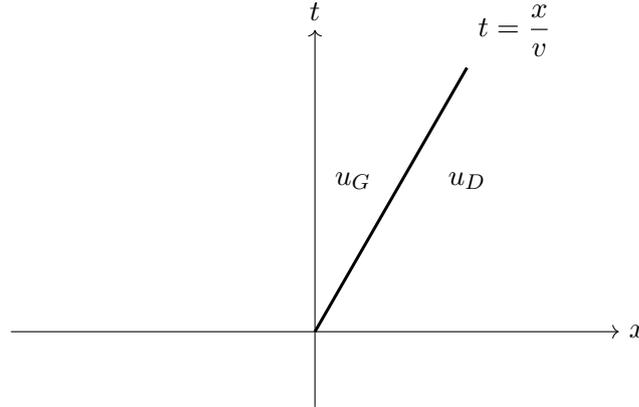


FIGURE 2.3 – Solution du problème de Riemann pour $v > 0$

2.2.1.2 Résolution numérique

Bien que la solution de l'équation d'advection linéaire soit connue, la résolution de celle-ci permet d'introduire le formalisme et les méthodes numériques élémentaires qui serviront pour les problèmes plus complexes présentés plus tard dans cette thèse.

Maillage

Tout d'abord, chaque méthode numérique requiert l'introduction d'une discrétisation du domaine spatial \mathcal{D} . Cette étape est primordiale pour sortir du cadre continu en introduisant des quantités manipulables numériquement. Dans le cas des volumes finis, la discrétisation consiste en un découpage de $\mathcal{D} = [x_G, x_D]$ en i_{max} volumes de contrôle de centre x_i et de taille Δx_i (voir figure 2.4). De même, le temps est lui aussi discrétisé en un ensemble d'instant (t_n) avec $n \in \llbracket 0, n_{max} - 1 \rrbracket$.

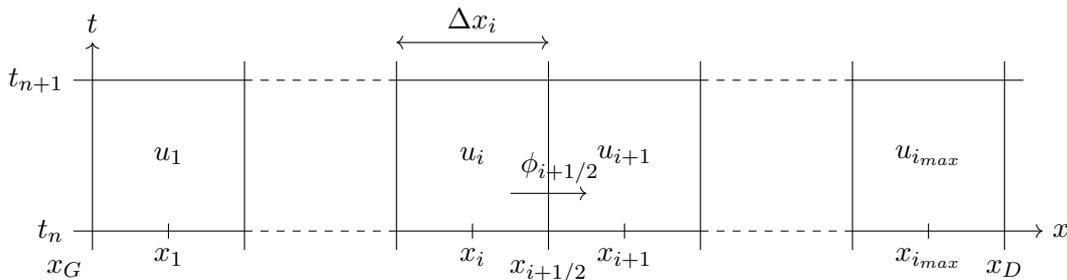


FIGURE 2.4 – Discrétisation du domaine en volumes finis

Formulation volumes finis

L'idée principale de la méthode des volumes finis est de décrire l'évolution de la valeur moyenne de u dans les volumes de contrôle $\mathcal{C}_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ en donnant une approximation des flux entrants et sortants de part et d'autre de la maille, entre deux instants consécutifs. La valeur moyenne de u dans la maille i à l'instant t_n est notée u_i^n et vaut

$$u_i^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\mathcal{C}_i} u(t_n, x) dx. \quad (2.7)$$

Par ailleurs, le flux entre la maille i et la maille $i + 1$ et entre les instants t_n et t_{n+1} est

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u(t, x_{i+1/2})) dt. \quad (2.8)$$

Pour écrire la formulation volumes finis, l'équation d'advection (2.1) est intégrée en espace sur le volume de contrôle et entre deux instants pour faire apparaître les grandeurs moyennées :

$$\int_{\mathcal{C}_i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \partial_t u(t, x) + \partial_x f(u)(t, x) dt dx = 0,$$

ce qui donne en fonction des grandeurs introduites précédemment :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} (\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) = 0. \quad (2.9)$$

Cette formulation exprime la variation de la valeur moyenne dans chaque maille en fonction des flux aux bords de celle-ci. Construire un schéma numérique volumes finis consiste à fournir une approximation du flux $\phi_{i+1/2}$. Ce nouveau flux $\tilde{\phi}_{i+1/2}$, appelé flux numérique, est calculé à partir des valeurs dans les cellules dans un certain stencil (de taille plus ou moins importante) autour de l'interface $x_{i+1/2}$. Si cette approximation ne dépend que des grandeurs au temps t_n alors le schéma est dit explicite et la mise à jour se fait directement d'un point de vue algorithmique. Sinon le schéma est dit implicite et peut nécessiter la résolution d'un système à chaque pas de temps.

Dans le cas le plus simple, le stencil est de taille 2 et le flux numérique est explicite et est une fonction de (u_i^n, u_{i+1}^n) ; $\tilde{\phi}_{i+1/2} := \tilde{\phi}(u_i^n, u_{i+1}^n)$. Un schéma volumes finis doit vérifier deux propriétés principales; la consistance et la conservativité des flux. Ces deux propriétés sont tout d'abord définies.

Définition 2.2.3 (*Consistance*)

Le flux numérique est dit consistant si celui-ci approche correctement le flux physique lorsque le pas de maillage et le pas de temps tendent vers 0. Formellement, cela se traduit par

$$\forall u \in \mathbb{R}, \tilde{\phi}(u, u) = f(u). \quad (2.10)$$

Définition 2.2.4 (*Conservation*)

Le flux numérique est dit conservatif si

$$\forall (u, v) \in \mathbb{R}^2, \tilde{\phi}(u, v) + \tilde{\phi}(v, u) = 0. \quad (2.11)$$

Ces deux propriétés sont fondamentales. La première assure que le schéma permet bien d'approcher le problème souhaité. La deuxième empêche la création (ou la destruction) globale de masse dans le domaine et traduit au niveau discret la propriété de conservation. Ces définitions s'étendent pour des flux numériques calculés sur des stencils plus grands [46].

Proposition 2.2.4

Soient $\bar{u}^n = \frac{1}{x_D - x_G} \sum_i u_i^n \Delta x_i$ la moyenne discrète de u dans le domaine et $\tilde{\phi}$ un flux numérique conservatif. Dans le cas de conditions aux bords périodiques ($\phi_{1/2} = \phi_{i_{max}+1/2}$), cette quantité est conservée et

$$\forall n \in \llbracket 0, n_{max} - 1 \rrbracket, \bar{u}^n = \bar{u}^0. \quad (2.12)$$

Démonstration : La formulation volume finis (2.9) permet d'écrire

$$\begin{aligned} \bar{u}^{n+1} &= \bar{u}^n + \frac{\Delta t}{x_D - x_G} \sum_i \tilde{\phi}_{i+1/2} - \tilde{\phi}_{i-1/2} \\ &= \bar{u}^n + \frac{\Delta t}{x_D - x_G} (\tilde{\phi}_{i_{max}+1/2} - \tilde{\phi}_{1/2}) \\ &= \bar{u}^n. \end{aligned} \quad \blacksquare$$

Pour la suite, il est important de préciser la notion d'ordre du schéma. L'ordre de convergence permet d'évaluer l'évolution de l'erreur commise sur la solution numérique en fonction du pas d'espace. En revanche l'ordre ne quantifie l'erreur de manière absolue. Des schémas d'un même ordre peuvent être plus ou moins précis.

Définition 2.2.5 (Ordre de convergence)

Soit (u_i^n) la solution à l'instant t_n obtenue à partir d'un schéma numérique. Les ordres de convergence $(\alpha, \beta) \in \mathbb{N}^2$ en espace et en temps pour la norme L^2 discrète sont tels que l'erreur quadratique du schéma vérifie :

$$\sqrt{\sum_i (u(t_n, x_i) - u_i^n)^2 \Delta x_i} = \mathcal{O}(\Delta x^\alpha) + \mathcal{O}(\Delta t^\beta), \quad (2.13)$$

où $u(t_n, \cdot)$ est la solution exacte à l'instant t_n donnée par (2.4).

La méthode de Godunov

Le premier schéma numérique que nous choisissons d'introduire est celui de Godunov. Dans sa formulation la plus simple, il consiste à utiliser la solution des problèmes de Riemann locaux à chaque interface $x_{i+1/2}$ pour approcher le flux. La construction du schéma est rappelée telle qu'elle est exposée dans [46].

Définition 2.2.6 (Schéma de Godunov)

Le flux numérique du schéma de Godunov est

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_{i+1/2} &:= \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\mathcal{R}(0, u_i^n, u_{i+1}^n)) dt \\ &= \begin{cases} v u_i^n & \text{si } v > 0 \\ v u_{i+1}^n & \text{si } v < 0 \end{cases}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

où \mathcal{R} est la solution du problème de Riemann local (2.6).

Dans le contexte de l'advection linéaire, le schéma de Godunov s'apparente tout simplement au schéma décentré amont (schéma *upwind*). Il est possible de démontrer que celui-ci est conservatif et consistant et que de plus l'erreur du schéma est d'ordre $\mathcal{O}(\Delta t)$ en temps et $\mathcal{O}(\Delta x)$ en espace. Afin d'utiliser ce schéma tel qu'il est défini, il est important que les problèmes de Riemann n'interagissent pas entre eux. Autrement dit, les quantités ne peuvent pas

être transportées de plus d'une maille entière pendant un pas de temps. Cette condition se traduit par une relation entre le pas du maillage, le pas de temps et la vitesse d'advection.

Proposition 2.2.5 (CFL)

Le schéma de Godunov pour (2.1) est conservatif et consistant. Par ailleurs, il est L^∞ stable et donc convergent sous la condition CFL (Courant–Friedrichs–Lewy) de stabilité :

$$|v| \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1, \quad (2.15)$$

avec $\Delta x = \min_i \Delta x_i$.

Démonstration : On se contente de prouver ici que le schéma est L^∞ stable sous la condition CFL. La non superposition des problèmes de Riemann se traduit algébriquement en analysant le schéma sous forme développée. Supposons $v > 0$, la formulation volumes finis (2.2.1.2) permet d'écrire la formule de mise à jour algorithmique :

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= u_i^n - v \frac{\Delta t}{\Delta x_i} (u_i^n - u_{i-1}^n) \\ u_i^{n+1} &= \left(1 - v \frac{\Delta t}{\Delta x_i}\right) u_i^n + v \frac{\Delta t}{\Delta x_i} u_{i-1}^n. \end{aligned}$$

La norme infinie de (u_i^n) décroît si u_i^{n+1} est une combinaison convexe de (u_i^n, u_{i-1}^n) et donc si

$$1 - |v| \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \geq 0.$$

Cette condition doit être vérifiée dans toutes les mailles, ce qui permet d'obtenir le résultat voulu. ■

Le schéma de Godunov est d'ordre 1, cela signifie que si le pas d'espace est divisé par 2 alors l'erreur l'est aussi. D'une manière générale, l'ordre est lié au stencil. Pour augmenter l'ordre d'un schéma, il est souvent nécessaire d'utiliser plus de mailles pour calculer le flux numérique. Pour ce faire, des reconstructions polynomiales peuvent être employées dans le solveur de Riemann. Le schéma de Godunov est alors défini à partir de la solution de ce nouveau problème. Construisons le schéma d'ordre 2. Tout d'abord, les quantités discrètes (u_i^n) sont reconstruites par des fonctions $\tilde{u}_i^n(\cdot)$ affines sur chacune des mailles :

$$\forall x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}], \quad \tilde{u}_i^n(x) = u_i^n + \sigma_i^n(x - x_i), \quad (2.16)$$

où σ_i^n est une pente calculée à partir de $(u_i^n, u_{i\pm 1}^n)$ qui sera précisée ultérieurement. Le problème de Riemann associé à cette reconstruction est

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x f(u) = 0 \\ u(0, x) = \begin{cases} \tilde{u}_i^n(x) & \text{si } x < x_{i+1/2} \\ \tilde{u}_{i+1}^n(x) & \text{si } x > x_{i+1/2} \end{cases} \end{cases}, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (2.17)$$

La solution de ce nouveau problème de Riemann, notée $\tilde{\mathcal{R}}_{i+1/2}(t, x)$, est alors employée pour définir le schéma de Godunov d'ordre 2. En effet, en utilisant des reconstructions d'ordre 1, l'erreur commise sur le flux est d'ordre 1 et donc le schéma est globalement d'ordre 2.

Proposition 2.2.6

Le flux numérique du schéma de Godunov d'ordre 2 est

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \begin{cases} v u_i^n + \frac{v}{2} \sigma_i^n (\Delta x - v \Delta t) & \text{si } v > 0 \\ v u_{i+1}^n - \frac{v}{2} \sigma_{i+1}^n (\Delta x + v \Delta t) & \text{si } v < 0 \end{cases}. \quad (2.18)$$

Démonstration : Montrons ce résultat dans le cas $v > 0$. Le flux numérique à travers l'interface est

$$\begin{aligned}
 \tilde{\phi}_{i+1/2} &= \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{\mathcal{R}}_{i+1/2}(t - t_n, x)) dt \\
 &= \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(\tilde{\mathcal{R}}_{i+1/2}(0, x_{i+1/2} - v(t - t_n))) dt \\
 &= vu_i^n + \frac{v}{2} \sigma_i^n \left(\Delta x - \frac{2}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v(t - t_n) dt \right) \\
 &= vu_i^n + \frac{v}{2} \sigma_i^n (\Delta x - v\Delta t).
 \end{aligned}$$

■

L'extension à l'ordre 2 se traduit par deux termes supplémentaires dans le schéma numérique d'ordre 1 en espace en temps. Les négliger permet de retrouver le schéma de Godunov classique.

Il reste désormais à déterminer la valeur des pentes. A l'aide de formules de différences finies élémentaires, il est possible d'en définir trois différentes autour de la maille i :

$$\sigma_i^{(1)} = \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x}, \quad (2.19a)$$

$$\sigma_i^{(2)} = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x}, \quad (2.19b)$$

$$\sigma_i^{(3)} = \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}. \quad (2.19c)$$

Le pas d'espace est ici supposé constant pour simplifier les écritures. Formellement, le choix de la pente est indifférent pour obtenir l'ordre 2. Néanmoins les utiliser telles quelles donne lieu à un schéma numérique potentiellement instable. En effet, le théorème de Godunov établit que les schémas linéaires ne produisant pas de nouveaux extremums (les schémas monotones) ne peuvent être que d'ordre au plus 1. Ainsi, il est nécessaire d'introduire une non-linéarité dans le schéma pour augmenter l'ordre tout en conservant cette propriété.

Pour mesurer l'apparition de nouveaux extremums et donc d'oscillations, une quantité importante est celle de variation totale (VT). Qualitativement, cette grandeur propose une mesure des variations de (u_i^n) à un instant donné.

Définition 2.2.7 (Variation totale)

La variation totale de (u_i^n) est

$$VT(u^n) = \sum_i |u_{i+1}^n - u_i^n|. \quad (2.20)$$

La variation totale d'un schéma instable et oscillant augmente à chaque pas de temps. Ainsi, il semble judicieux de proposer une méthode qui assure la décroissance de cette quantité. Le schéma d'ordre 1 étant stable et celui d'ordre 2 instable, il paraît pertinent d'abaisser le poids de la partie affine de la reconstruction (qui permet d'obtenir l'ordre supérieur) lorsque des oscillations apparaissent. Une manière de procéder est de limiter les pentes à l'aide d'une fonction non-linéaire, appelée limiteur de pente, en fonction du gradient local. Les limiteurs

de pente les plus usuels sont

$$\text{MinMod ([53]) : } \sigma_i^n = \text{minmod}(\sigma_i^{(1)}, \sigma_i^{(2)}), \quad (2.21a)$$

$$\text{Van Leer ([57]) : } \sigma_i^n = (\text{sgn}(\sigma_i^{(1)}) + \text{sgn}(\sigma_i^{(2)})) \frac{|\sigma_i^{(1)}| |\sigma_i^{(2)}|}{|\sigma_i^{(1)}| + |\sigma_i^{(2)}|}, \quad (2.21b)$$

$$\text{MC}^1([46]) : \sigma_i^n = \text{minmod}(2\sigma_i^{(1)}, 2\sigma_i^{(2)}, \sigma_i^{(3)}), \quad (2.21c)$$

$$\text{Superbee ([53]) : } \sigma_i^n = \text{maxmod}(\text{minmod}(2\sigma_i^{(1)}, \sigma_i^{(2)}), \text{minmod}(\sigma_i^{(1)}, 2\sigma_i^{(2)})). \quad (2.21d)$$

La fonction minmod (respectivement maxmod) retourne le plus petit (respectivement le plus grand) de ses arguments en valeur absolue s'ils sont tous du même signe et 0 sinon :

$$\forall (x, y) \in \mathbb{R}^2, \text{ minmod}(x, y) = \begin{cases} x & \text{si } |x| \leq |y| \text{ et } xy > 0 \\ y & \text{si } |y| \leq |x| \text{ et } xy > 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

En employant la pente limitée avec un de ces limiteurs dans la reconstruction (2.16), il est possible de montrer que le schéma assure la décroissance de la variation totale à chaque pas de temps et empêche donc l'apparition d'oscillations. Il doit cependant être noté que cet abaissement du poids de la reconstruction détériore la qualité de la solution en présence de discontinuités. Ainsi, l'ordre 2 de convergence n'est formellement obtenu que pour des données régulières. Le reste du temps, celui-ci est abaissé.

Conditions aux limites

La méthode la plus simple pour construire des conditions aux limites de Dirichlet est d'utiliser une maille fantôme. Celle-ci consiste tout simplement à introduire une maille à gauche ou à droite du domaine (en fonction du signe de la vitesse) qui contient une donnée représentative de ce qui est imposé au bord. Par exemple à gauche, cette maille est de centre x_0 et de taille Δx_1 . Une première approximation consiste à poser simplement $u_0^n = u_G(t_n)$. Néanmoins, il est plus précis d'utiliser une extrapolation comme

$$u_0^n = 2u_G(t_n) - u_1^n,$$

afin de bien imposer la valeur au niveau du bord et non pas dans la maille fantôme.

Cas de test élémentaires

A titre d'illustration, le schéma de Godunov d'ordre 1 ainsi que le schéma de Godunov d'ordre 2 avec les différents limiteurs sont comparés sur deux cas de test élémentaires sur les figures 2.5 et 2.6. Ceux-ci consistent en l'advection d'un signal sinusoïdal et d'un signal créneau avec des données de bord périodique pour modéliser un domaine infini ($\phi_{i_{max}+1/2} = \phi_{1/2}$). Le schéma d'ordre 1 génère beaucoup de diffusion numérique, ce qui se traduit par une baisse de l'amplitude de la donnée initiale dans le premier cas de test et par une forte régularisation de la discontinuité dans le deuxième. Le schéma d'ordre 2 permet de significativement atténuer ce phénomène. Le choix du limiteur influence la qualité de la solution et engendre plus ou moins de diffusion numérique dans la solution. Le limiteur MinMod est le plus dissipatif et le limiteur Superbee l'est le moins.

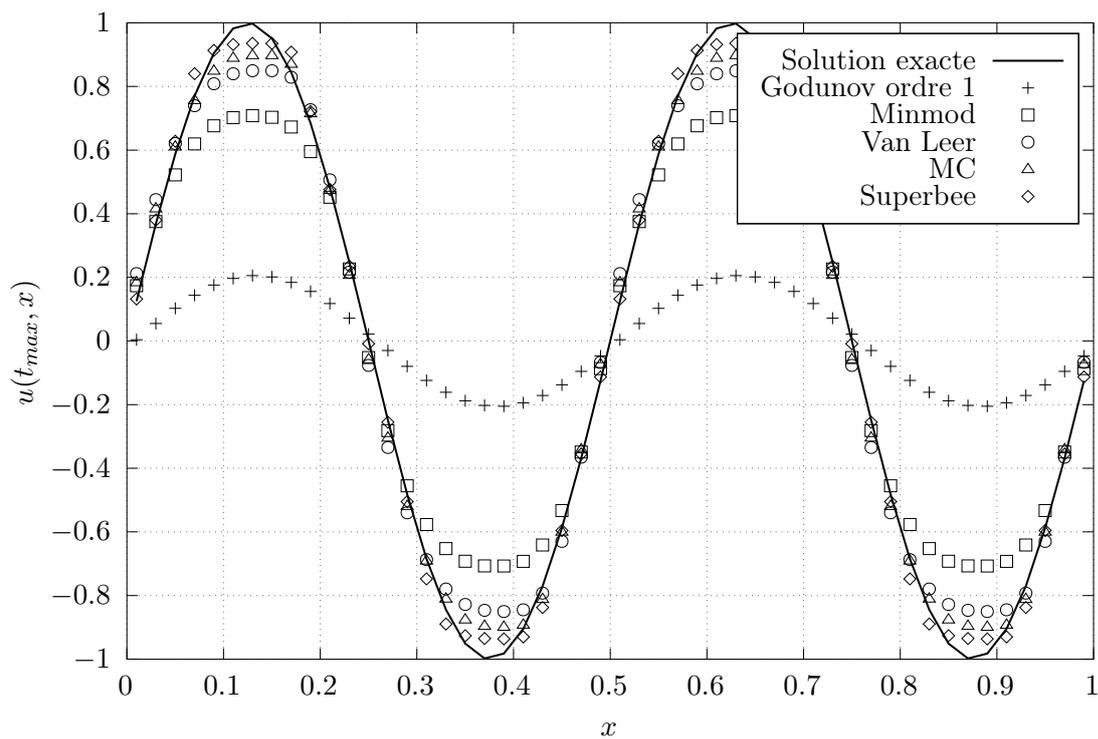


FIGURE 2.5 – Advection d’une sinusoïde sur 20 périodes (50 points)

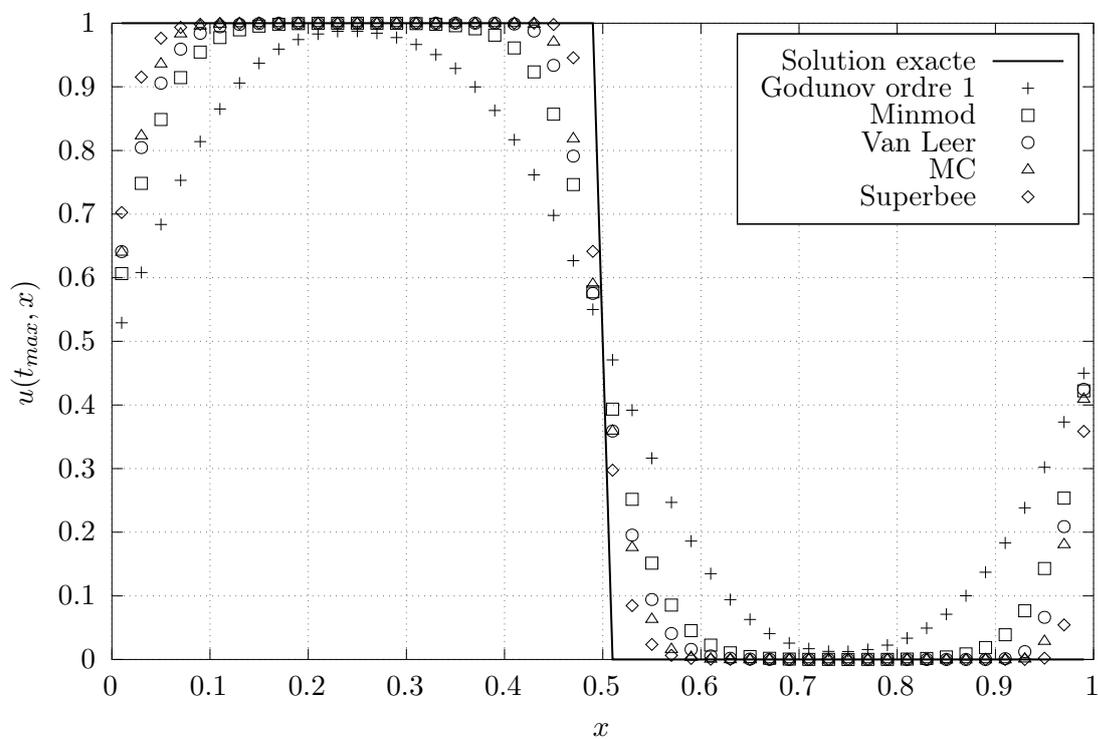


FIGURE 2.6 – Advection d’un signal créneau sur 10 périodes (50 points)

2.2.2 Système d'advection linéaire avec terme source

2.2.2.1 Cadre général

D'une manière générale, un système d'équation d'advection linéaire avec terme source prend la forme suivante :

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x (\mathbf{A}\mathbf{U}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad (2.22)$$

où \mathbf{U} est le vecteur des inconnues, $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$ est la matrice du système et $\mathbf{S}(\mathbf{U})$ son terme source. L'hyperbolicité du système dépend de la forme de la matrice A .

Définition 2.2.8 (*Hyperbolicité*)

Le système (2.22) est hyperbolique si et seulement A est diagonalisable avec des valeurs propres réelles.

Cette propriété sur le système permet donc d'écrire que

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{D}\mathbf{P}^{-1},$$

avec $\mathbf{P} \in GL_n(\mathbb{R})$ une matrice de changement de base et $\mathbf{D} \in M_n(\mathbb{R})$ une matrice diagonale. Le système d'équation (2.22) peut donc être réécrit dans la base diagonale et prend alors la forme suivante :

$$\partial_t \mathbf{V} + \partial_x \mathbf{D}\mathbf{V} = \mathbf{T}(\mathbf{P}\mathbf{V}),$$

où $\mathbf{V} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{U}$ et $\mathbf{T} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{S}$. Dans cette base particulière, le système d'équation est diagonal et correspond à n équations de transport découplées dans la partie transport, dont les vitesses d'advection sont les valeurs propres de la matrice \mathbf{A} . Cette écriture est intéressante d'un point de vue numérique puisqu'elle permet d'utiliser le schéma de Godunov pour chaque équation scalaire indépendante. Il reste désormais à proposer une méthode pour traiter le terme source. Dans la base initiale, la nouvelle formulations volumes finis est

$$\frac{\mathbf{V}_i^{n+1} - \mathbf{V}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} (\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) = \frac{1}{\Delta x_i \Delta t} \int_{\mathcal{C}_i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{T}(\mathbf{P}\mathbf{V}).$$

Une approximation usuelle de cette intégrale consiste à choisir une formule de quadrature des rectangles à gauche pour l'intégrale en temps afin d'obtenir un schéma explicite et une formule du point milieu pour l'intégrale en espace. La formule de mise à jour devient alors :

$$\frac{\mathbf{V}_i^{n+1} - \mathbf{V}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} (\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) = \mathbf{T}(\mathbf{P}\mathbf{V}_i^n). \quad (2.23)$$

Lorsque le terme source reste négligeable devant le transport, le schéma de Godunov peut être utilisé pour construire les flux. Cependant, dans le cas contraire, celui-ci doit être pris en compte dans l'élaboration des flux. Par exemple, un problème de Riemann généralisé (intégrant le terme source) peut être introduit pour obtenir un schéma de type Godunov plus adapté. D'une manière générale, la solution d'un tel problème n'est cependant pas analytique et dépend fortement de la forme du terme source.

2.2.2.2 Exemple : le modèle P1

Dans le cas particulier du modèle $P1$ du transport linéaire (voir proposition 1.2.8), les quantités intervenant dans le système sont

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ j \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A} = \frac{1}{\eta} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{S}(\mathbf{U}) = \nu \begin{pmatrix} 0 \\ -j \end{pmatrix}.$$

Les valeurs propres de la matrice du système sont $\lambda^\pm = \pm \frac{1}{\sqrt{3}\eta}$ (voir proposition 1.2.9) et sa décomposition dans la base des vecteurs propres est

$$\mathbf{A} = \mathbf{PDP}^{-1} = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}\eta} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}\eta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Le terme source étant linéaire, il est aussi écrit dans la base des vecteurs propres pour obtenir un système totalement diagonal :

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{S}\mathbf{P} = \frac{\nu}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Écrit dans cette base, le système se réduit à deux équations d'advections linéaires découplée dans la partie transport. Dans la base diagonale, l'information est transportée aux vitesses $\pm \frac{1}{\sqrt{3}\eta}$. Ainsi, le schéma de Godunov peut être employé pour construire le flux associé à chacune des équations. Un couplage s'opère néanmoins dans le terme source mais n'engendre pas de complexité numérique supplémentaire.

2.2.3 Équations hyperboliques non linéaires

2.2.3.1 Cadre général

Pour les cas d'étude de cette thèse, les systèmes d'équations non linéaires hyperboliques prennent la forme d'un système de loi de conservation :

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad (2.24)$$

où \mathbf{F} est une fonction non linéaire de \mathbf{U} , supposée différentiable. La notion d'hyperbolicité s'étend facilement à ce type de système et porte désormais sur la Jacobienne du système.

Définition 2.2.9 (*Hyperbolicité*)

Le système 2.24 est hyperbolique si et seulement si la jacobienne de $F : \mathbf{J}_F = (\partial_{x_j} F_i)_{i,j} \in M_n(\mathbb{R})$ a des valeurs propres réelles et est diagonalisable.

D'une manière générale, la résolution de ce type de système est plus complexe. Contrairement aux équations d'advection linéaire, il n'est souvent plus possible d'écrire la solution exacte du problème complet ou du problème de Riemann, ce qui complique l'élaboration des schémas. Par ailleurs, la nature même des équations fait que, même en présence de données initiales régulières, la solution peut ne plus l'être au cours du temps. Pour illustrer ce dernier problème, nous choisissons d'évoquer l'équation de Burgers :

$$\partial_t u + \partial_x \frac{u^2}{2} = 0. \quad (2.25)$$

Proposition 2.2.7

Soit u_0 une fonction de classe C^1 sur \mathcal{D} , la solution en temps court de l'équation de Burgers est donnée implicitement par la relation :

$$\exists t_0 \in \mathbb{R}_+, \forall t < t_0, \forall x \in \mathbb{R}, u(t, x) = u_0(x - tu(t, x)) \quad (2.26)$$

Démonstration : Ce résultat peut être prouvé en utilisant la méthode des caractéristiques présentée précédemment pour l'équation d'advection. Soit $s \mapsto (t(s), x(s))$ une courbe caractéristique paramétrée par $s \in \mathbb{R}_+$. La fonction u est constante sur cette courbe si et seulement si

$$\begin{aligned} t(s) &= s, \\ x(s) &= u(t(s), x(s))t(s) + x(0). \end{aligned}$$

Si les caractéristiques ne s'intersectent pas (formation d'un choc) alors il est possible de "remonter" le long de la courbe jusqu'à la donnée initiale :

$$u(t(s), x(s)) = u_0(x(0)),$$

ce qui donne le résultat voulu. ■

Ce résultat permet de comparer la nature des solution en comparaison avec celle de l'advection linéaire. En effet dans ce cas, les caractéristiques de l'équation sont des droites dont la pente est non-constante et de valeur u . En fonction de la donnée initiale, les lignes peuvent se croiser et une discontinuité (un choc) se forme. L'équation de Rankine-Hugoniot permet d'estimer la vitesse de déplacement de ce choc. Au contraire, les caractéristiques peuvent s'éloigner les unes des autres et ainsi former une onde de détente. Au sein de cette zone, la solution n'est plus unique et un critère entropique doit être introduit pour entièrement la déterminer. Dans ces deux cas, il n'est plus possible de donner un sens classique à la solution de cette EDP [6].

2.2.3.2 Exemple : le modèle M1

Le modèle M1 du transport linéaire est un exemple de système d'équations hyperbolique non linéaire. Le loi de conservation (2.24) est donnée par $\mathbf{U} = (\rho \ j)^T$, $\mathbf{S}(\mathbf{U}) = \nu (0 \ -j)^T$ et $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \frac{1}{\eta} (j \ -q)$ (voir section 1.2.4.3). Le système est non linéaire puisque la fermeture du modèle dépend non linéairement de $\mathbf{W} : q = \rho - 2j/\beta$. Il a été mis en évidence dans le chapitre 1 que le système est hyperbolique et que ses valeurs propres λ^\pm sont comprises dans $[-\frac{1}{\eta}, \frac{1}{\eta}]$. Pour ce modèle, il n'est plus possible de donner une solution exacte du problème de Riemann. Par conséquent, la méthode de Godunov originelle n'est plus applicable telle qu'elle. L'idée des solveurs de Riemann approchés est d'utiliser une approximation de la solution du problème de Riemann pour calculer le flux [46].

Tout d'abord, la formulation volumes finis sans traitement particulier du terme source est

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} (\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) = \frac{\sigma}{\epsilon \eta} \mathbf{S}(\mathbf{U}_i^{n+1}), \quad (2.27)$$

avec $\phi_{i+1/2} = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{F}(\mathbf{U})(x_{i+1/2}, t) dt$. Il est ici judicieux de choisir une discrétisation implicite du terme source puisque celui-ci peut être raide. Par ailleurs, ce choix n'engendre pas de complexité algorithmique supplémentaire puisqu'il peut être traité explicitement (de part sa forme simple).

Schéma HLL

Le premier solveur de Riemann approché est le schéma HLL initialement développé par Harten, Lax et Van Leer dans [29]. Dans ce schéma, la structure de la solution du problème de Riemann est approchée à partir des deux valeurs propres extrémales de la Jacobienne. La solution de celui-ci est notée $\tilde{\mathcal{R}}$ et prend alors la forme suivante :

$$\forall (t, x) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}, \tilde{\mathcal{R}}\left(\frac{x}{t}, \mathbf{U}_G, \mathbf{U}_D\right) = \begin{cases} \mathbf{U}_G & \text{si } \frac{x}{t} \leq \lambda^- \\ \mathbf{U}^* & \text{si } \lambda^- \leq \frac{x}{t} \leq \lambda^+ \\ \mathbf{U}_D & \text{si } \frac{x}{t} \geq \lambda^+ \end{cases}. \quad (2.28)$$

Le solveur approché est représenté sur la figure 2.7. La portion du plan entre les deux ondes extrémales est la zone étoilée. Dans celle-ci, la solution du problème exact de Riemann est approchée par \mathbf{U}^* qui est calculé par consistance avec la loi de conservation. Il est alors possible de montrer que le flux numérique est

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = \frac{\lambda_{i+1/2}^+ \mathbf{F}(\mathbf{U}_i^n) - \lambda_{i+1/2}^- \mathbf{F}(\mathbf{U}_{i+1}^n)}{\lambda_{i+1/2}^+ - \lambda_{i+1/2}^-} + \frac{\lambda_{i+1/2}^+ \lambda_{i+1/2}^-}{\lambda_{i+1/2}^+ - \lambda_{i+1/2}^-} (\mathbf{U}_{i+1}^n - \mathbf{U}_i^n). \quad (2.29)$$

Remarque 2.2.2

Dans le cas du modèle $M1$, les valeurs propres de la Jacobienne ne sont pas analytiques et ne s'expriment pas directement en fonction de (\mathbf{U}, β) . Deux choix sont alors possibles ; approcher numériquement les valeurs propres ou utiliser la majoration $|\lambda^\pm| \leq \frac{1}{\eta}$. Cette dernière solution est plus simple mais engendre néanmoins plus de diffusion numérique.

Remarque 2.2.3 (*Stabilité du schéma*)

La condition CFL de stabilité est analogue au cas linéaire mais fait cette fois intervenir les valeurs propres de la Jacobienne :

$$\forall i, \max(|\lambda_{i+1/2}^-|, |\lambda_{i+1/2}^+|) \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1. \quad (2.30)$$

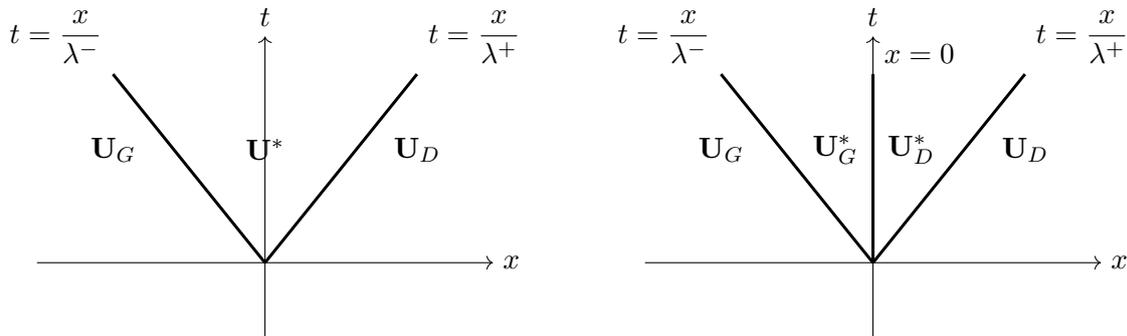


FIGURE 2.7 – Le solveur de Riemann approché HLL classique (à gauche) et modifié pour prendre en compte le terme source (à droite)

Modification du schéma pour traiter le terme source

Proche des régimes diffusifs, le terme source du modèle $M1$ devient raide et peut prédominer devant la partie transport. L'approche naïve présentée précédemment pour traiter les termes sources n'est alors plus applicable. Dans [2], les auteurs ont proposé une méthode générale pour traiter les termes sources de type relaxation au sein même des flux dans le solveur de Riemann approché. Le terme source du modèle $M1$ est bien un opérateur de type relaxation puisqu'il peut s'écrire sous la forme :

$$\mathbf{S}(\mathbf{U}) = (\mathbf{R}(\mathbf{U}) - \mathbf{U}), \quad (2.31)$$

avec $\mathbf{R}(\mathbf{U}) = (\rho \ 0)^T$. La modification proposée consiste à introduire une onde stationnaire supplémentaire dans la zone étoilée et donc de faire apparaître un état supplémentaire (voir

figure 2.7). Les états de la zone étoilée sont construits pour faire intervenir le terme source :

$$\tilde{\mathcal{R}}\left(\frac{x}{t}, \mathbf{U}_G, \mathbf{U}_D\right) = \begin{cases} \mathbf{U}_G & \text{si } \frac{x}{t} \leq \lambda^- \\ \alpha \mathbf{U}^* + (1 - \alpha) \mathbf{R}(\mathbf{U}_G) & \text{si } \min(0, \lambda^-) \leq \frac{x}{t} \leq \min(0, \lambda^+) \\ \alpha \mathbf{U}^* + (1 - \alpha) \mathbf{R}(\mathbf{U}_D) & \text{si } \max(0, \lambda^-) \leq \frac{x}{t} \leq \max(0, \lambda^+) \\ \mathbf{U}_D & \text{si } \frac{x}{t} \geq \lambda^+ \end{cases}, \quad (2.32)$$

où $\alpha \in [0, 1]$ est une fonction permettant d'estimer le poids du terme source dans les flux :

$$\alpha = \frac{\lambda^+ - \lambda^-}{\lambda^+ - \lambda^- + \frac{\sigma}{\epsilon\eta} \Delta x}. \quad (2.33)$$

Cette modification se traduit par un nouveau terme dans la formulation volumes finis qui correspond à une discrétisation du terme source :

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\alpha_{i+1/2} \phi_{i+1/2} - \alpha_{i-1/2} \phi_{i-1/2} \right) = \frac{(1 - \alpha_{i+1/2})}{\Delta x_i} \mathbf{S}_{i+1/2}^- + \frac{(1 - \alpha_{i-1/2})}{\Delta x_i} \mathbf{S}_{i-1/2}^+, \quad (2.34)$$

où les termes sources sont

$$\eta \mathbf{S}_{i+1/2}^- = \min(0, \lambda_{i+1/2}^+) (\mathbf{R}(\mathbf{U}_i^n) - \mathbf{U}_{i+1}^n) - \min(0, \lambda_{i+1/2}^-) (\mathbf{R}(\mathbf{U}_i^n) - \mathbf{U}_i^n) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_i^n), \quad (2.35a)$$

$$\eta \mathbf{S}_{i-1/2}^+ = \max(0, \lambda_{i-1/2}^+) (\mathbf{R}(\mathbf{U}_i^n) - \mathbf{U}_i^n) - \max(0, \lambda_{i-1/2}^-) (\mathbf{R}(\mathbf{U}_i^n) - \mathbf{U}_{i-1}^n) + \mathbf{F}(\mathbf{U}_i^n). \quad (2.35b)$$

Lorsque le terme source est négligeable, α tend vers 1 et le schéma tend vers le schéma HLL sans modification. A l'inverse, quand le terme source est prédominant, α tend vers 0 et les flux de transport disparaissent pour ne laisser qu'une discrétisation du terme source. D'une manière générale, il est possible de montrer que le membre de droite de (2.34) est bien une approximation à l'ordre 1 de $\mathbf{S}(\mathbf{U})$. Cette modification peut être à la base d'un schéma qui préserve l'asymptotique du modèle M1 (voir section 2.5).

2.3 Le cas parabolique unidimensionnel

Les équations paraboliques forment une classe d'équations aux dérivées partielles décrivant de nombreux phénomènes physiques comme par exemple la diffusion ou encore la conduction de la chaleur. Contrairement aux équations hyperboliques, une perturbation locale de la solution affecte l'ensemble du domaine instantanément. La vitesse de propagation de l'information est donc infinie. La construction des schémas pour ces équations diffère des méthodes pour les équations hyperboliques.

2.3.1 Équation de diffusion

L'équation parabolique la plus élémentaire est l'équation de diffusion linéaire. D'une manière générale, cette équation est construite à partir d'une loi de conservation et d'une loi de type Fourier pour le flux. Cette loi décrit à l'échelle macroscopique le comportement moyen des particules à une échelle microscopique qui est supposée beaucoup plus petite que celle du reste du problème. Le changement d'échelle de description engendre l'apparition d'un phénomène macroscopique représentatif de la diffusion.

L'exemple le plus emblématique d'équation de diffusion est l'équation de la chaleur. Dans ce cas le phénomène décrit est celui de l'évolution d'une température sous des effets de conduction de chaleur.

2.3.1.1 Construction

La quantité physique diffusée est notée $u : (t, x) \mapsto u(t, x)$, où $t \in \mathbb{R}_+$ est le temps et $x \in \mathcal{D} = [a, b]$ ($a < b$) est la position. Celle-ci peut représenter une grandeur intensive comme la température du milieu ou une concentration particulière. Les modèles de diffusion étant conservatifs, l'équation parabolique peut s'écrire sous la forme d'une loi de conservation :

$$\partial_t u + \partial_x \phi(u) = 0,$$

où $\phi(u)$ est le flux qui dépend du modèle considéré. D'une manière générale, les modèles de diffusion sont obtenus à partir de lois de type Fourier, qui permettent de relier le flux au gradient local de la quantité. Le flux prend alors la forme générique :

$$\phi(u) = -D(u, \cdot) \partial_x u,$$

où $D(u(t, x), x) \in \mathbb{R}_+^*$ est le coefficient de diffusion. Si celui-ci ne dépend pas de u alors l'équation est dite linéaire, dans le cas contraire elle est non-linéaire. Cette loi exprime que le flux de la quantité est opposé à son gradient. Ce choix a un effet régularisant sur la solution et provoque donc une atténuation progressive des gradients. L'équation de diffusion s'écrit finalement sous la forme :

$$\partial_t u = \partial_x (D(u, \cdot) \partial_x u). \quad (2.36)$$

Afin de définir un problème complet, une donnée initiale ainsi que des conditions aux bords du domaine sont fournies :

$$\begin{cases} u(0, x) = u_0(x), & x \in \mathcal{D} \\ u(t, a) = u_G(t), & t \in \mathbb{R}_+ . \\ u(t, b) = u_D(t), & t \in \mathbb{R}_+ \end{cases}$$

Contrairement aux modèles hyperboliques, des conditions doivent être imposées sur chacun des bords.

2.3.1.2 Résolution numérique

Formulation volumes finis

Dans cette section, la méthode des volumes finis est présentée pour résoudre ce problème de diffusion élémentaire en une dimension d'espace sur un maillage à pas constant. Tout d'abord, les mêmes discrétisations de l'espace et du temps présentées dans la section 2.2.1.2 sont utilisées. Comme précédemment, le point de départ de la méthode consiste à intégrer la loi de conservation (2.36) sur un volume de contrôle \mathcal{C}_i entre deux instants t_n et t_{n+1} :

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) = 0, \quad (2.37)$$

où u_i^n est la moyenne dans le volume de contrôle i à l'instant t_n et $\phi_{i+1/2}$ est le flux entre la maille i et $i + 1$ entre l'instant t_n et t_{n+1} :

$$\phi_{i+1/2} = -\frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} D(u(t, x_{i+1/2})) \partial_x u(t, x_{i+1/2}) dt. \quad (2.38)$$

Schémas centrés

Le schéma de diffusion le plus élémentaire consiste en une discrétisation du gradient par une formule de différences finies d'ordre 2.

Définition 2.3.1

Le flux de diffusion explicite centré à deux points est

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = -D_{i+1/2}^n \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x}, \quad (2.39)$$

où le coefficient de diffusion à l'interface est défini à partir d'une moyenne arithmétique des états à gauche et à droite :

$$D(u_{i+1/2}^n, x_{i+1/2}) = D\left(\frac{u_i^n + u_{i+1}^n}{2}, x_{i+1/2}\right).$$

Proposition 2.3.1 (CFL)

Supposons le coefficient de diffusion indépendant de u , le schéma explicite centré à trois points est L^∞ stable et convergent sous la condition CFL de stabilité :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2D}, \quad (2.40)$$

où $D = \max_i D(x_i)$.

Démonstration : Prouvons que le schéma est L^∞ stable sous la condition de stabilité. Sous forme développée, le schéma est

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} &= u_i^n + D_{i+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{i+1}^n - u_i^n) + D_{i-1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{i-1}^n - u_i^n) \\ &= \left(1 - (D_{i+1/2} + D_{i-1/2}) \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right) u_i^n + D_{i+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{i+1}^n + D_{i-1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} u_{i-1}^n. \end{aligned}$$

Le schéma est L^∞ stable si u_i^{n+1} est une combinaison convexe de $(u_i^n, u_{i\pm 1}^n)$ et donc si

$$1 - (D_{i+1/2} + D_{i-1/2}) \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \geq 0.$$

Cette condition doit être vérifiée dans toutes les mailles, il est donc suffisant de satisfaire :

$$1 - 2D \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \geq 0. \quad \blacksquare$$

Ainsi construit, ce schéma est d'ordre 2 en espace du fait de l'approximation d'ordre 1 du flux, mais seulement d'ordre 1 en temps.

Remarque 2.3.1 (Ordre 2 en temps)

Construire un schéma d'ordre 2 en temps n'est pas utile puisque la condition CFL impose que l'erreur en temps soit du même ordre que celle en espace.

Remarque 2.3.2 (Maillage non régulier)

Dans le cas d'un maillage non régulier, le flux numérique peut s'étendre naïvement de la manière suivante :

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = -2D_{i+1/2}^n \frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}.$$

Néanmoins, la formule de différence finie ne fournit *a priori* plus une approximation d'ordre 2 du gradient en $x_{i+1/2}$ mais au barycentre de x_i et x_{i+1} . L'approximation est donc seulement consistante à l'interface et globalement le schéma n'est plus que d'ordre 1 en espace.

La condition de stabilité parabolique (2.40) est très restrictive puisqu'elle impose le choix d'un pas de temps nettement plus faible relativement à celui d'espace. De ce fait, il est parfois judicieux d'utiliser une approximation implicite des flux pour se passer de cette contrainte. Un tel schéma est construit en calculant le gradient à partir des quantités à l'instant t_{n+1} .

Définition 2.3.2

Le flux de diffusion implicite centré à deux points est

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = -D_{i+1/2}^n \frac{u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}}{\Delta x}. \tag{2.41}$$

Algorithmiquement, ce choix rend le calcul de u à l'instant t_{n+1} plus complexe. En effet, un système linéaire doit être résolu à chaque pas de temps pour réaliser la mise de jour de (u_i^n) . Le coefficient de diffusion est ici choisi de manière explicite pour ne pas avoir à résoudre un système non-linéaire à la place (ce qui est nettement plus coûteux). L'équation (2.37) est finalement équivalente au système suivant :

$$\left(\mathbf{I}_n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \mathbf{A} \right) \mathbf{U}^{n+1} = \mathbf{U}^n, \tag{2.42}$$

où $\mathbf{U}^n = (u_i^n)$ est le vecteur des inconnus et $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$ est la matrice du Laplacien définie par

$$A_{i,j} = \begin{cases} D_{i-1/2}^n + D_{i+1/2}^n & \text{si } i = j \\ -D_{i\pm 1/2}^n & \text{si } i = j \pm 1. \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.43}$$

Il est possible de montrer que la matrice $\mathbf{I}_n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \mathbf{A}$ est symétrique définie positive (en utilisant le critère de la diagonale strictement dominante par exemple). Ainsi, ce système peut être résolu numériquement en utilisant une factorisation de Cholesky ou un solveur itératif comme le gradient conjugué.

Conditions aux limites

De même que pour les modèles hyperboliques, la condition aux limites de Dirichlet peut être traitée en introduisant une maille fantôme de part et d'autre du domaine pour calculer le flux au bord. Dans le schéma implicite, cela se traduit par un terme source supplémentaire dans le système matriciel (2.42) :

$$\mathbf{B}^n = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \begin{pmatrix} D_{1/2}^n U_G(t_n) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ D_{i_{max}+1/2}^n U_D(t_n) \end{pmatrix}.$$

2.3.2 Systèmes de diffusion

Dans cette section, une méthode de résolution volumes finis est proposée pour le système de diffusion croisé issu de la limite asymptotique de l'équation du transport électronique (voir section 1.3.2). En une dimension d'espace ce système est

$$\begin{cases} \partial_t \rho &= \partial_x \left(\frac{2}{3\sigma} \partial_x q \right) \\ \partial_t q &= \partial_x \left(\frac{5}{3} \frac{2}{3\sigma} \partial_x \left(\frac{q^2}{\rho} \right) \right), \end{cases}$$

où $\sigma(\rho, q) \in \mathbb{R}_+$ est l'opacité. Soit $\mathbf{W} = (\rho \ q)^T$ le vecteur des inconnus, le système peut se réécrire sous la forme d'une loi de conservation vectorielle :

$$\partial_t \mathbf{W} + \partial_x \left(\frac{2}{3\sigma} \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{W}) \right) = 0, \quad (2.44)$$

où $\mathbf{F}(\mathbf{W}) = - \left(q \ \frac{5q^2}{3\rho} \right)^T$. La formulation volumes finis reste donc inchangée par rapport à (2.37) et les flux vectoriels sont désormais

$$\phi = - \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{2}{3\sigma} \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{W}((t, x_{i+1/2}))) dt \quad (2.45)$$

L'extension directe du flux obtenu dans le cas scalaire consiste simplement en une approximation de la dérivée de chacune des composantes de \mathbf{F} . En posant $w_i^n = \frac{5(q_i^n)^2}{3\rho_i^n}$, le flux numérique est

$$\tilde{\phi}_{i+1/2} = - \frac{2}{3\sigma_{i+1/2}^n \Delta x} \left(\frac{q_{i+1}^n - q_i^n}{w_{i+1}^n - w_i^n} \right), \quad (2.46)$$

où l'opacité à l'interface est calculée à partir d'une moyenne arithmétique des opacités à gauche et à droite : $\sigma_{i+1/2} = \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}$.

Remarque 2.3.3 (*Schémas alternatifs*)

Il est possible d'obtenir des schémas de diffusion différents. Par exemple, en développant la dérivée de y , le flux s'exprime désormais directement en fonction du gradient de \mathbf{W} . Ce choix fait néanmoins intervenir la valeur de la densité et de l'énergie au niveau de l'interface en $x_{i+1/2}$. Il est aussi possible d'écrire le schéma en fonction d'un autre jeu de variable. D'un point de vue numérique, tous ces choix sont équivalents tant que les données du problème sont relativement régulières.

2.4 Extensions bidimensionnelles

Dans les sections précédentes, la construction des schémas numériques a été discutée en une dimension d'espace. Dans cette partie, il est montré comment ces mêmes schémas peuvent être étendus en dimension deux, d'abord sur des maillages cartésiens puis sur des maillages non structuré. Le passage au tridimensionnel représente une complexité supplémentaire, notamment en terme de programmation et de coût calcul. Le travail de cette thèse s'arrête donc au bidimensionnel.

2.4.1 Maillage cartésien

Les maillages cartésiens correspondent vulgairement à un quadrillage de l'espace. Les éléments de celui-ci sont donc des rectangles supposés non déformés. Plus précisément, la discrétisation consiste désormais en un découpage de $\mathcal{D} = [x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}]$ en $i_{max} j_{max}$ volumes de contrôles de taille $\Delta x_i \Delta y_j$. Dans la suite de cette section, la construction de schémas volumes finis est explicitée pour l'équation d'advection scalaire et l'équation de diffusion linéaire. Un élément du maillage est représenté sur la figure 2.8 avec les différentes notations.

2.4.1.1 Formulation volumes finis

Soit $u : (t, \mathbf{x}) \mapsto u(t, \mathbf{x})$ une quantité scalaire du temps $t \in \mathbb{R}_+$ et de l'espace $\mathbf{x} \in \mathcal{D}$. Les équations décrites précédemment peuvent s'écrire sous la forme d'une loi de conservation bidimensionnelle :

$$\partial_t u + \nabla \cdot \phi(u) = 0, \quad (2.47)$$

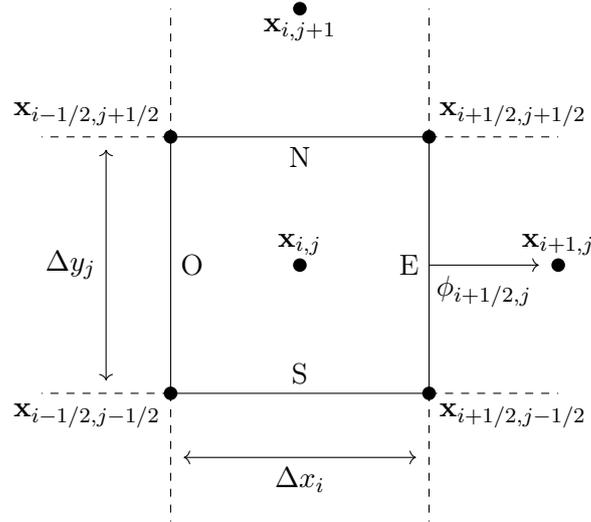


FIGURE 2.8 – Une maille d'un maillage cartésien

où ϕ est un flux dépendant de l'équation considérée. La valeur moyenne de u dans la maille $\mathcal{C}_{i,j}$ à l'instant t_n est notée $u_{i,j}^n$. L'idée de base dans la construction du schéma volume finis est toujours la même : l'équation est intégrée sur un volume de contrôle $\mathcal{C}_{i,j} = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{i-1/2}, y_{i+1/2}]$ et entre deux instants t_n et t_{n+1} :

$$\begin{aligned} \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta t \Delta x_i \Delta y_j} \int_{\mathcal{C}_{i,j}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \nabla \cdot \phi(u)(t, \mathbf{x}) dt d\mathbf{x} &= 0, \\ \frac{u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} (\phi_{i+1/2,j} - \phi_{i-1/2,j}) + \frac{1}{\Delta y_j} (\phi_{i,j+1/2} - \phi_{i,j-1/2}) &= 0, \end{aligned} \quad (2.48)$$

où $u_{i,j}^n$ est la moyenne de u dans la maille $\mathcal{C}_{i,j}$ à l'instant t_n . Les flux sur les bords Est et Nord prennent alors la forme suivante :

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2,j} &= \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{\Delta y} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i+1/2,j-1/2}}^{x_{i+1/2,j+1/2}} \phi(u)(t, x_{i+1/2}, y) \cdot \mathbf{e}_x dy dt, \\ \phi_{i,j+1/2} &= \frac{1}{\Delta t} \frac{1}{\Delta x} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-1/2,j+1/2}}^{x_{i+1/2,j+1/2}} \phi(u)(t, x, y_{i+1/2}) \cdot \mathbf{e}_y dx dt. \end{aligned}$$

Les intégrales le long des interfaces sont approchées avec une formule de quadrature du point milieu (d'ordre 1). Cette approximation est justifiée pour des schémas d'ordre au plus 2 afin que l'erreur de la quadrature reste du même ordre que celle du schéma en espace. Au delà, il est nécessaire d'utiliser une formule d'ordre supérieur comme celle de Simpson ou de Gauss-Legendre. Les flux numériques horizontaux et verticaux sont donc

$$\phi_{i+1/2,j} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(u)(t, \mathbf{x}_{i+1/2,j}) \cdot \mathbf{e}_x dt + \mathcal{O}(\Delta y^2), \quad (2.49a)$$

$$\phi_{i,j+1/2} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(u)(t, \mathbf{x}_{i,j+1/2}) \cdot \mathbf{e}_y dt + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (2.49b)$$

2.4.1.2 Advection

Dans le cadre de l'advection linéaire, la quantité u est advectée selon un vecteur $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$. Le flux intervenant dans la loi de conservation (2.47) s'écrit alors sous la forme :

$$\phi(u) = \mathbf{v}u.$$

Soient v_x et v_y les composantes du vecteur vitesse, sur le bord Est le flux est plus précisément

$$\phi_{i+1/2,j} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v_x u(t, \mathbf{x}_{i+1/2,j}) dt + \mathcal{O}(\Delta y^2).$$

Celui-ci s'apparente au flux d'une équation d'advection unidimensionnel dont la vitesse est obtenue par projection de \mathbf{v} selon la normale à la face. Ainsi, les flux numériques peuvent être construits en résolvant indépendamment les problèmes de Riemann dans chacune des directions (en utilisant par exemple le schéma de Godunov). Dans la direction horizontale, le flux numérique d'ordre 1 est

$$\tilde{\phi}_{i+1/2,j} = \begin{cases} v_x u_{i,j}^n & \text{si } v_x > 0 \\ v_x u_{i+1,j}^n & \text{si } v_x < 0 \end{cases}. \quad (2.50)$$

L'extension à l'ordre 2 est directe. Pour les problèmes non linéaires, les solveurs de Riemann approchés unidimensionnel peuvent être utilisés à la place, dans chacune des directions. Par ailleurs, la condition CFL de stabilité est analogue au cas 1D :

$$\Delta t \leq \frac{\min(\Delta x, \Delta y)}{2\|\mathbf{v}\|}. \quad (2.51)$$

Remarque 2.4.1

Cette manière de procéder direction par direction donne lieu à un schéma numérique assez diffusif. Une méthode plus satisfaisante consiste à adopter une approche réellement multidimensionnelle en prenant en compte les contributions des mailles dans la direction orthogonale. En utilisant l'algorithme REM (Reconstruction, Évolution, Moyenne) décrit dans [45], il est possible de montrer que le flux numérique du schéma de Godunov est (lorsque par exemple $v_x \geq 0$ et $v_y \geq 0$)

$$\tilde{\phi}_{i+1/2,j} = v_x \left(u_{i,j}^n + v_y \frac{\Delta t}{2\Delta y} (u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n) \right).$$

Par rapport au schéma précédent, le stencil est augmenté.

2.4.1.3 Diffusion

De la même manière que pour l'équation d'advection, la résolution de l'équation de diffusion s'étend facilement en dimension supérieure d'espace. Dans ce cas, le flux dans la loi de conservation (2.47) est analogue à celui de Fick et dépend désormais du gradient de u :

$$\phi(u) = -D(u, \cdot) \nabla u.$$

Il est aussi possible de construire un modèle de diffusion anisotrope, dans ce cas le coefficient de diffusion est une matrice $\mathbf{D} \in M_2(\mathbb{R})$ définie positive. D'une manière générale, le flux sur la face Est est alors

$$\phi_{i+1/2,j} = -\frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} D(u_{i+1/2,j}, \mathbf{x}_{i+1/2,j}) \partial_x u(t, \mathbf{x}_{i+1/2,j}) dt + \mathcal{O}(\Delta y^2),$$

De même que dans le cas unidimensionnel, le schéma explicite centré est obtenu en appliquant une formule de différences finies sur la dérivée partielle de u et une formule de quadrature des rectangles à gauche pour l'intégrale en temps. Par exemple dans la direction horizontale, ce flux est

$$\tilde{\phi}_{i+1/2,j} = D_{i+1/2,j}^n \frac{u_{i+1,j}^n - u_{i,j}^n}{\Delta x}, \quad (2.52)$$

où $D_{i+1/2,j}^n = D(u_{i+1/2,j}^n, \mathbf{x}_{i+1/2,j})$. La condition CFL est aussi analogue au 1D :

$$\Delta t \leq \frac{\min(\Delta x^2, \Delta y^2)}{4D}.$$

2.4.1.4 Systèmes de diffusion

D'une manière générale, la résolution des systèmes de diffusion comme celui issu de la limite fluide transport électronique, n'engendre pas de complexité supplémentaire. Dans ce cas, la loi de conservation (2.47) porte sur la grandeur vectorielle $\mathbf{W}^T = (\rho \ q)$ et le flux physique ϕ est désormais une matrice définie par :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{W}) &= -\frac{2}{3\sigma(\mathbf{W})} \left(\nabla q \quad \nabla \left(\frac{5q^2}{3\rho} \right) \right)^T \\ &= -\frac{2}{3\sigma(\mathbf{W})} \left(\frac{5q^2}{3\rho} \left(2 \frac{\nabla q^T}{q} - \frac{\nabla \rho^T}{\rho} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.53)$$

La formulation volumes finis prend la même forme que précédemment pour le cas scalaire. Sur la face Est, le vecteur flux est identique à celui obtenu dans le cas unidimensionnel (2.45) et s'écrit sous la forme :

$$\phi_{i+1/2,j} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(\mathbf{W}(t, \mathbf{x}_{i+1/2,j})) \mathbf{e}_x dt + \mathcal{O}(\Delta y^2).$$

Le flux centré d'ordre 2 est construit en appliquant une formule de différences finis sur les dérivées partielles dans la direction \mathbf{e}_x des grandeurs macroscopiques. Celui-ci est alors :

$$\tilde{\phi}_{i+1/2,j} = -\frac{2}{3\sigma_{i+1/2,j}^n} \left(\frac{5(q_{i+1/2,j}^n)^2}{3\rho_{i+1/2,j}^n} \left(2 \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{\Delta x} - \frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\Delta x} \right) \right). \quad (2.54)$$

Il est aussi possible de directement discrétiser le gradient de $w = \frac{q^2}{\rho}$ sans le développer au préalable. Dans ce cas, le flux est simplement

$$\tilde{\phi}_{i+1/2,j} = -\frac{2}{3\sigma_{i+1/2,j}^n} \left(\frac{5}{3} \frac{w_{i+1,j}^n - w_{i,j}^n}{\Delta x} \right). \quad (2.55)$$

La démarche est identique si le système de diffusion est écrit en fonction des variables non-conservatives.

2.4.2 Maillage non structuré

Dans de nombreux cas pratiques, le domaine de calcul ne peut pas être facilement représenté par un maillage cartésien. C'est en particulier le cas lorsque le maillage doit suivre une géométrie complexe. Pour ce faire, il est parfois nécessaire d'utiliser des partitionnements différents du domaine de calcul. Ce découpage peut par exemple être réalisé à l'aide de polygones. Ces maillages sont souvent qualifiés de non structurés car contrairement aux maillages cartésiens, il n'est d'une manière générale plus possible d'accéder aux voisins des éléments de celui-ci par des opérations élémentaires sur les indices.

Par la suite, les maillages sont supposés conformes au sens des volumes finis. C'est à dire, que ceux-ci forment bien un partitionnement complet de l'espace (les mailles ne se recouvrent pas) et que les faces à l'intérieur du domaine constituent la frontière entre deux uniques mailles. Dans les cas de test présentés dans cette thèse, la géométrie et les maillages sont en

deux dimension et générés avec GMSH [24]. Les mailles sont donc des triangles, et les faces, des segments. Le formalisme utilisé ne présuppose néanmoins pas la forme des mailles. Les notations suivantes sont adoptées :

- L'ensemble des mailles est noté \mathcal{T} .
- L'ensemble des faces est noté \mathcal{F} .
- L'ensemble des noeuds est noté \mathcal{N} .
- Une maille $K \in \mathcal{T}$, d'aire $|K|$ et de barycentre \mathbf{x}_K , est composée des faces \mathcal{F}_K et des noeuds \mathcal{N}_K .
- Une face $e \in \mathcal{F}$, de longueur $|e|$ et de centre \mathbf{x}_e est composée des noeuds $(\mathbf{x}_e^-, \mathbf{x}_e^+) \in \mathcal{N}^2$. Cette face fait partie d'au moins une maille $K_e \in \mathcal{T}$ et si elle ne se trouve pas sur le bord, une autre maille $L_e \in \mathcal{T}$ la partage. La normale unitaire extérieur à K_e de cette face est notée $\mathbf{n}_{K,e}$. Le vecteur tangent $\mathbf{t}_{K,e}$ est défini de telle manière que la base locale à l'arête $(\mathbf{n}_{K,e}, \mathbf{t}_{K,e})$ soit directe. Les sommets sont alors tel que : $(\mathbf{x}_e^+ - \mathbf{x}_e^-) \cdot \mathbf{t}_{K,e} \geq 0$. Enfin si le face n'est pas sur le bord, le point \mathbf{x}_e^* est l'intersection entre la face et la droite formée par le centre des deux mailles.
- Un noeud $n \in \mathcal{N}$ du maillage, de coordonnées \mathbf{x}_n , est partagé par l'ensemble \mathcal{T}_n des mailles.

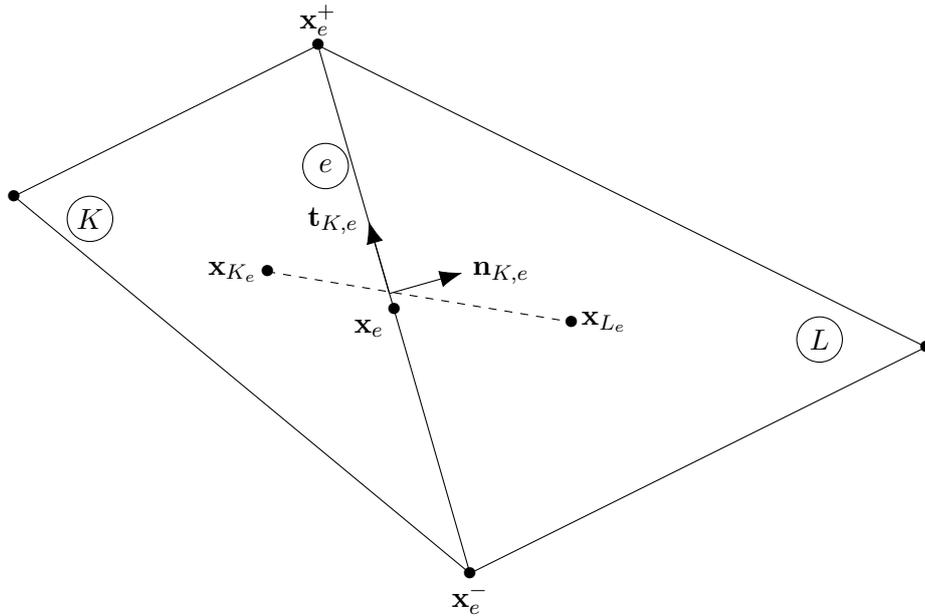


FIGURE 2.9 – Deux mailles d'un maillage non structuré triangulaire

2.4.2.1 Formulation volumes finis

Soient $K \in \mathcal{T}$ une maille du maillage et u_K^n la moyenne de $u(t, \mathbf{x})$ dans cette maille à l'instant t_n . La formulation volume finis est obtenue en intégrant la loi de conservation (2.47) sur le volume de contrôle et entre les deux instants, puis en appliquant le théorème de

Green-Ostrogradski :

$$\begin{aligned}
 & \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta t |K|} \int_K \int_{t_n}^{t_{n+1}} \nabla \cdot \phi(u) = 0 \\
 & \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta t |K|} \sum_{e \in \mathcal{F}} \int_e \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(u)(t, \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}_{K,e} dt dx = 0 \\
 & \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} + \sum_{e \in \mathcal{F}} \frac{|e|}{|K|} \phi_{K,e} = 0.
 \end{aligned} \tag{2.56}$$

De façon similaire à ce qui est fait sur un maillage cartésien, le flux sortant de la maille K par la face e est approché par une formule du point milieu :

$$\phi_{K,e} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \phi(u)(t, \mathbf{x}_e) \cdot \mathbf{n}_{K,e} dt + \mathcal{O}(h^2), \tag{2.57}$$

où h est une longueur caractéristique du maillage. Dans le cas d'une équation d'advection, la méthode de Godunov peut toujours être appliquée et revient à ré-utiliser le solveur unidimensionnelle dans la direction normale à l'interface. L'extension à l'ordre 2 est néanmoins plus délicate, en particulier pour définir et limiter les pentes correctement dans la reconstruction. Ces problèmes ne seront pas discutés dans cette thèse.

2.4.2.2 Schémas de diffusion

Pour construire un schéma de diffusion sur un maillage non structuré, il est nécessaire de fournir une approximation du gradient normal. Tout d'abord considérons une face e appartenant à la maille K , qui ne soit pas situé sur le bord. Il existe alors une autre maille $L \in \mathcal{T}$ partageant cette même face. Le flux de diffusion explicite en temps, sortant de la maille K vers la maille L est

$$\phi_{K,e} = -D_e^n \nabla u(t^n, \mathbf{x}_e) \cdot \mathbf{n}_{K,e} + \mathcal{O}(h^2, \Delta t), \tag{2.58}$$

où $D_e^n = \frac{D_K^n + D_L^n}{2}$ est une approximation de la valeur du coefficient de diffusion au centre de la face. Une première idée naïve est d'utiliser la même formule de différence finie qu'en 1D ou sur maillage cartésien :

$$\tilde{\phi}_{K,e} = -D_e^n \frac{u_L^n - u_K^n}{\|\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K\|}. \tag{2.59}$$

Ce choix se révèle être mauvais puisque d'une manière générale, cette expression n'est pas une approximation du gradient normal mais du gradient dans la direction entre le centre des deux mailles. D'une manière générale, les maillages utilisés n'assurent pas la colinéarité entre $\mathbf{n}_{K,e}$ et $\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K$ (voir figure 2.9). Ainsi, une autre méthode de calcul du gradient doit être développée. Dans la littérature, plusieurs techniques ont été proposées (voir par exemple [31] et [5] pour plus de références). Dans cette thèse nous nous concentrons sur l'une d'entre elles qui est le schéma diamant développé par Y.Coudière, J-P.Vila et P.Villedieu dans [16, 15].

2.4.2.3 Schéma Diamant

L'idée principale de cette méthode (proposée initialement dans [16]) est d'approcher le gradient dans le flux par la moyenne d'un gradient bien reconstruit dans le quadrilatère diamant $\mathcal{D} = (\mathbf{x}_K, \mathbf{x}_e^-, \mathbf{x}_L, \mathbf{x}_e^+)$ (voir figure 2.10). La formule du gradient permet d'exprimer la moyenne du gradient dans le diamant en fonction de la valeur de u sur ses faces $(e_{\mathcal{D}_i})_{i \leq 4}$

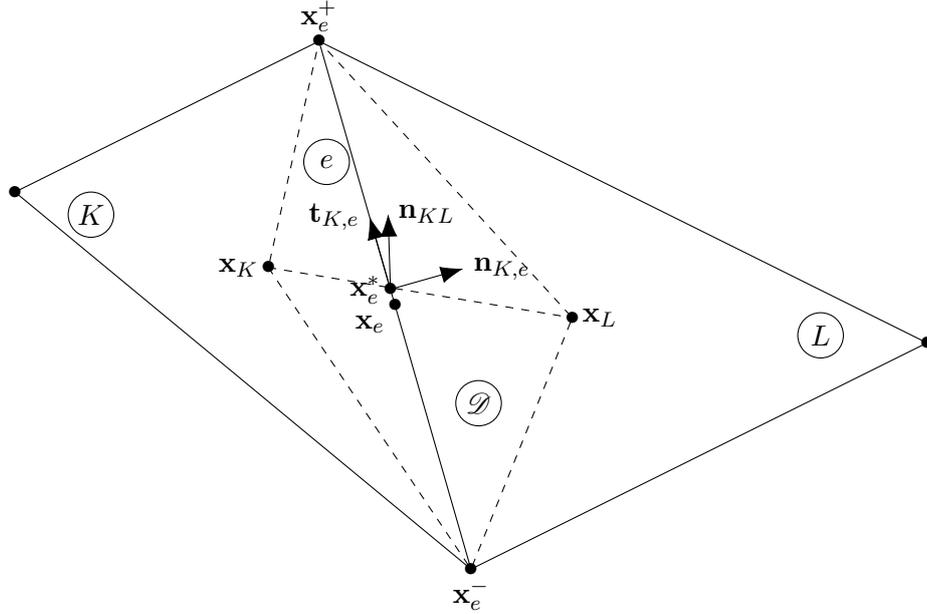


FIGURE 2.10 – Deux mailles d’un maillage non structuré triangulaire et le diamant associé. Le vecteur \mathbf{n}_{KL} est la normale à $\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K$ tel que $\mathbf{n}_{KL} \cdot \mathbf{t}_{K,e} \geq 0$

de normales

$\mathbf{n}_{\mathcal{D},i}$:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \int_{\mathcal{D}} \nabla u(\cdot, \mathbf{x}) dx = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{i=1}^4 \int_{e_{\mathcal{D},i}} u(\cdot, \mathbf{x}) \mathbf{n}_{\mathcal{D},i} dx.$$

En reconstruisant convenablement u sur les faces du diamant, il est possible de donner une approximation de la moyenne du gradient dans \mathcal{D} . Cette approche a pour intérêt de faire intervenir la valeur de u aux sommets du maillage (en \mathbf{x}_e^{\pm}) à travers les reconstructions et donc de prendre en compte une contribution tangentielle dans l’approximation du gradient. Ces valeurs ne sont cependant pas des inconnues primales et doivent donc être calculées à partir des mailles voisines. Supposons les connues pour le moment.

Proposition 2.4.1 (Gradient reconstruit)

Si u est reconstruit de manière affine par maille sur les faces du diamant alors la moyenne du gradient reconstruit sur le diamant \mathcal{D} est

$$\mathbf{P} = \left(\frac{u_L - u_K}{h} - \kappa \frac{u_e^+ - u_e^-}{|e|} \right) \mathbf{n}_{K,e} + \frac{u_e^+ - u_e^-}{|e|} \mathbf{t}_{K,e}, \quad (2.60)$$

où $h = (\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{n}_{K,e}$ est la distance projetée entre les mailles selon la normale à la face, $\kappa = \frac{(\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{t}_{K,e}}{(\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{n}_{K,e}}$ est la tangente de l’angle formé entre $\mathbf{n}_{K,e}$ et $\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K$ et u_e^{\pm} sont les valeurs reconstruites de u aux sommets \mathbf{x}_e^{\pm} .

Démonstration : Les reconstructions étant affines sur les faces du diamant, les moyennes arithmétique de u sont simplement

$$\mathbf{P} = \frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{i=1}^4 \frac{1}{2} (u_i^- + u_i^+) \mathbf{e}_{\mathcal{D},i}, \quad (2.61)$$

où u_i^{\pm} sont les inconnues aux sommets de la face et $\mathbf{e}_{\mathcal{D},i}$ est le vecteur normal à la face de norme sa longueur. Tout d’abord, exprimons ce résultat plus simplement dans la base $(\mathbf{n}_{K,e}, \mathbf{n}_{KL})$.

Pour ce faire, remarquons tout d'abord que chaque quantité dans l'expression (2.61) est portée par la somme de deux vecteurs. Par exemple, le terme en facteur de u_K est

$$\frac{1}{2}(\mathbf{e}_{\mathcal{D},1} + \mathbf{e}_{\mathcal{D},4}).$$

Or, l'intégrale de la normale extérieure sur n'importe quel polygone est nulle : $\int \mathbf{n} = 0$. Dans le triangle $(\mathbf{x}_K, \mathbf{x}_e^-, \mathbf{x}_e^+)$, cette propriété permet d'écrire la relation suivante :

$$\mathbf{e}_{\mathcal{D},1} + \mathbf{e}_{\mathcal{D},4} = -|e|\mathbf{n}_{K,e}.$$

Cette expression permet d'exprimer le terme en u_K dans la base voulue. En appliquant ce même procédé aux trois autres sommets du diamant, il est possible de montrer que le gradient moyen est

$$\mathbf{P} = \frac{|e|}{2|\mathcal{D}|} (u_L - u_K) \mathbf{n}_{K,e} + \frac{\|\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K\|}{2|\mathcal{D}|} (u_e^+ - u_e^-) \mathbf{n}_{KL}.$$

Or, l'aire du diamant est $|\mathcal{D}| = h|e|$ et le vecteur \mathbf{n}_{KL} se décompose sous la forme $\cos(\alpha)\mathbf{t}_{K,e} - \sin(\alpha)\mathbf{n}_{K,e}$, où α est l'angle formé entre $\mathbf{n}_{K,e}$ et $\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K$. Après des opérations algébriques élémentaires, le gradient prend la forme voulue dans la base locale $(\mathbf{n}_{K,e}, \mathbf{t}_{K,e})$. Il est aussi possible d'obtenir ce résultat en constatant que le gradient approché est l'unique solution du système :

$$\begin{cases} \mathbf{P} \cdot (\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K) &= u_K - u_L \\ \mathbf{P} \cdot (\mathbf{x}_e^+ - \mathbf{x}_e^-) &= u_e^+ - u_e^- \end{cases}.$$

Autrement dit, le gradient moyen est exact dans la direction du centre des mailles et dans la direction longitudinale à la face. La résolution de ce système donne alors le résultat voulu. ■

Définition 2.4.1 (*Schéma diamant*)

Le flux numérique du schéma diamant est l'approximation du flux de diffusion (2.58) calculé à partir du gradient reconstruit \mathbf{P} dans la maille diamant :

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_{K,e} &= -D_e^n \mathbf{P} \mathbf{n}_{K,e} \\ &= -D_e^n \left(\frac{u_L - u_K}{h} - \kappa \frac{u_e^+ - u_e^-}{|e|} \right). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Remarque 2.4.2

Ce schéma peut être facilement étendu aux systèmes de diffusion. La même méthode est employée pour reconstruire les gradients normaux des différentes quantités dans chacune des composantes du flux.

Afin de pouvoir mettre en oeuvre ce schéma en pratique, il reste désormais à définir les valeurs u_e^\pm aux noeuds du maillage. La méthode proposée dans [16] est rappelée ici.

Proposition 2.4.2 (*Moindres carrés*)

Soient $n \in \mathcal{N}$ un noeud du maillage, $\tilde{u}_n(\mathbf{x}) = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) + b$ une reconstruction affine de u autour de n et $E = \frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}_n} |\tilde{u}_n(\mathbf{x}_K) - u_K|^2$ l'erreur quadratique. L'erreur est minimale si et seulement si $\mathbf{Y}^T = (b \quad \mathbf{a})$ vérifie le système des équations normales :

$$\begin{pmatrix} p & \mathbf{J}^T \\ \mathbf{J} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \sum_{K \in \mathcal{T}_n} u_K \\ \sum_{K \in \mathcal{T}_n} (\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_n) u_K \end{pmatrix}, \quad (2.63)$$

où p est le nombre de mailles partageant le sommet n et où $(\mathbf{J}, \mathbf{I}) \in \mathbb{R}^2 \times M_2(\mathbb{R})$ sont un

vecteur et une matrice définis tels que

$$\mathbf{J} = \sum_{K \in \mathcal{T}_n} (\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_n), \quad (2.64a)$$

$$\mathbf{I} = \sum_{K \in \mathcal{T}_n} (\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_n) \otimes (\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_n). \quad (2.64b)$$

Démonstration : Soient $K_i \in \mathcal{T}_n$ la i ème maille partageant le noeud n , $\mathbf{C} \in M_{p,3}(\mathbb{R})$ la matrice dont la i ème ligne est définie par

$$\mathbf{C}_i = (1 \quad \mathbf{x}_{K_i} - \mathbf{x}_n),$$

et $\mathbf{D} \in M_p(\mathbb{R})$ le vecteur tel que $D_i = U_{K_i}$. L'erreur quadratique s'écrit alors sous la forme :

$$E(\mathbf{Y}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{C}\mathbf{Y} - \mathbf{D}\|_2^2.$$

Supposons que \mathbf{Y} minimise E . Le gradient de cette fonctionnelle est donc nul :

$$\nabla_{\mathbf{Y}} E = \mathbf{C}^T (\mathbf{C}\mathbf{Y} - \mathbf{D}) = 0,$$

ce qui permet de montrer que \mathbf{Y} vérifie le système des équations normales. Réciproquement, supposons désormais que \mathbf{Y} vérifie le système des équations normales et soit $\mathbf{Z} \in M_3(\mathbb{R})$. Montrons que $E(\mathbf{Z})$ est minoré :

$$\begin{aligned} E(\mathbf{Z}) &= \frac{1}{2} \|(\mathbf{C}\mathbf{Y} - \mathbf{D}) + \mathbf{C}(\mathbf{Z} - \mathbf{Y})\|_2^2 \\ &= E(\mathbf{Y}) + \mathbf{C}^T (\mathbf{C}\mathbf{Y} - \mathbf{D}) \cdot (\mathbf{Z} - \mathbf{Y}) + \frac{1}{2} \|\mathbf{C}(\mathbf{Z} - \mathbf{Y})\|_2^2 \\ &\geq E(\mathbf{Y}). \end{aligned}$$

Le vecteur \mathbf{Y} est donc bien le minimum de E . ■

La valeur au noeud du maillage est donnée par la partie constante de la reconstruction b qui correspond à $u_n(\mathbf{x}_n)$. Sa valeur a été calculée dans [16] et vaut

$$b = \sum_{K \in \mathcal{T}_n} \frac{1 - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{x}_K}{p - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{J}} u_K, \quad \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{I}^{-1} \mathbf{J}. \quad (2.65)$$

A travers cette méthode, il apparaît nécessaire d'augmenter la taille du stencil en prenant en compte la valeur des mailles autour de l'interface pour correctement calculer le gradient normal. Le flux du schéma diamant (2.62) s'apparente à une combinaison du gradient dans la direction des centres des mailles et de celui dans la direction de la face. Si la normale à l'arête est bien alignée avec la direction des centres alors $\kappa = 0$ et le flux dégénère vers le schéma naïf (2.59).

Remarque 2.4.3

D'un point de vue algorithmique, il est souhaitable de commencer par reconstruire u sur tous les noeuds du maillage avant de calculer les flux pour éviter les calculs redondants. De plus, il est important de remarquer que le vecteur $(\frac{1 - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{x}_K}{p - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{J}})_{K \in \mathcal{T}_n} \in \mathbb{R}^p$ ne dépend que de la géométrie. Il peut donc être calculé une unique fois pour chacun des noeuds (et stocké en mémoire). En définitive, la phase de reconstruction se limite donc au calcul d'un produit scalaire par noeud à chaque pas de temps, ce qui reste raisonnable par rapport au coût du (mauvais) schéma naïf.

2.5 Les schémas préservant l'asymptotique

2.5.1 Contexte et principe général

Les équations cinétiques et les modèles aux moments (présentés dans le chapitre 1) décrivent des phénomènes physiques à différentes échelles. D'un côté, le transport des particules s'opère à l'échelle microscopique qui est celle du libre parcours moyen des particules. De l'autre, la diffusion des particules est observée à l'échelle macroscopique. D'un point de vue pratique, ces changements d'échelle apparaissent dans différents problèmes physiques. Par exemple, dans la physique de la fusion par confinement inertiel celui-ci s'opère entre l'intérieur (dense) et l'extérieur (peu dense) de la cible. En dehors de la cible, le laser transporte de l'énergie puis à l'intérieur, celle-ci est déposée par diffusion du fait de l'augmentation de la densité du milieu. En radiothérapie, un changement similaire se produit lorsque le rayonnement ionisant passe du milieu extérieur à l'intérieur de la peau.

Dans ce chapitre, des méthodes numériques ont été présentées pour résoudre les équations de transport et de diffusion. Néanmoins, pour de nombreux problèmes physiques, ces deux mécanismes peuvent cohabiter au sein d'une même simulation. Il n'est donc pas possible d'utiliser les méthodes séparément l'une de l'autre. De plus, il est aussi important de savoir correctement résoudre les régimes intermédiaires qui mélangent transport et diffusion. Par conséquent, il est nécessaire de développer des méthodes qui arrivent à résoudre toutes les échelles en même temps. Deux problèmes principaux se posent alors. Le premier est qu'en suivant une approche classique, le schéma est contraint de résoudre la plus petite échelle microscopique. Du fait de la condition CFL, le pas de temps peut alors devenir très faible. Le deuxième problème est que le régime asymptotique n'est pas forcément bien résolu. Autrement dit, les flux limites n'approchent pas forcément d'une manière consistante l'équation limite. Pour pallier ces problèmes, une nouvelle classe de méthodes numériques a émergé ; les schémas préservant l'asymptotique.

Définition 2.5.1 (*Schéma AP - Asymptotic Preserving*)

D'une manière générale, un schéma numérique préservant l'asymptotique est un schéma qui discrétise correctement une équation et son équation limite. Par ailleurs, ces schémas sont uniformément stable par rapport au régime ; la condition de stabilité de ce schéma ne dépend pas fortement de celui-ci.

Construire un schéma numérique pour les modèles aux moments (ou les équations cinétiques) présentés dans cette thèse, consiste à élaborer des flux qui discrétisent à la fois le système hyperbolique et l'équation parabolique dans la limite où le nombre de Knudsen tend vers 0 (voir figure 2.11).

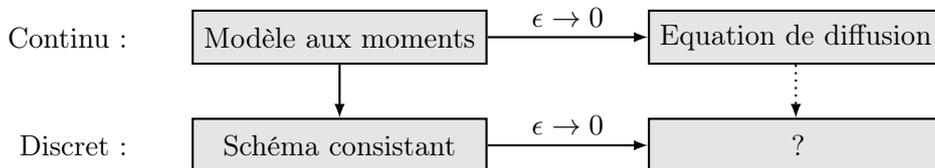


FIGURE 2.11 – Diagramme représentant la problématique de la préservation de l'asymptotique

Dans la littérature, de nombreuses méthodes préservant l'asymptotique ont été proposées dans différents cadres physiques :

- Les schémas AP ont été introduits pour la première fois dans le contexte du transport des neutrons et du transfert radiatif par [41, 40]. Ces schémas reposent alors sur la

méthode de Galerkin discontinue.

- Plus tard, un schéma AP a été proposé dans [34, 33] à partir de la méthode des ordonnées discrets. L'idée principale consiste à combiner astucieusement le flux du schéma décentré et celui de diffusion pour obtenir les bonnes limites asymptotiques. Une idée similaire a été plus tard proposée pour le transport linéaire dans [7].
- Dans [36, 35, 8], les auteurs utilisent une décomposition de la fonction de distribution autour de la distribution d'équilibre pour obtenir des schémas AP pour des équations de transport. Une démarche plus générale a été suivie dans [44] en utilisant une décomposition micro-macro de la fonction de distribution.
- Dans [37] et [1, 9], des idées similaires ont été employées pour le transfert radiatif et la dynamique des gazs.
- D'autres méthodes ont été proposées pour le transport linéaire comme la méthode *well-balanced* [25] et les schémas d'intégration-projection [39].
- Plus récemment, des schémas AP ont été construits pour des modèles aux moments dans [2, 26, 10]. Ceux-ci introduisent des modifications *ad hoc* dans le solveur de Riemann approché pour correctement traiter le terme source et atteindre le bon régime asymptotique.

En 2010, K. Xu et J-C. Huang ont conçu un schéma AP novateur pour la dynamique des gaz raréfiés, connu sous le nom de *Unified Gas Kinetic Scheme* (UGKS) [59]. Ce schéma constitue la base des travaux présentés dans cette thèse et est présenté en détail dans les chapitres 3 et 4.

2.5.2 HLL modifié

Dans cette section, il est montré à titre d'illustration comment le schéma HLL pour le modèle M1 (présenté dans la section 2.2.3.2) peut être modifié pour obtenir un schéma préservant l'asymptotique en suivant [2]. Dans le chapitre 3, ce schéma servira aussi de point de comparaison pour la nouvelle méthode proposée.

L'objectif est donc de faire en sorte d'obtenir un bon schéma pour l'équation de diffusion scalaire (2.36) lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0 dans les flux et quand l'échelle de temps est celle permettant d'observer la diffusion, soit $\eta = \epsilon$. Tout d'abord, il apparaît que le schéma HLL classique sans la modification pour traiter le terme source (la formulation volumes finis (2.27) avec les flux (2.29)) diverge du fait du terme en $\frac{1}{\eta}$ en facteur dans les flux et le terme source.

Après modification, les flux du nouveau schéma (2.34-2.33) tendent vers une valeur finie. En supposant le pas du maillage constant et en majorant/minorant les valeurs propres λ^\pm par $\pm \frac{1}{\eta}$ dans le schéma, il est possible de montrer le résultat suivant.

Proposition 2.5.1 (*Schéma non AP*)

Lorsque $\epsilon \mapsto 0$, le schéma numérique limite sur la densité est

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \frac{1}{\sigma} (\rho_{i+1}^n - 2\rho_i^n + \rho_{i-1}^n). \quad (2.66)$$

Démonstration : Sous forme développée, le schéma complet sur la densité peut s'écrire sous la forme :

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{2\epsilon + \sigma \Delta x} (j_{i+1}^n - j_{i-1}^n - (\rho_{i+1}^n - 2\rho_i^n + \rho_{i-1}^n)).$$

L'analyse du schéma sur la densité de courant permet de montrer que $(j_i^n) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$. On obtient ainsi le résultat voulu.



Par rapport au schéma initial, la modification permet d'obtenir un schéma stable asymptotiquement dans la limite où le nombre de Knudsen tend vers 0. Cependant, ce nouveau schéma ne préserve pas l'asymptotique. En effet, le schéma discrétise bien l'équation de diffusion mais pour une opacité de $\frac{1}{\sigma}$ et non pas de $\frac{1}{3\sigma}$. Il est donc nécessaire de modifier ce schéma. Pour ce faire, dans [2], il a été suggéré de réécrire la loi de conservation sous la forme suivante :

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \frac{\sigma + \bar{\sigma}}{\epsilon \eta} (\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{U}) - \mathbf{U}), \quad (2.67)$$

où $\bar{\sigma} \in \mathbb{R}_+$ est une opacité libre et $\bar{\mathbf{R}}$ est le terme source modifié :

$$\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{U}) = \frac{\sigma}{\sigma + \bar{\sigma}} \mathbf{R}(\mathbf{U}) + \frac{\bar{\sigma}}{\sigma + \bar{\sigma}} \mathbf{U}. \quad (2.68)$$

L'introduction de ce degré de liberté dans l'équation va permettre de retrouver le bon régime asymptotique. Comme le terme source est toujours sous la forme d'un terme de relaxation, le schéma est le même que précédemment dans lequel \mathbf{R} est remplacé par $\bar{\mathbf{R}}$ et σ par $\sigma + \bar{\sigma}$. Le nouveau schéma limite sur la densité est alors

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \frac{1}{2\epsilon + (\sigma + \bar{\sigma})\Delta x} (j_{i+1}^n - j_{i-1}^n - (\rho_{i+1}^n - 2\rho_i^n + \rho_{i-1}^n)).$$

Le bon coefficient de diffusion est finalement retrouvé en posant $\bar{\sigma} = 2\sigma$.

Deuxième partie

UGKS pour les modèles aux moments

Le transport linéaire

Sommaire

3.1	Introduction	68
3.2	UGKS pour le transport linéaire	68
3.2.1	Une formulation volumes finis	69
3.2.2	Une méthode basée sur les caractéristiques	70
3.2.3	Analyse asymptotique et stabilité	73
3.2.4	Diffusion implicite	75
3.2.5	Conditions aux limites	76
3.3	Fermetures aux moments d'UGKS	77
3.3.1	UGKS-M1	77
3.3.2	UGKS-P1	82
3.3.3	Fermetures d'ordre élevé	82
3.4	Réalisabilité des schémas pour les modèles aux moments	88
3.4.1	Principe général	88
3.4.2	Positivité d'UGKS	89
3.4.3	Modification d'UGKS-M1 pour assurer la réalisabilité	89
3.5	Résultats	97
3.5.1	UGKS-M1	98
3.5.2	UGKS-P1	102
3.5.3	UGKS-M2	103
3.5.4	UGKS-PN	105

Résumé

Dans ce chapitre, une nouvelle méthode numérique préservant l'asymptotique est proposée pour résoudre les modèles aux moments du transport linéaire présentés dans le chapitre 1. Ces méthodes reposent sur l'*Unified Gas Kinetic Scheme* (UGKS) dont la construction est rappelée. Plusieurs extensions à cette nouvelle méthode sont suggérées et la question de réalisabilité des schémas est discutée. Une partie du travail exposé dans ce chapitre a été publiée dans *Mathematics and Computers in Simulation* [23].

3.1 Introduction

Dans le chapitre 1 (section 1.2), plusieurs modèles aux moments du transport linéaire ont été introduits. Tout comme pour l'équation cinétique dont ils sont issus, ceux-ci admettent un régime asymptotique particulier dans la limite où le nombre de Knudsen tend vers 0. Dans cette limite, la densité tend à vérifier l'équation de diffusion (1.9). Bien qu'il soit aisé de construire séparément un schéma numérique pour un modèle aux moments ou l'équation de diffusion limite, il n'est pas trivial d'en obtenir un qui dégénère correctement de l'un vers l'autre de manière continue. D'un point de vue physique, il est important de pouvoir résoudre toutes les échelles en même temps, puisque différents régimes peuvent cohabiter à l'échelle d'une même simulation. Cependant, cette propriété n'est pas évidente à obtenir numériquement, en particulier du fait du changement de classe d'équation (qui passe de l'hyperbolique au parabolique).

Dans la dernière section du chapitre précédent, une méthode a été présentée pour obtenir un schéma préservant l'asymptotique pour le modèle M1 à partir de HLL. Comme de nombreux schémas AP [26, 10], celui-ci repose sur une modification *ad hoc* des flux. Un critère pertinent pour juger la pertinence de cette dernière est d'évaluer *a posteriori* la vitesse de convergence en ϵ vers la solution de diffusion (par exemple voir [4]). Malgré ce critère, il reste cependant une part d'arbitraire dans la construction du flux puisque plusieurs fonctions sont admissibles pour définir α (2.33). Par ailleurs, la démarche n'est pas générique et doit être adaptée en fonction du modèle aux moments considéré.

L'*Unified Gas Kinetic Scheme* (UGKS) est un schéma AP, développé en 2010 par K. Xu et J-C. Huang dans le contexte de la dynamique des gaz raréfiés. Brièvement, l'idée principale du schéma est d'utiliser la solution intégrale de l'équation cinétique pour construire les flux. Cette méthode présente l'avantage de nativement prendre en compte le terme source tout en dégénérant correctement dans les régimes limites sans correction supplémentaire. UGKS a depuis été étendu et amélioré de différentes manières. Une extension multidimensionnelle a tout d'abord été proposée dans [32] puis des écoulements plus complexes ont été traités dans [28, 27]. En particulier, une extension permettant de résoudre l'opérateur de Boltzmann complet a été suggérée [48] et d'autres applications ont encore été considérées [58]. Une synthèse de l'état de l'art autour d'UGKS et un aperçu globale de la méthode est disponible dans [60].

Ce schéma a aussi été appliqué au transport linéaire par L. Mieussens dans [50] puis étendu au transfert radiatif dans [55] et ces travaux constituent la base des développements de ce chapitre. Cependant, cette méthode s'applique aux équations cinétiques et non pas aux modèles aux moments. Dans les sections suivantes, la construction d'UGKS pour le transport linéaire est rappelée, puis une nouvelle méthode est proposée pour construire des schémas pour les modèles aux moments associés, à partir de celui-ci.

3.2 UGKS pour le transport linéaire

Dans cette section, le travail présenté par L. Mieussens dans [50], exposant la construction d'UGKS pour l'équation du transport linéaire est repris. L'équation cinétique à résoudre est

$$\partial_t f + \frac{v}{\eta} \partial_x f = \nu(\rho - f), \quad (3.1)$$

où $f : (t, x, v) \rightarrow f(t, x, v)$ est la fonction de distribution, $\rho = \langle f \rangle$ est la densité et $\nu = \frac{\sigma}{e\eta}$ est la fréquence de collision.

3.2.1 Une formulation volumes finis

Dans cette partie, la formulation volumes finis de l'équation cinétique (3.1) est établie. La démarche est identique à celle présentée pour les lois de conservation dans le chapitre 2. Soient $\mathcal{C}_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ un volume de contrôle de taille Δx et $[t_n, t_{n+1}]$ un intervalle de temps de taille Δt . Tout d'abord, la moyenne de la fonction de distribution dans la maille \mathcal{C}_i à l'instant t_n est

$$\forall v \in [-1, 1], f_i^n(v) = \frac{1}{\Delta x} \int_{\mathcal{C}_i} f(t_n, x, v) dx, \quad (3.2)$$

et le flux microscopique à travers l'interface $x_{i+1/2}$ est

$$\forall v \in [-1, 1], \phi_{i+1/2}(v) = \frac{1}{\eta \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v f(t, x_{i+1/2}, v) dt. \quad (3.3)$$

A cette étape, la variable cinétique est conservée continue, ces quantités sont donc semi-discrètes. Cette variable sera par la suite omise en l'absence d'ambiguïté. La formulation volumes finis retenue de l'équation cinétique est alors

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (\phi_{i+1/2} - \phi_{i-1/2}) = \nu_i (\rho_i^{n+1} - f_i^{n+1}), \quad (3.4)$$

où $\nu_i = \nu(x_i) = \sigma(x_i)/(\epsilon \eta)$ est la fréquence de collision dans la i ème maille. Le terme de collision a été approché par une formule de quadrature des rectangles à droite pour obtenir un schéma implicite. Ce choix est important pour que le schéma soit asymptotiquement stable dans la limite de diffusion où ce terme devient prépondérant. Néanmoins, un problème se pose désormais puisque la densité au temps t_{n+1} intervient. Pour contourner cette difficulté, il est possible d'écrire une deuxième formulation volumes finis sur l'équation de conservation de la masse en intégrant la formulation microscopique (3.4) sur l'espace des vitesses :

$$\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}) = 0, \quad (3.5)$$

où $\rho_i^n = \langle f_i^n \rangle$ est la moyenne de la densité dans le volume de contrôle à l'instant t_n et $\Phi_{i+1/2} = \langle \phi_{i+1/2} \rangle$ est le flux macroscopique à travers l'interface. Par propriété de conservation de la masse de l'opérateur de collision, le terme source implicite disparaît. Ainsi, d'un point de vue algorithmique, la densité au temps t_{n+1} est calculée préalablement afin de pouvoir réaliser la mise à jour de la fonction de distribution avec le terme source implicite. Il reste désormais à donner une approximation consistante et conservative du flux microscopique $\phi_{i+1/2}$ et par suite, du flux macroscopique $\Phi_{i+1/2}$. La construction du flux est explicitée dans la section suivantes.

Remarque 3.2.1 (*Méthode de Crank–Nicolson*)

L'intégrale en temps du terme source peut aussi être approchée par la formule de quadrature des trapèzes pour améliorer l'ordre de convergence en temps du schéma. Dans ce cas, le terme source du schéma microscopique (3.4) est

$$\nu_i \left(\frac{\rho_i^n - f_i^n}{2} + \frac{\rho_i^{n+1} - f_i^{n+1}}{2} \right). \quad (3.6)$$

Remarque 3.2.2 (*Limite de diffusion*)

A l'échelle de la diffusion ($\eta = \epsilon$), si $\phi_{i+1/2} = \mathcal{O}(\epsilon^{-1})$, alors le schéma microscopique (3.4) peut s'écrire sous la forme : $f_i^{n+1} = \rho_i^{n+1} + \mathcal{O}(\epsilon)$. Ainsi dans la limite de diffusion ($\epsilon \rightarrow 0$), la fonction de distribution tend bien vers sa propre densité qui est la distribution

d'équilibre.

3.2.2 Une méthode basée sur les caractéristiques

L'idée principale d'UGKS est d'utiliser la solution intégrale de l'équation cinétique pour calculer les flux numériques. Ainsi, le terme source est naturellement pris en compte dans l'élaboration du schéma.

Proposition 3.2.1 (*Méthode des caractéristiques*)

Supposons la fréquence de collision ν constante, la solution de l'équation cinétique (3.1) vérifie :

$$\frac{d}{dt} \left(e^{\nu t} f(t, x + \frac{v}{\eta} t, \cdot) \right) = \nu e^{\nu t} \rho(t, x + \frac{v}{\eta} t). \quad (3.7)$$

Démonstration : Soit $s \mapsto (t(s), x(s))$ une courbe caractéristique paramétrée par $s \in \mathbb{R}_+$. La dérivée de la fonction de distribution le long de cette courbe est

$$\frac{d}{dt} f(t(\cdot), x(\cdot), \cdot) = \frac{dt}{ds} \partial_t f + \frac{dx}{ds} \partial_x f.$$

Si $t(s) = s$ et $x(s) = x(0) + \frac{v}{\eta} s$, alors la dérivée vérifie :

$$\frac{d}{dt} f(t(\cdot), x(\cdot), \cdot) = \nu (\rho(t(\cdot), x(\cdot)) - f(t(\cdot), x(\cdot), \cdot)).$$

Les caractéristiques sont donc des droites de pentes $\frac{v}{\eta}$ et la variation de la fonction de distribution le long des lignes correspond au taux de collision entre les particules. L'équation (3.7) s'obtient alors par une simple manipulation algébrique :

$$\forall t \in \mathbb{R}_+, e^{\nu t} \frac{d}{dt} f(t, x(0) + vt, \cdot) + \nu e^{\nu t} f(t, x(0) + vt, \cdot) = \nu e^{\nu t} \rho(t, x(0) + vt). \quad \blacksquare$$

Proposition 3.2.2 (*Formule de Duhamel*)

Supposons les variations de l'opacité négligeables à l'échelle d'une maille et d'un pas de temps, le bilan des particules à l'interface $x_{i+1/2}$ s'exprime à partir de la formule de Duhamel :

$$\begin{aligned} \forall t > t_n, f(t, x_{i+1/2}, v) &\approx e^{-\nu_{i+1/2}(t-t_n)} f(t_n, x_{i+1/2} - \frac{v}{\eta}(t-t_n), v) \\ &+ \nu_{i+1/2} \int_{t_n}^t e^{-\nu_{i+1/2}(t-s)} \rho(s, x_{i+1/2} - \frac{v}{\eta}(t-s)) ds, \end{aligned} \quad (3.8)$$

où $\nu_{i+1/2} = \frac{\sigma_{i+1/2}}{\epsilon \eta}$ est la fréquence de collision à l'interface.

Démonstration : Cette formule est obtenue en considérant la représentation intégrale (3.7) comme une approximation autour de la maille et à l'échelle d'un pas de temps, puis en intégrant entre t_n et $t > t_n$ en $x(0) = x_{i+1/2}$. \blacksquare

La formule de Duhamel établit un bilan du nombre de particules au niveau de l'interface. Le nombre total de particules à l'instant t peut être séparé en deux catégories; celles advectées et celles ayant subies une collision. Le premier membre de la formule décrit simplement le transport d'une partie des particules du pied de la caractéristique $x_{i+1/2} - \frac{v}{\eta}(t-t_n)$ jusqu'à l'interface. Le deuxième comptabilise l'ensemble des particules qui ont subi une ou plusieurs collisions avant le temps s (compris entre t_n et t) en $x_{i+1/2} - \frac{v}{\eta}(t-s)$ et acquis la vitesse v . Ces deux mécanismes apparaissent avec une certaine probabilité qui suit une loi exponentielle

en la fréquence de collision.

Cette formule établit l'état de la fonction de distribution aux interfaces dans le temps. Elle peut donc être utilisée pour construire un flux numérique microscopique. Pour ce faire, les grandeurs continues à l'intérieur doivent être approchées par leurs équivalents discrets : (f_i^n, ρ_i^n) . Une manière de procéder est de définir des reconstructions en temps et en espace pour la fonction de distribution et la densité. Le choix de ces reconstructions conditionne les régimes asymptotiques et l'ordre de convergence du schéma.

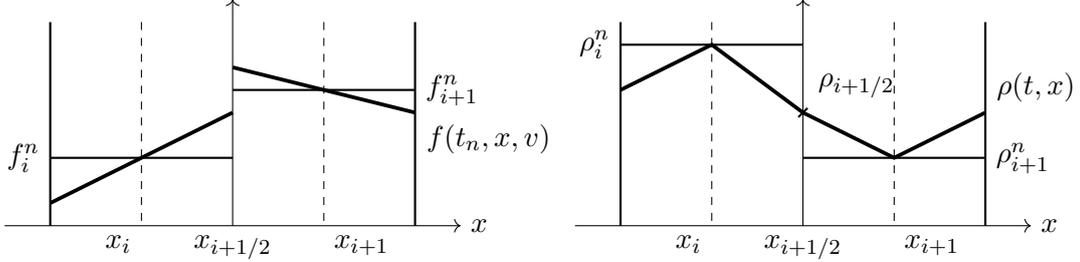


FIGURE 3.1 – Reconstructions de la fonction de distribution et de la densité

Tout d'abord, la fonction de distribution est reconstruite de manière usuelle par une fonction affine par maille (voir figure 3.1) :

$$\forall x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}], f(t_n, x, \cdot) = \begin{cases} f_i^n + \delta_x f_i^n (x - x_i) & \text{si } x < x_{i+1/2}, \\ f_{i+1}^n + \delta_x f_{i+1}^n (x - x_{i+1}) & \text{si } x > x_{i+1/2} \end{cases}, \quad (3.9)$$

où $\delta_x f_i^n$ est la pente de la fonction de distribution. Celle-ci est limitée par un limiteur de pente ψ (2.21) pour assurer la décroissance de la variation totale du schéma :

$$\delta_x f_i^n = \psi \left(\frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{\Delta x}, \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{\Delta x}, \frac{f_{i+1}^n - f_{i-1}^n}{2\Delta x} \right). \quad (3.10)$$

La densité est elle reconstruite d'une manière particulière par une fonction affine et continue entre les mailles (voir figure 3.1). Elle s'écrit sous la forme :

$$\forall t \in [t_n, t_{n+1}], \forall x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}], \quad \rho(t, x) = \rho_{i+1/2}^n + \begin{cases} \delta_x^L \rho_{i+1/2}^n (x - x_{i+1/2}) & \text{si } x < x_{i+1/2} \\ \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n (x - x_{i+1/2}) & \text{si } x > x_{i+1/2} \end{cases}, \quad (3.11)$$

où $\rho_{i+1/2}^n$ est la densité à l'interface et où $\delta_x^{LR} \rho_{i+1/2}^n$ sont les pentes spatiales. D'un point de vue pratique, le choix de la définition de $\rho_{i+1/2}^n$ n'est pas très important. Par exemple, la moyenne arithmétique convient : $\rho_{i+1/2}^n = (\rho_i^n + \rho_{i+1}^n)/2$. D'un point de vue physique, il peut être pertinent de choisir une densité plus proche de la distribution réelle des particules à l'interface. Dans la limite où t tend vers t_n , la formule de Duhamel (3.7) exprime la condition de compatibilité de l'opérateur BGK en $x_{i+1/2}$:

$$\langle \rho - f \rangle (t, x_{i+1/2}) = 0.$$

En utilisant une reconstruction constante par maille de la fonction de distribution dans celle-ci, la densité à l'interface s'exprime alors sous la forme :

$$\rho_{i+1/2}^n = \rho_i^{n+} + \rho_{i+1}^{n-}, \quad (3.12)$$

où $\rho_i^{n\pm} = \langle f_i^n \mathbb{1}_{v \geq 0} \rangle$ sont les demi-densités. Finalement, les pentes spatiales sont calculées avec des formules de différences finies :

$$\delta_x^L \rho_{i+1/2}^n = \frac{\rho_{i+1/2}^n - \rho_i^n}{\Delta x/2}, \quad \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n = \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i+1/2}^n}{\Delta x/2}. \quad (3.13a)$$

Proposition 3.2.3 (*Flux microscopique d'UGKS*)

A partir des reconstructions ainsi définies, le flux numérique microscopique d'UGKS est

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2}(v) = & A_{i+1/2} v \left(f_i^{n(+)} \mathbb{1}_{v>0} + f_{i+1}^{n(-)} \mathbb{1}_{v<0} \right) \\ & + B_{i+1/2} v^2 (\delta_x f_i^n \mathbb{1}_{v>0} + \delta_x f_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0}) \\ & + C_{i+1/2} v \rho_{i+1/2}^n \\ & + D_{i+1/2} v^2 (\delta_x^L \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v>0} + \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v<0}), \end{aligned} \quad (3.14)$$

où $f_i^{n(\pm)} = f_i^n \pm \frac{\Delta x}{2} \delta_x f_i^n$. Les coefficients d'intégrations $A_{i+1/2}$, $B_{i+1/2}$, $C_{i+1/2}$ et $D_{i+1/2}$ sont données par les fonctions suivantes :

$$A(\Delta t, \eta, \epsilon, \sigma) = -\frac{1}{\eta} \frac{1 - e^w}{w}, \quad (3.15a)$$

$$B(\Delta t, \eta, \epsilon, \sigma) = \frac{\epsilon}{\sigma \eta} \left[e^w + \frac{1 - e^w}{w} \right], \quad (3.15b)$$

$$C(\Delta t, \eta, \epsilon, \sigma) = \frac{1}{\eta} \left[1 + \frac{1 - e^w}{w} \right], \quad (3.15c)$$

$$D(\Delta t, \eta, \epsilon, \sigma) = -\frac{\epsilon}{\sigma \eta} \left[1 + e^w + 2 \frac{1 - e^w}{w} \right], \quad (3.15d)$$

où $w = -\frac{\sigma}{\epsilon \eta} \Delta t \in \mathbb{R}_-$ est évalué en $\sigma_{i+1/2} = \frac{\sigma_i + \sigma_{i+1}}{2}$.

Démonstration : Les reconstructions (3.9-3.11) sont employées dans la formule de Duhamel (3.8) puis intégrées exactement en temps pour obtenir le flux (3.3). Lorsque $v > 0$, le flux microscopique d'UGKS prend alors la forme :

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2}(v) = & \frac{1}{\eta \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v f(t, x_{i+1/2}, v) dt \\ = & \frac{1}{\eta \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v e^{-\nu_{i+1/2}(t-t_n)} \left[f_i^n + \delta_x f_i^n \left(\frac{\Delta x}{2} - \frac{v}{\eta} (t - t_n) \right) \right] dt \\ & + \frac{1}{\eta \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v \nu_{i+1/2} \int_{t_n}^t e^{-\nu_{i+1/2}(t-s)} \left[\rho_{i+1/2}^n - \delta_x^L \rho_{i+1/2}^n \frac{v}{\eta} (t-s) \right] ds dt. \end{aligned}$$

Chacun des éléments des reconstructions donnent lieu à un terme supplémentaire dans le flux numérique. Le calcul détaillé de chacune des intégrales sont dans l'annexe A. ■

Remarque 3.2.3 (*Domaine de validé des reconstructions*)

Dans la limite de diffusion, le pied de la caractéristique peut être arbitrairement loin de l'interface dans la formule de Duhamel. Néanmoins, du fait du mécanisme de collision, les particules sont contenues proche de l'interface du fait du terme exponentiel. De ce fait, il est justifié de négliger l'influence des particules à distance en étendant le domaine de validité des reconstructions en dehors des mailles. Néanmoins, cela peut dans certains cas particuliers provoquer la création de distributions négatives dans le schéma. Ce problème est détaillé dans la section 3.4.

Proposition 3.2.4 (Flux macroscopique d'UGKS)

Si le pas du maillage est constant alors le flux macroscopique d'UGKS est

$$\begin{aligned}\Phi_{i+1/2} = & A_{i+1/2} \left\langle v f_i^{n(+)} \mathbb{1}_{v>0} + v f_{i+1}^{n(-)} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \\ & + B_{i+1/2} \left\langle v^2 \delta_x f_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v^2 \delta_x f_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \\ & + \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n).\end{aligned}\quad (3.16)$$

Démonstration : Le flux macroscopique est la moyenne du flux microscopique sur l'espace des vitesses. Le terme constant en espace dans la reconstruction de la densité (associé à $C_{i+1/2}$) disparaît puisque $\langle v \rangle = 0$. Le seul terme à calculer concerne la partie affine de la reconstruction de la densité :

$$D_{i+1/2} \frac{\langle v^2 \rangle}{2} \left(\delta_x^L \rho_{i+1/2}^n + \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n \right) = \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n).$$

Dans ce cas, la densité à l'interface n'intervient pas dans le flux macroscopique donc sa définition n'importe pas. ■

Remarque 3.2.4 (Maillage non régulier)

Si le maillage n'est pas régulier, alors la simplification de la densité à l'interface ne s'opère pas dans le flux macroscopique. D'une manière générale, les pentes sont

$$\delta_x^L \rho_{i+1/2}^n = \frac{\rho_{i+1/2}^n - \rho_i^n}{\Delta x_i/2}, \quad \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n = \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i+1/2}^n}{\Delta x_{i+1/2}}.$$

Le terme associé dans le flux macroscopique est alors

$$\frac{D_{i+1/2}}{3} \left(\frac{\rho_{i+1}^n}{\Delta x_{i+1}} - \frac{\rho_i^n}{\Delta x_i} + \rho_{i+1/2}^n \left(\frac{1}{\Delta x_i} - \frac{1}{\Delta x_{i+1}} \right) \right).$$

Dans la suite de ce chapitre, le pas d'espace sera supposé constant mais cette situation sera considérée (et aura son importance) dans le cas des maillages non structurés (voir section 4.4).

3.2.3 Analyse asymptotique et stabilité

L'analyse asymptotique des différents coefficients d'intégration permet de déterminer les flux limites d'UGKS dans les différents régimes. Ces coefficients sont représentés sur la figure 3.2.

Proposition 3.2.5 (Régime de transport)

Lorsque le nombre de Knudsen tend vers $+\infty$ à η et Δt fixés (ou lorsque la fréquence de collision tend vers 0), le flux microscopique d'UGKS tend vers le flux de Godunov d'ordre 2 en espace et en temps pour l'équation d'advection linéaire (2.18) :

$$\phi_{i+1/2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow \infty} \frac{v}{\eta} (f_i^{n(+)} \mathbb{1}_{v>0} + f_{i+1}^{n(-)} \mathbb{1}_{v<0}) - \Delta t \frac{v^2}{2\eta^2} (\delta_x f_i^n \mathbb{1}_{v>0} + \delta_x f_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0}). \quad (3.17)$$

Démonstration : Les développements de Taylor des coefficients d'intégration en $w = -\frac{\sigma}{\epsilon\eta} \Delta t = 0$ sont

$$A = \frac{1}{\eta} + \mathcal{O}(w), \quad B = -\frac{\Delta t}{2\eta^2} + \mathcal{O}(w), \quad C = -\frac{w}{2\eta} + \mathcal{O}(w^2), \quad D = -\frac{\epsilon w^2}{6\eta\sigma} \mathcal{O}(w^3). \quad (3.18)$$

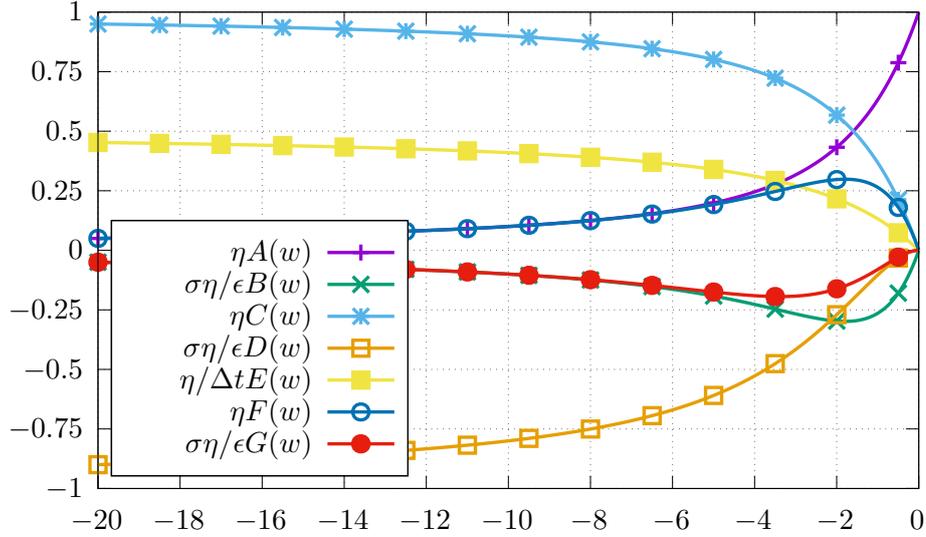


FIGURE 3.2 – Graphique représentant les coefficients d'intégrations normalisés en fonction de $w = -\nu\Delta t = -\frac{\sigma}{\epsilon\eta}\Delta t$.

Dans la limite où w tend vers 0, le flux microscopique ne contient donc que les termes associés à la reconstruction de la fonction de distribution. ■

Proposition 3.2.6 (Régime de Diffusion)

Supposons que le pas d'espace est constant. À l'échelle de la diffusion $\eta = \epsilon$ et lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, le flux macroscopique d'UGKS tend vers le flux de diffusion du schéma centré d'ordre 2 en espace (2.39) :

$$\Phi_{i+1/2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{3\sigma_{i+1/2}} \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x}. \quad (3.19)$$

Par ailleurs, la fonction de distribution tend vers sa densité moyenne :

$$f_i^{n+1} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \rho_i^{n+1}. \quad (3.20)$$

Démonstration : Lorsque ϵ tend vers 0, les limites des coefficients de diffusion (intervenant dans le flux macroscopique) sont

$$A(\Delta t, \epsilon, \epsilon, \sigma) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0, \quad B(\Delta t, \epsilon, \epsilon, \sigma) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0, \quad D(\Delta t, \epsilon, \epsilon, \sigma) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{\sigma}. \quad (3.21)$$

Ainsi, il ne reste dans le flux plus que le terme associé à la reconstruction affine de la densité. Pour prouver le deuxième point de la proposition, l'équivalent de $C_{i+1/2}$ en $\epsilon = 0$ est utilisé :

$$C_{i+1/2} \underset{\epsilon \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{\epsilon}. \quad (3.22)$$

La fonction de distribution tend donc bien vers sa densité puisque $\phi_{i+1/2} = \mathcal{O}(\epsilon^{-1})$ (du fait de la remarque 3.2.2). ■

Ces deux résultats permettent d'établir qu'UGKS préserve bien l'asymptotique de l'équation du transport linéaire. En effet, les flux limites dans chacun des deux régimes fournissent bien des approximations consistantes des flux des équations limites. Pour obtenir un schéma d'ordre

supérieur en espace dans le régime de transport, il serait possible de réaliser une reconstruction d'ordre plus élevé de la fonction de distribution en utilisant une approche de type WENO [56] par exemple.

Remarque 3.2.5

Les flux de diffusion sont obtenus uniquement grâce à la partie affine de la reconstruction de la densité. Si le pas du maillage n'est pas constant alors le flux de diffusion limite n'est plus correct. Deux méthodes sont proposées dans la section 4.4.2.1 pour traiter ce problème dans le cadre plus général des maillages non structurés.

Pour obtenir un schéma AP, il faut aussi prouver que le schéma reste stable sous des conditions "raisonnables", qui ne dépendent donc *a priori* pas fortement du nombre de Knudsen. Le pas de temps ne doit en particulier pas tendre vers 0 lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0. Bien que cela n'ait pas été montré formellement, il a été observé (dans [50]) que le schéma reste stable sous une condition CFL heuristique combinant la CFL de transport et de diffusion :

$$\Delta t \leq CFL \left(\frac{3}{2} \sigma \Delta x^2 + \eta \Delta x \right). \quad (3.23)$$

Cette condition semble valide pour des données initiales et conditions aux limites régulières.

3.2.4 Diffusion implicite

Dans le régime de diffusion, il est nécessaire de vérifier une condition parabolique de stabilité. Cette condition est restrictive puisque le pas de temps doit être proportionnel au carré du pas du maillage. Un schéma implicite permet de contourner cette restriction. Pour obtenir ce schéma comme limite asymptotique d'UGKS, il est possible de modifier la reconstruction en temps de la densité de la manière suivante :

$$\forall t \in [t_n, t_{n+1}], \forall x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}], \rho(t, x) = \rho_{i+1/2}^{n+1} + \begin{cases} \delta_x^L \rho_{i+1/2}^{n+1}(x - x_{i+1/2}) & \text{si } x < x_{i+1/2} \\ \delta_x^R \rho_{i+1/2}^{n+1}(x - x_{i+1/2}) & \text{si } x > x_{i+1/2} \end{cases}, \quad (3.24)$$

où les pentes sont désormais calculées à partir des quantités au temps t_{n+1} :

$$\delta_x^L \rho_{i+1/2}^{n+1} = \frac{\rho_{i+1/2}^{n+1} - \rho_i^{n+1}}{\Delta x/2}, \quad \delta_x^R \rho_{i+1/2}^{n+1} = \frac{\rho_{i+1}^{n+1} - \rho_{i+1/2}^{n+1}}{\Delta x/2}.$$

Dans ce cas, le flux limite de diffusion est bien implicite :

$$\Phi_{i+1/2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{3\sigma_{i+1/2}} \frac{\rho_{i+1}^{n+1} - \rho_i^{n+1}}{\Delta x}. \quad (3.25)$$

Le schéma implicite nécessite de résoudre un système linéaire à chaque pas de temps dans la partie macroscopique.

Remarque 3.2.6 (*Densité à l'interface*)

Si la reconstruction (3.24) est adoptée avec la définition cinétique (3.12) de la densité à l'interface alors le schéma microscopique ne peut plus être traité explicitement. Deux solutions sont possibles pour régler ce problème :

- La première consiste à utiliser la définition de la moyenne arithmétique à la place : $\rho_{i+1/2}^{n+1} = \frac{1}{2}(\rho_i^{n+1} + \rho_{i+1}^{n+1})$. Dans ce cas le flux peut être traité explicitement.
- La deuxième consiste à changer la reconstruction, en utilisant la densité à l'interface au temps t_n dans la partie constante et les pentes. Comme celle-ci n'intervient pas dans le flux macroscopique, cette dernière solution n'altère pas le régime asymptotique.

_____ tique.

Ce schéma n'a pas été utilisé ni testé par la suite mais la simplicité de son élaboration est mise en avant ici.

3.2.5 Conditions aux limites

Dans cette section, une méthode est proposée pour mettre en œuvre des conditions aux limites de Dirichlet. Celle-ci consiste à imposer la valeur de la fonction de distribution sur le demi-espace des particules entrantes. En effet, il n'est pas possible d'imposer la distribution des particules sortantes. Sur le bord gauche cette condition est

$$\forall t \in \mathbb{R}_+, \forall v \in [0, 1], f(t, 0, v) = f_G(t, v). \quad (3.26)$$

3.2.5.1 Donnée de bord isotrope

Tout d'abord, supposons que la fonction de distribution est à l'équilibre et donc isotrope : $f_G(t, \cdot) = \rho_G(t)$. Pour construire le flux numérique au bord, une première méthode consiste à établir une représentation de la fonction de distribution en $x_{1/2}$ en fonction du signe de la vitesse. Si la vitesse est positive alors la distribution est celle de la donnée de bord. Sinon, la formule de Duhamel (3.7) est utilisée pour décrire les particules sortantes du domaine :

$$f(t, x_{1/2}, v) = \begin{cases} \rho_G(t) & \text{si } v > 0 \\ e^{-\nu_{1/2}(t-t_n)} f(t_n, x_{1/2} - \frac{v}{\eta}(t-t_n), v) & \\ + \nu_{1/2} \int_{t_n}^t e^{-\nu_{1/2}(t-s)} \rho(s, x_{1/2} - \frac{v}{\eta}(t-s)) ds & \text{si } v < 0. \end{cases} \quad (3.27)$$

Avec cette définition, les flux microscopique et macroscopique peuvent être calculés :

$$\phi_{1/2} = \frac{v}{\eta} f_G \mathbb{1}_{v>0} + A_{1/2} v f_1^n + C_{1/2} v \rho_{1/2}^n + D_{1/2} v^2 \delta_x^L \rho_{1/2}^n, \quad (3.28a)$$

$$\Phi_{1/2} = \frac{1}{\eta} \langle v f_G \mathbb{1}_{v>0} \rangle + A_{1/2} \langle v f_1^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle - \frac{C_{1/2}}{4} \rho_{1/2}^n + \frac{D_{1/2}}{6} \delta \rho_{1/2}^{nR}. \quad (3.28b)$$

Cette approche présente l'avantage d'imposer exactement la fonction de distribution sur le bord. Dans la limite de transport libre, les flux dégénèrent correctement :

$$\begin{aligned} \phi_{1/2} &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow +\infty} \frac{v}{\eta} (f_G \mathbb{1}_{v>0} + f_1^n \mathbb{1}_{v<0}), \\ \Phi_{1/2} &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow +\infty} \frac{1}{\eta} \langle v f_G \mathbb{1}_{v>0} + v f_1^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle. \end{aligned}$$

En revanche dans la limite de diffusion, le flux macroscopique n'est pas borné. Pour pallier ce problème, il a été proposé dans [50] de définir la densité à l'interface de la manière suivante :

$$\rho_{1/2}^n = - \frac{\langle v f_G \mathbb{1}_{v>0} \rangle}{\langle v \mathbb{1}_{v<0} \rangle} = \rho_G^n. \quad (3.29)$$

Ainsi dans la limite, le flux macroscopique dégénère correctement :

$$\Phi_{1/2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{3\sigma_{1/2}} \frac{\rho_1^n - \rho_G^n}{\Delta x/2}. \quad (3.30)$$

Afin d'éviter de modifier la densité à l'interface sur le bord pour conserver un flux borné, il peut être préférable d'adopter une méthode utilisant une maille fantôme pour calculer le flux

macroscopique. Dans ce cas, le flux usuel d'UGKS intervient sur le bord et reste borné par construction. Ainsi, en imposant dans la maille fantôme :

$$\rho_0^n = 2\rho_G^n - \rho_1^n, \quad (3.31)$$

le flux macroscopique limite est le même que précédemment (si la définition arithmétique de la densité à l'interface est adoptée) mais sans modifier UGKS.

3.2.5.2 Donnée de bord anisotrope

Supposons désormais que la fonction de distribution f_G est anisotrope. Dans la section 1.2.3, il a été mis en évidence que dans ce cas, une couche limite de taille ϵ se forme au bord. Pour de faibles nombres de Knudsen, le maillage ne permet pas forcément de décrire la variation de la fonction de distribution au sein de celle-ci. Pour obtenir la bonne solution de diffusion sans utiliser des mailles à la même échelle que la couche, il est possible d'utiliser une densité équivalente au bord :

$$\tilde{\rho}_{1/2}^n = 2 \langle W(v) f_G(v) \mathbb{1}_{v>0} \rangle, \quad (3.32)$$

où $W(v) \approx \frac{3}{2}v^2 + v$. Cependant, il n'est pas possible d'utiliser cette définition pour $\rho_{i+1/2}^n$ en utilisant la première approche (décrite précédemment) puisque le terme en $C_{1/2}$ doit compenser le premier terme associé au transport. Il serait possible de modifier f_G en conséquence pour pouvoir utiliser cette définition de $\rho_{i+1/2}^n$ et donc avoir le bon flux de diffusion limite tout en conservant une quantité bornée, mais dans ce cas le flux dans le régime de transport libre deviendrait mauvais à son tour. Dans [50], une approche permettant de satisfaire ces deux conditions a été proposée à partir de combinaisons convexes.

Avec une maille fantôme, il suffit d'utiliser cette définition de la densité à l'interface (3.32) pour obtenir un bon flux dans tous les régimes. En effet, le flux microscopique dans le régime de transport reste inchangé et celui dans le régime de diffusion devient :

$$\Phi_{1/2} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{3\sigma_{1/2}} \frac{\rho_1^n - \tilde{\rho}_{1/2}^n}{\Delta x/2}. \quad (3.33)$$

Ces conditions aux limites ont été testées et les résultats sont satisfaisants par rapport à la méthode initiale proposée dans [50]. Ceux-ci ne sont pas présentés dans cette thèse.

3.3 Fermetures aux moments d'UGKS

3.3.1 UGKS-M1

Cette section se concentre tout d'abord sur la résolution du modèle M1 du transport linéaire (1.16)-(1.38) qui est rappelé ici :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \frac{1}{\eta} \partial_x j &= 0 \\ \partial_t j + \frac{1}{\eta} \partial_x q &= -\nu j \end{cases},$$

où $\nu = \frac{\sigma}{\epsilon \eta}$ est la fréquence de collision, ρ est la densité, j est la densité de courant et $q = \rho(1 - \frac{2u}{\beta})$ est le troisième moment, fermé à partir de la fonction de distribution M1. Dans celui-ci, la vitesse u est telle que $u = \frac{j}{\rho}$ et la variable entropique β vérifie l'équation $u = z(\beta)$ (1.32).

3.3.1.1 Principe général

Dans un premier temps, le principe général de la méthode est explicité dans le cadre du modèle M1 puis est étendu à d'autres fermetures ensuite. L'idée naturelle de ce nouveau schéma pour le modèle M1 du transport linéaire est d'appliquer UGKS à $\hat{f}_i^n(\cdot)$, la fonction de distribution M1 reconstruite à partir des moments $\mathbf{U}_i^n = (\rho_i^n \ j_i^n)$. Les variables macroscopiques à l'instant t_{n+1} sont alors les moments de f_i^{n+1} (qui n'est *a priori* plus une fonction de distribution M1). Ce processus est globalement représenté sur la figure 3.3. D'un autre point de vue, cette procédure peut être perçue comme une projection systématique de la fonction de distribution dans l'espace M1 à chaque pas de temps dans UGKS. Finalement, ce nouveau schéma s'apparente à une fermeture aux moments d'UGKS à l'échelle numérique.

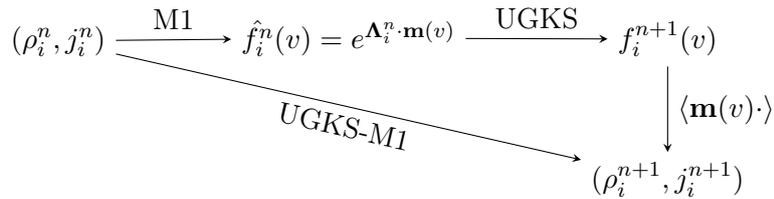


FIGURE 3.3 – Schéma représentant la structure du schéma UGKS-M1

Cette idée peut sembler sous-optimale puisqu'elle consiste à réintroduire la variable cinétique alors que le principe et l'intérêt même des modèles aux moments est de la faire disparaître. Néanmoins ce processus étant linéaire, il est possible de directement exhiber un schéma sur la densité et la densité de courant. Pour ce faire, la formulation volumes finis de l'équation cinétique (3.4) est intégrée contre le vecteur $\mathbf{m}(v) = (1 \ v)^T$ pour obtenir une nouvelle formulation sur le vecteur des variables macroscopiques $\mathbf{U}_i^n = (\rho \ j)^T$:

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x} (\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}) = \nu_i \mathbf{S}(\mathbf{U}_i^{n+1}), \quad (3.34)$$

où le vecteur des flux macroscopiques est $\Phi_{i+1/2} = \langle \mathbf{m}(v) \phi_{i+1/2}(v) \rangle = (\Phi_{i+1/2}^\rho \ \Phi_{i+1/2}^j)^T$. Celui-ci n'est rien d'autre que l'intégrale du flux microscopique d'UGKS dans lequel la fonction de distribution est la fonction de distribution M1 : $f_i^n = \hat{f}_i^n$.

Proposition 3.3.1 (UGKS-M1)

Si la partie affine de la reconstruction de la fonction de distribution est négligée alors les flux numériques d'UGKS-M1 sont

$$\Phi_{i+1/2}^\rho = A_{i+1/2} \left\langle v \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n), \quad (3.35a)$$

$$\Phi_{i+1/2}^j = A_{i+1/2} \left\langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v^2 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{C_{i+1/2}}{3} \rho_{i+1/2}^n, \quad (3.35b)$$

où $\hat{f}_i^n(v) = e^{\alpha_i^n + \beta_i^n v}$ et (α_i^n, β_i^n) sont les variables entropiques associées à \mathbf{U}_i^n .

Pour calculer les flux, les variables entropiques doivent tout d'abord être évaluées en résolvant l'équation non linéaire :

$$\beta_i^n = z^{-1}(u_i^n), \quad (3.36)$$

où $u_i^n = \frac{j_i^n}{\rho_i^n}$ et z^{-1} est la bijection réciproque de $z : \beta \rightarrow \coth \beta - \frac{1}{\beta}$. La solution de cette équation peut être calculée avec la méthode de Newton-Raphson. Pour améliorer la convergence

de l'algorithme, celui-ci peut être initialisé avec une approximation de la solution comme par exemple celle donnée dans [20] :

$$\beta = \frac{3u}{1 - \frac{u^2}{2}(1 + u^2)}.$$

D'une manière générale, l'algorithme converge en quelques itérations jusqu'à la précision machine. Lorsque u est proche de 1, le problème devient plus raide et une dizaine d'itérations sont nécessaires. La première variable entropique est telle que $e^{\alpha_i^n} = \rho_i^n \frac{\beta_i^n}{\sinh \beta_i^n}$. Celle-ci n'a pas besoin d'être calculée explicitement puisque e^α apparaît explicitement en facteur de l'expression des demi-moments (voir ci-dessous).

Proposition 3.3.2 (Préservation de l'asymptotique)

Le schéma UGKS-M1 préserve l'asymptotique du modèle aux moments M1.

Démonstration : Cette propriété est immédiate puisque le premier flux macroscopique dégénère de la même manière que UGKS :

$$\Phi_{i+1/2}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{3\sigma_{i+1/2}} \frac{\rho_{i+1}^{n+1} - \rho_i^{n+1}}{\Delta x}. \quad \blacksquare$$

Pour que ce schéma soit utilisable, il reste à proposer une méthode pour calculer les demi-moments de la fonction de distribution M1 :

$$\langle v^i \hat{f} \mathbb{1}_{v \geq 0} \rangle = \pm \rho \frac{e^\alpha}{2} \int_0^{\pm 1} v^i e^{\beta v} dv,$$

qui interviennent dans les flux. Bien que ces intégrales soient analytiques, des précautions doivent être prises pour un calcul robuste :

- Les demi-moments doivent être programmés sous forme développée (voir annexe B) pour éviter les accumulations d'erreurs d'arrondis lorsque β (ou u) est proche de 0.
- Malgré cela, les expressions obtenues ne sont pas définies en $\beta = 0$ et ne sont pas robustes dans cette limite. Par conséquent, en dessous d'un certain seuil (par exemple $|\beta| = 10^{-10}$), les intégrales sont remplacées par leur limite analytiques en $\beta = 0$ qui sont $\rho_i^n \langle v^i \mathbb{1}_{v \geq 0} \rangle = \pm \rho_i^n \frac{1}{2(i+1)}$.
- Pour les faibles densités, le quotient $u_i^n = \frac{j_i^n}{\rho_i^n}$ n'est plus forcément calculable. En effet, la fermeture M1 n'est pas définie dans cette limite. De ce fait en dessous d'un certain seuil de densité (autour de $\rho = 10^{-10}$), il est nécessaire d'imposer $\hat{f}_i^n = 0$ et par conséquent $\beta_i^n = 0$ pour correctement calculer le flux.

3.3.1.2 Ordre 2

Dans la partie précédente, le terme affine de la reconstruction de la fonction de distribution (qui permet d'obtenir l'ordre 2 en espace dans UGKS) n'a pas été considéré. Ce terme pose problème puisque les demi-moments des pentes de la forme $\langle v^i \delta_x \hat{f} \mathbb{1}_{v \leq 0} \rangle$, ne peuvent pas s'exprimer analytiquement en fonction des variables entropiques à cause de la non linéarité du limiteur de pente. Pour restaurer l'ordre 2 en espace, une reconstruction différente de la fonction de distribution doit donc être adoptée. Nous proposons ici de suivre la même démarche présentée dans [59] pour la dynamique des gaz raréfiés. Celle-ci consiste tout d'abord à réaliser une reconstruction affine par maille en espace des variables conservatives \mathbf{U}_i^n :

$$\forall x \in [x_i, x_{i+1}], \mathbf{U}_i^n(x) = \begin{cases} \mathbf{U}_i^n + \delta_x \mathbf{U}_i^n (x - x_i) & \text{si } x < x_{i+1/2} \\ \mathbf{U}_{i+1}^n + \delta_x \mathbf{U}_{i+1}^n (x - x_{i+1}) & \text{si } x > x_{i+1/2} \end{cases}. \quad (3.37)$$

Les pentes sont calculées composante par composante avec une formule de différences finies et limitées par un limiteur de pente Ψ :

$$\delta_x \mathbf{U}_i^n = \Psi \left(\frac{\mathbf{U}_{i+1}^n - \mathbf{U}_i^n}{\Delta x}, \frac{\mathbf{U}_i^n - \mathbf{U}_{i-1}^n}{\Delta x}, \frac{\mathbf{U}_{i+1}^n - \mathbf{U}_{i-1}^n}{2\Delta x} \right). \quad (3.38)$$

Ensuite, la reconstruction de la fonction de distribution M1 est obtenue en réalisant un développement limité de $\hat{f}(\mathbf{U}_i^n(x))$. Par exemple lorsque $x < x_{i+1/2}$, celui-ci est

$$\begin{aligned} \hat{f}(\mathbf{U}_i^n(x)) &= \hat{f}(\mathbf{U}_i^n) + \frac{d\hat{\mathbf{f}}}{d\mathbf{U}}(\mathbf{U}_i^n) \cdot \delta \mathbf{U}_i^n (x - x_i) \\ &= \hat{f}(\mathbf{U}_i^n) + \mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_i^n)^T \mathbf{m} \hat{f}(\mathbf{U}_i^n) \cdot \delta \mathbf{U}_i^n (x - x_i), \end{aligned} \quad (3.39)$$

où la matrice Jacobienne est définie par $(\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}))_{i,j} = \frac{\partial \Lambda_i}{\partial U_j}$. Finalement, la reconstruction de la fonction de distribution peut s'écrire de la manière suivante :

$$f(t_n, x, v) = \begin{cases} \hat{f}_i^n + \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_i^n)(x - x_i) & \text{si } x < x_{i+1/2} \\ \hat{f}_{i+1}^n + \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_{i+1}^n)(x - x_{i+1}) & \text{si } x > x_{i+1/2} \end{cases}, \quad (3.40)$$

où la nouvelle pente s'exprime en fonction des pentes des grandeurs macroscopiques : $\delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_i^n) = \mathbf{m}^T \hat{f}(\mathbf{U}_i^n) \mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_i^n) \delta_x \mathbf{U}_i^n$. Cette nouvelle reconstruction est alors employée dans UGKS-M1, ce qui permet de définir de nouveaux flux à l'ordre 2 qui sont désormais analytiques :

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2}^p &= A_{i+1/2} \left\langle v \hat{f}_i^{n+} \mathbb{1}_{v>0} + v \hat{f}_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + B_{i+1/2} \left\langle v^2 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_i^n) \mathbb{1}_{v>0} + v^2 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_{i+1}^n) \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \\ &\quad + \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n), \end{aligned} \quad (3.41a)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2}^j &= A_{i+1/2} \left\langle v^2 \hat{f}_i^{n+} \mathbb{1}_{v>0} + v^2 \hat{f}_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + B_{i+1/2} \left\langle v^3 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_i^n) \mathbb{1}_{v>0} + v^3 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_{i+1}^n) \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \\ &\quad + \frac{C_{i+1/2}}{3} \left\langle \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} + \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle, \end{aligned} \quad (3.41b)$$

et où

$$\hat{f}_i^{n\pm} = \hat{f}_i^n \pm \frac{\Delta x}{2} \delta_x \hat{f}_i^n.$$

L'expression complète des flux peut être trouvée dans l'annexe C. Les expressions des moments d'ordre supérieur de la fonction de distribution M1 sont dans l'annexe B. Il reste désormais à calculer la jacobienne qui intervient dans les pentes.

Proposition 3.3.3 (Calcul de la Jacobienne)

La jacobienne de l'application qui aux variables conservatives associe les variables entropiques est

$$\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}) = \frac{\rho^{-1}}{1 - 2\frac{u}{\beta} - u^2} \begin{pmatrix} 1 - 2\frac{u}{\beta} & -u \\ -u & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Démonstration : Tout d'abord, calculons la Jacobienne de l'application réciproque $\mathbf{U} : \Lambda \rightarrow \langle \mathbf{m} \exp(\Lambda \cdot \mathbf{m}) \rangle$:

$$\frac{\partial U_i}{\partial \Lambda_j} = \langle m_i m_j \exp(\Lambda \cdot \mathbf{m}) \rangle,$$

et sous forme tensorielle :

$$\mathbf{J}_\mathbf{U}(\Lambda) = \langle \mathbf{m} \otimes \mathbf{m} \exp(\Lambda \cdot \mathbf{m}) \rangle = \begin{pmatrix} \rho & j \\ j & q \end{pmatrix}, \quad q = \rho \left(1 - \frac{2u}{\beta} \right).$$

Le résultat s'obtient alors en remarquant que $\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}) = \mathbf{J}_\mathbf{U}(\Lambda)^{-1}$. ■

3.3.1.3 Diffusion implicite

Le schéma implicite de diffusion dans la limite peut être obtenu en appliquant la fermeture à l'échelle numérique sur la version modifiée d'UGKS. Les flux sont alors

$$\Phi_{i+1/2}^\rho = A_{i+1/2} \left\langle v \hat{f}_i^{n+} \mathbb{1}_{v>0} + v \hat{f}_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_{i+1}^{n+1} - \rho_i^{n+1}), \quad (3.43a)$$

$$\Phi_{i+1/2}^j = A_{i+1/2} \left\langle v^2 \hat{f}_i^{n+} \mathbb{1}_{v>0} + v^2 \hat{f}_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{C_{i+1/2}}{3} \rho_{i+1/2}^{n+1}, \quad (3.43b)$$

Le premier schéma sur la densité est totalement implicite et nécessite la résolution d'un système linéaire à chaque pas de temps. Ce système est le même que celui pour l'équation de la chaleur dans lequel un terme source supplémentaire \mathbf{B}^n apparaît pour prendre en compte les flux associés au transport :

$$\mathbf{B}_i^n = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(A_{i+1/2} \left\langle v \hat{f}_i^{n+} \mathbb{1}_{v>0} + v \hat{f}_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + A_{i-1/2} \left\langle v \hat{f}_{i-1}^{n+} \mathbb{1}_{v>0} + v \hat{f}_i^{n-} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \right).$$

Pour le deuxième schéma sur la densité de courant, le même problème qu'avec UGKS se pose sur la densité à l'interface. Si celle-ci est choisie implicitement dans la reconstruction (comme ci-dessus), alors elle doit être calculée avec la moyenne arithmétique. Dans ce cas, la mise à jour de \mathbf{U}_i^n doit se faire en deux étapes : le système linéaire est tout d'abord résolu pour calculer la densité au temps t_{n+1} , puis la densité de courant est calculée à partir de (\mathbf{U}_i^n) et de (ρ_i^{n+1}) . Si la densité à l'interface est définie à partir des demi-densités (3.12), alors elle doit être explicite dans la reconstruction pour conserver un schéma explicite sur la densité de courant et éviter la résolution d'un système non linéaire.

Ce schéma n'a pas été testé au cours de cette thèse (bien que sa mise en œuvre ne semble pas poser de problèmes *a priori*).

3.3.1.4 Conditions aux limites

Dans cette section, la question du traitement des conditions aux limites de Dirichlet est discutée. Dans les schémas classiques pour les modèles aux moments, une attention particulière doit être apportée dans la construction du flux pour correctement représenter la donnée de bord. La condition de bord de Marshak [22] a été développée à cet effet. Celle-ci consiste à considérer une maille fantôme dont la donnée mélange l'information des particules entrantes et sortantes du domaine. Sur le bord gauche, celle-ci est

$$\mathbf{U}_0^n = \begin{pmatrix} \left\langle f_L \mathbb{1}_{v>0} + \hat{f}_1^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \\ \left\langle v f_L \mathbb{1}_{v>0} + v \hat{f}_1^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Dans UGKS-M1, l'approche est tout autre puisque le flux sur le bord est hérité d'UGKS. De ce fait, ce ne sont pas les moments \mathbf{U} qui sont imposés au bord, mais la demi-fonction de distribution sous-jacente projetée dans l'espace M1. Cette approche cinétique permet une certaine flexibilité qui autorise par exemple la représentation de données anisotropes (en suivant la même approche que dans UGKS, voir section 3.2.5.2). Pour des données isotropes, les flux au bord sont les moments du flux microscopique au bord d'UGKS (3.28a) fermés avec la fonction de distribution M1 :

$$\Phi_{1/2}^\rho = \frac{1}{\eta} \left\langle v \hat{f}_L^n \mathbb{1}_{v>0} \right\rangle + \left\langle A_{1/2} v \hat{f}_1^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle - \frac{C_{1/2}}{4} \rho_{1/2}^n + \frac{D_{1/2}}{6} \delta_x^L \rho_{1/2}^n, \quad (3.45a)$$

$$\Phi_{1/2}^j = \frac{1}{\eta} \left\langle v^2 \hat{f}_L^n \mathbb{1}_{v>0} \right\rangle + \left\langle A_{1/2} v \hat{f}_1^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{C_{1/2}}{6} \rho_{1/2}^n - \frac{D_{1/2}}{8} \delta_x^L \rho_{1/2}^n, \quad (3.45b)$$

où la densité à l'interface est définie par (3.29) : $\rho_{i+1/2} = 4 \langle v \hat{f}_L \mathbb{1}_{v < 0} \rangle = \rho_G^n$, afin d'assurer la stabilité asymptotique et donc un bon flux de diffusion limite. Pour des données anisotropes, l'usage d'une maille fantôme dans le flux de densité serait préférable pour pouvoir traiter la couche limite et conserver des flux bornés (voir section 3.2.5.2).

3.3.2 UGKS-P1

Un schéma pour le modèle P1 (1.16)-(1.25) peut être facilement obtenu en suivant la même approche. Dans ce cas, la fonction de distribution est projetée dans l'espace P1 à chaque pas de temps dans UGKS. La fonction de distribution P1 est

$$\forall v \in [-1, 1], \hat{f}(v) = \rho + 3jv. \quad (3.46)$$

Les nouveaux flux s'obtiennent directement.

Proposition 3.3.4 (UGKS-P1)

Les flux d'UGKS-P1 d'ordre 1 sont

$$\Phi_{i+1/2}^\rho = A_{i+1/2} \left[\frac{1}{4}(\rho_i^n - \rho_{i+1}^n) + \frac{1}{2}(j_i^n + j_{i+1}^n) \right] + \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x}(\rho_{i+1}^n - \rho_i^n), \quad (3.47a)$$

$$\Phi_{i+1/2}^j = A_{i+1/2} \left[\frac{1}{6}(\rho_i^n + \rho_{i+1}^n) + \frac{3}{8}(j_i^n - j_{i+1}^n) \right] + \frac{C_{i+1/2}}{3}\rho_{i+1/2}^n. \quad (3.47b)$$

Dans ce cas, les demi-moments des fonctions de distributions intervenant dans les flux ne posent pas de problèmes numériques particuliers. Par construction, ce schéma préserve aussi l'asymptotique puisque le premier flux sur la densité dégénère de la même manière que celui d'UGKS-M1. Enfin l'extension à l'ordre 2 peut être obtenue comme pour UGKS-M1. La seule différence porte sur la jacobienne qui intervient dans le développement de Taylor de la fonction de distribution P1. Celle-ci est alors

$$\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

3.3.3 Fermetures d'ordre élevé

La méthode présentée précédemment est générale, tant par rapport à la forme de la fermeture (comme il a été montré dans la section précédente) que par rapport à la taille de la hiérarchie. Cette démarche peut donc être appliquée à d'autres modèles aux moments. Soit $\mathbf{m}(v) \in \mathbb{R}^{d+1}$, un vecteur composé des éléments d'une base de $\mathbb{R}_d[X]$ et soit $\mathbf{U} = \langle \mathbf{m}f \rangle \in \mathbb{R}^{d+1}$ le vecteur des moments de f . Un modèle aux moments est construit en approchant f par un ansatz $\hat{f}(\mathbf{U})$ qui réalise les mêmes $d+1$ moments que f . Le modèle aux moments prend alors la forme suivante :

$$\partial_t \mathbf{U} + \partial_x \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \nu \mathbf{S}(\mathbf{U}), \quad (3.49)$$

où $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \frac{1}{\eta} \langle v \mathbf{m} \hat{f}(\mathbf{U}) \rangle$ est le vecteur des flux et $\mathbf{S}(\mathbf{U}) = \langle \mathbf{m} \rangle \rho - \mathbf{U}$ est le terme source. La formulation volume finis peut être obtenue comme précédemment en intégrant la formulation volumes finis de l'équation cinétique par rapport à \mathbf{m} , ce qui donne :

$$\frac{\mathbf{U}_i^{n+1} - \mathbf{U}_i^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x}(\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}) = \nu_i \mathbf{S}(\mathbf{U}_i^{n+1}). \quad (3.50)$$

Le vecteur des flux macroscopiques $\Phi_{i+1/2}$ est alors

$$\Phi_{i+1/2} = \langle \mathbf{m} \phi_{i+1/2} \rangle, \quad (3.51)$$

où $\phi_{i+1/2}$ est le flux microscopique d'UGKS (3.14) dans lequel la fonction de distribution est approchée par l'ansatz : $f_i^n = \hat{f}(\mathbf{U}_i^n)$. Le résultat suivant vient alors immédiatement.

Proposition 3.3.5 (Préservation de l'asymptotique)

Si le premier membre de la hiérarchie est l'équation de conservation de la masse alors le flux associé dégénère correctement dans la limite de diffusion, et ce quelque soit l'ansatz choisi.

Remarque 3.3.1 (Base des polynômes de Legendre)

Si la base utilisée est celle des polynômes de Legendre alors le terme source est diagonal (voir remarque 1.2.5) et il peut être traité explicitement. Si la base est différente alors le terme source n'est d'une manière générale plus diagonal et une autre approche doit être adoptée pour éviter le coût d'un schéma implicite. Cependant, il est possible de contourner ce problème avec un algorithme en deux étapes. Tout d'abord, la densité au temps t_{n+1} est calculée explicitement (par propriété de préservation de la masse) à partir de (\mathbf{U}_i^n) . Puis les autres moments sont mises à jour à partir de (ρ_i^{n+1}) et de (\mathbf{U}_i^n) . Cette étape est aussi explicite d'un point de vue algorithmique. La base canonique est utilisée pour UGKS-M2 dans la section suivante et la base de Legendre est choisie pour UGKS-Pn ensuite.

3.3.3.1 UGKS-M2

Le modèle aux moments M2 est le modèle d'ordre supérieur (après le modèle M1) dans la hiérarchie des modèles aux moments entropiques Mn (voir section 1.2.4.3). En augmentant la taille de la hiérarchie, l'ensemble des fonctions de distribution représentables est agrandi et donc plus d'effets cinétiques peuvent être restitués (voir [21, 30, 52] pour plus de détails). Dans ce cas, la hiérarchie de moments est donnée par le vecteur $\mathbf{m}(v)^T = (1 \ v \ v^2)$ et le vecteur des moments prend la forme suivante $\mathbf{U}^T = (\rho \ j \ q)$. D'une manière similaire au modèle M1, l'ansatz est obtenu en minimisant l'entropie de Boltzmann sous la contrainte de la réalisation des moments :

$$\hat{f}(\mathbf{U})(v) = e^{\mathbf{\Lambda}(\mathbf{U}) \cdot \mathbf{m}(v)} = e^{\alpha + \beta v + \gamma v^2}, \quad (3.52)$$

où $\mathbf{\Lambda}^T = (\alpha \ \beta \ \gamma)^T$ est le vecteur des variables entropiques. Le modèle aux moments M2 prend alors la forme générale (3.49), où le terme source est $\mathbf{S}(\mathbf{U})^T = (0 \ -j \ \frac{\rho}{3} - q)$. Il peut alors être montré que le modèle aux moments M2 résultant est hyperbolique (voir [21]).

Proposition 3.3.6 (UGKS-M2)

Le flux du schéma UGKS-M2 est tel que :

$$\Phi_{i+1/2}^\rho = A_{i+1/2} \left\langle v \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n), \quad (3.53a)$$

$$\Phi_{i+1/2}^j = A_{i+1/2} \left\langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v^2 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{C_{i+1/2}}{3} \rho_{i+1/2}^n, \quad (3.53b)$$

$$\Phi_{i+1/2}^q = A_{i+1/2} \left\langle v^3 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v^3 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle + \frac{D_{i+1/2}}{5\Delta x} (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n), \quad (3.53c)$$

où $\Phi_{i+1/2} = \left(\Phi_{i+1/2}^\rho \quad \Phi_{i+1/2}^j \quad \Phi_{i+1/2}^q \right)^T$.

Tout comme pour le modèle M1, il reste à exprimer les demi-moments de la fonction de distribution pour évaluer les flux. Pour ce faire, les variables entropiques doivent être calculées en fonction des variables conservatives. Pour le modèle M1, la première variable entropique pouvait être éliminée et une unique équation non-linéaire devait être résolue. Pour le modèle M2, la première variable α peut également être éliminée, mais cette fois-ci, deux variables β et γ doivent être calculées.

Calcul des variables entropiques Les variables entropiques vérifient l'équation :

$$\langle \mathbf{m}\hat{f}(\mathbf{\Lambda}) \rangle = \mathbf{U}, \quad (3.54)$$

que nous allons résoudre numériquement. Pour cela, nous commençons tout d'abord par expliciter le calcul de l'application :

$$\mathbf{\Lambda} \rightarrow \mathbf{U} = \langle \mathbf{m}\hat{f}(\mathbf{\Lambda}) \rangle = \begin{pmatrix} \rho \\ j \\ q \end{pmatrix}.$$

Proposition 3.3.7 (Densité M2)

La densité de la fonction de distribution M2 est

$$\rho = \frac{1}{2\sqrt{|\gamma|}} e^{\alpha+\gamma} \begin{cases} e^{\beta} \mathbf{F}_+ \left(\sqrt{|\gamma|} + \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) - e^{-\beta} \mathbf{F}_+ \left(-\sqrt{|\gamma|} + \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) & \gamma > 0 \\ e^{-\beta} \mathbf{F}_- \left(-\sqrt{|\gamma|} - \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) - e^{\beta} \mathbf{F}_- \left(\sqrt{|\gamma|} - \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) & \gamma < 0 \end{cases}, \quad (3.55)$$

où \mathbf{F}_+ est la fonction de Dawson et \mathbf{F}_- est la fonction d'erreur complémentaire (à une constante près) qui sont définies pour tout $x \in \mathbb{R}$ par

$$\mathbf{F}_+(x) = e^{-x^2} \int_0^x e^{t^2} dt \quad \text{et} \quad \mathbf{F}_-(x) = e^{x^2} \int_x^{+\infty} e^{-t^2} dt.$$

Démonstration : Montrons ce résultat dans le cas où $\gamma \geq 0$. La densité est

$$\begin{aligned} \rho &= \langle e^{\alpha+\beta v+\gamma v^2} \rangle \\ &= \frac{1}{2} e^{\alpha} \int_{-1}^1 e^{\beta v+\gamma v^2} dv \\ &= \frac{1}{2} e^{\alpha} e^{-\frac{\beta^2}{4\gamma}} \int_{-1}^1 e^{\gamma(v+\frac{\beta}{2\gamma})^2} dv \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} e^{\alpha} e^{-\frac{\beta^2}{4\gamma}} \int_{-\sqrt{\gamma}+\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}^{\sqrt{\gamma}+\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}} e^{u^2} du \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} e^{\alpha+\gamma} \left[e^{\beta} \mathbf{F}_+ \left(\sqrt{|\gamma|} + \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) - e^{-\beta} \mathbf{F}_+ \left(-\sqrt{|\gamma|} + \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) \right]. \quad \blacksquare \end{aligned} \quad (3.56)$$

Dans la limite où la fonction de distribution M2 est une fonction de distribution M1 ($\gamma = 0$), les expressions de la densité sont, en apparence, mal définies. Pour lever cette indétermination, une étude asymptotique est réalisée.

Lemme 3.3.1

Les développements asymptotiques à l'ordre n de la fonction de Dawson et de la fonction d'erreur complémentaire sont

$$\text{pour } x \text{ grand, } F_+(x) = \frac{1}{2x} \left(1 + \sum_{j=1}^n \frac{(2j-1)!!}{2^j x^{2j}} \right) = \frac{1}{2x} \left(1 + \frac{1}{2x^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{x^4}\right) \right), \quad (3.57a)$$

$$\text{pour } x \text{ grand, } F_-(x) = \frac{1}{2x} \left(1 + \sum_{j=1}^n (-1)^j \frac{(2j-1)!!}{2^j x^{2j}} \right) + \sqrt{\pi} e^{x^2} \mathbb{1}_{x \leq 0}. \quad (3.57b)$$

Proposition 3.3.8 (Limite M1)

Lorsque γ tend vers 0, la densité de la fonction de distribution M2 (3.55) tend bien vers la densité de la fonction de distribution M1.

Démonstration : Ce résultat peut être démontré en utilisant les développements asymptotiques précédents. Montrons le dans le cas où γ tend vers 0^+ . Pour γ suffisamment petit, la densité peut être approchée par

$$\rho = \frac{e^{\alpha+\gamma}}{2} \left[\frac{e^\beta}{\beta + 2\gamma} - \frac{e^{-\beta}}{\beta - 2\gamma} \right] + \mathcal{O}(\gamma).$$

Ainsi, lorsque γ tend vers 0^+ , la densité tend vers

$$\rho \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \frac{e^\alpha}{\beta} \sinh \beta,$$

qui est bien la densité de la fonction de distribution M1 exprimée avec les variables entropiques (1.34). ■

Les moments d'ordre supérieur de la fonction de distribution M2 s'expriment à partir de la densité et des variables entropiques et conservatives.

Proposition 3.3.9 (Moments d'ordre supérieur)

Les moments suivant de la fonction de distribution M2 sont

$$j = \frac{1}{2\gamma} e^{\alpha+\gamma} \sinh \beta - \frac{\beta}{2\gamma} \rho, \quad (3.58a)$$

$$q = \frac{1}{2\gamma} e^{\alpha+\gamma} \cosh \beta - \frac{\beta}{2\gamma} j - \frac{1}{2\gamma} \rho. \quad (3.58b)$$

Démonstration : La densité de courant j est

$$\begin{aligned} j &= \left\langle v e^{\alpha+\beta v+\gamma v^2} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} e^\alpha e^{-\frac{\beta^2}{4\gamma}} \int_{-\sqrt{\gamma+\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}}^{\sqrt{\gamma+\frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}} \left(\frac{u}{\sqrt{\gamma}} - \frac{\beta}{2\gamma} \right) e^{u^2} du \\ &= \frac{1}{2\gamma} \left[\frac{1}{2} e^{\alpha+\gamma} (e^\beta - e^{-\beta}) \right] - \frac{\beta}{2\gamma} \rho \\ &= \frac{1}{2\gamma} e^{\alpha+\gamma} \sinh \beta - \frac{\beta}{2\gamma} \rho. \end{aligned}$$

L'énergie q est

$$\begin{aligned}
 q &= \left\langle v^2 e^{\alpha + \beta v + \gamma v^2} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} e^\alpha e^{-\frac{\beta^2}{4\gamma}} \int_{-\sqrt{\gamma + \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}}^{\sqrt{\gamma + \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}} \left(\frac{u}{\sqrt{\gamma}} - \frac{\beta}{2\gamma} \right)^2 e^{u^2} du \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} e^\alpha e^{-\frac{\beta^2}{4\gamma}} \int_{-\sqrt{\gamma + \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}}^{\sqrt{\gamma + \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}} \frac{1}{\gamma} \left(u^2 - \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}} u \right) e^{u^2} du - \frac{\beta}{2\gamma} j \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{\gamma}} e^\alpha e^{-\frac{\beta^2}{4\gamma}} \left[\frac{1}{2\gamma} \left(u - \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}} \right) e^{u^2} \right]_{-\sqrt{\gamma + \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}}^{\sqrt{\gamma + \frac{\beta}{2\sqrt{\gamma}}}} - \frac{\beta}{2\gamma} j - \frac{1}{2\gamma} \rho \\
 &= \frac{1}{2\gamma} e^{\alpha + \gamma} \cosh \beta - \frac{\beta}{2\gamma} j - \frac{1}{2\gamma} \rho. \quad \blacksquare
 \end{aligned}$$

Proposition 3.3.10 (*Limite M1*)

Lorsque γ tend vers 0, les deux moments suivants (j, q) de la fonction de distribution M2 tendent vers les expressions des moments de la fonction de distribution M1.

Démonstration : Ce résultat peut être prouvé en utilisant les mêmes développements asymptotiques que précédemment. Néanmoins, il est nécessaire de pousser le développement de la densité à un ordre supérieur pour j et à deux ordres supérieur pour q . Pour γ suffisamment petit et positif, la densité de courant est

$$\begin{aligned}
 j &= \frac{e^{\alpha + \gamma}}{4\gamma} (e^\beta - e^{-\beta}) - \frac{\beta}{2\gamma} \rho, \\
 &= \frac{e^{\alpha + \gamma}}{2} \left[\frac{e^\beta}{\beta + 2\gamma} + \frac{e^{-\beta}}{\beta - 2\gamma} - \left(\frac{\beta e^\beta}{(\beta + 2\gamma)^3} - \frac{\beta e^{-\beta}}{(\beta - 2\gamma)^3} \right) \right] + \mathcal{O}(\gamma), \\
 &\xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \frac{e^\alpha}{\beta} \sinh \beta \left(\coth \beta - \frac{1}{\beta} \right) = \langle v e^{\alpha + \beta v} \rangle.
 \end{aligned}$$

Celle-ci tend donc bien vers la bonne limite 1.34. De même pour le dernier moment, son expression asymptotique est

$$\begin{aligned}
 q &= \frac{e^{\alpha + \gamma}}{4\gamma} (e^\beta + e^{-\beta}) - \frac{\beta}{2\gamma} j - \frac{1}{2\gamma} \rho, \\
 &= \frac{e^{\alpha + \gamma}}{2} \left[\frac{e^\beta}{\beta + 2\gamma} - \frac{e^{-\beta}}{\beta - 2\gamma} - 2 \left(\frac{\beta e^\beta}{(\beta + 2\gamma)^3} + \frac{\beta e^{-\beta}}{(\beta - 2\gamma)^3} \right) + 2 \left(\frac{\beta^2 e^\beta}{(\beta + 2\gamma)^5} - \frac{\beta^2 e^{-\beta}}{(\beta - 2\gamma)^5} \right) \right] \\
 &\quad + \mathcal{O}(\gamma), \\
 &\xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \frac{e^\alpha}{\beta} \sinh \beta \left(1 - \frac{2}{\beta} \left(\coth \beta - \frac{1}{\beta} \right) \right) = \langle v^2 e^{\alpha + \beta v} \rangle.
 \end{aligned}$$

Le dernier moment q tend aussi bien vers la bonne limite (1.38). ■

Sur la figure 3.4, les moments de la fonction de distribution M2 sont représentés en fonction des variables entropiques. La première variable entropique est éliminée et remplacée par la densité grâce à (3.55).

Numériquement, il apparaît que le calcul des moments devient impossible lorsque le quotient $\frac{|\beta|}{\sqrt{\gamma}}$ est trop grand du fait des erreurs d'arrondis dans l'évaluation des fonctions spéciales. De ce fait, il est préférable d'utiliser les développements asymptotiques de F_\pm pour évaluer la densité dans cette limite.

Pour cela, le choix du nombre de terme dans le développement est délicat. La première contrainte est que pour retrouver la limite M1, il est nécessaire d'utiliser un développement

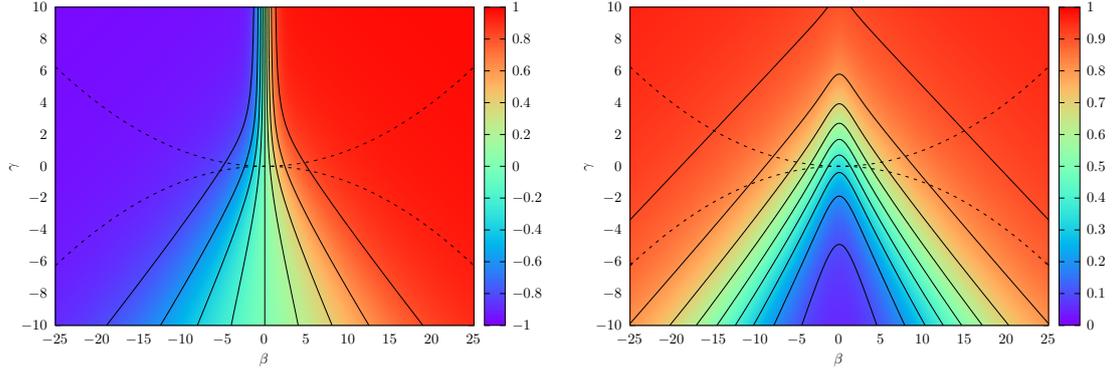


FIGURE 3.4 – Densité de courant et énergie en fonction de (β, γ) pour $\rho = 1$. La zone entre les courbes en pointillée correspond à l'endroit où les développements asymptotiques doivent être utilisés

à l'ordre 3 minimum (comme cela a été mis en évidence dans l'analyse asymptotique). Cependant, les développements ne sont pas convergents¹. Le problème étant que pour pouvoir utiliser ce nombre minimum de termes, la zone où les développements doivent être utilisés doit être suffisamment restreinte pour que ceux-ci convergent. Expérimentalement, nous avons constaté qu'en utilisant une arithmétique double précision, il n'est pas possible d'utiliser à la fois le nombre suffisant de terme et d'avoir des développements convergents partout. En employant une arithmétique quadruple précision, la zone où les développements doivent être employés est réduite et une dizaine de termes peuvent être utilisés dans le développement.

Maintenant que les variables conservatives ont été exprimées en fonction des variables entropique, une méthode numérique doit être proposée pour résoudre l'équation (3.54). Une première manière de procéder est d'utiliser l'algorithme de Newton. Dans de nombreux cas, cette méthode n'est pas assez robuste et converge difficilement. Pour contourner ce problème, commençons par réécrire l'équation (3.54).

Proposition 3.3.11

Le vecteur des variables entropiques est solution de

$$\nabla J(\mathbf{\Lambda}) = \mathbf{0}, \quad (3.59)$$

où $J(\mathbf{\Lambda}) = \langle \exp(\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m}) \rangle - \mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{U}$.

Démonstration : Le gradient de la fonctionnelle J est

$$\frac{\partial J}{\partial \Lambda_i}(\mathbf{\Lambda}) = \langle m_i \exp(\mathbf{\Lambda} \cdot \mathbf{m}) \rangle - U_i = 0. \quad \blacksquare$$

Ce résultat montre que $\mathbf{\Lambda}$ peut être calculé en utilisant un simple algorithme de descente de gradient. Cette méthode se révèle bien plus robuste. Par souci de simplicité, le pas est choisi constant mais la convergence pourrait être améliorée en utilisant l'algorithme du gradient à pas optimal ou du gradient conjugué par exemple.

1. Les développements des fonctions spéciales ne sont pas convergents dans le sens où les séries divergent quelque soit x . Plus x est grand, plus il est possible de prendre un nombre important de termes pour améliorer la précision.

Calcul des flux Les flux d'UGKS-M2 s'expriment en fonction des demi-moments de la fonction de distribution M2. Ceux-ci prennent une forme similaire aux moments totaux :

$$\rho^\pm = \langle \hat{f} \mathbb{1}_{v \geq 0} \rangle = \frac{\pm 1}{2\sqrt{|\gamma|}} e^\alpha \begin{cases} e^{\pm\beta+\gamma} F_+ \left(\pm\sqrt{|\gamma|} + \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) - F_+ \left(\frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) & \gamma > 0 \\ F_- \left(\frac{-\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) - e^{\pm\beta+\gamma} F_- \left(\pm\sqrt{|\gamma|} - \frac{\beta}{2\sqrt{|\gamma|}} \right) & \gamma < 0 \end{cases}, \quad (3.60a)$$

$$j^\pm = \langle v \hat{f} \mathbb{1}_{v \geq 0} \rangle = \frac{\pm 1}{4\gamma} e^\alpha (e^{\pm\beta+\gamma} - 1) - \frac{\beta}{2\gamma} \rho^\pm, \quad (3.60b)$$

$$q^\pm = \langle v^2 \hat{f} \mathbb{1}_{v \geq 0} \rangle = \frac{1}{4\gamma} e^{\alpha \pm \beta + \gamma} - \frac{\beta}{2\gamma} j^\pm - \frac{1}{2\gamma} \rho^\pm, \quad (3.60c)$$

$$k^\pm = \langle v^3 \hat{f} \mathbb{1}_{v \geq 0} \rangle = \frac{\pm 1}{4\gamma} \frac{\gamma - 1}{\gamma} e^\alpha (e^{\pm\beta+\gamma} - 1) - \frac{\beta}{2\gamma} q^\pm + \frac{\beta}{2\gamma^2} \rho^\pm. \quad (3.60d)$$

Là encore, lorsque $\frac{\beta}{\sqrt{\gamma}}$ est trop grand, les développements asymptotiques des fonctions spéciales doivent être utilisés ainsi que l'arithmétique quadruple précision.

3.3.3.2 UGKS-Pn

Les modèles aux moments Pn sont les modèles d'ordre supérieur après P1. Ils sont obtenus en développant la fonction de distribution sur la base des polynômes de Legendre puis en tronquant ce développement à un certain ordre (voir section 1.2.4.2). Dans ce cas, il est naturel de considérer une hiérarchie de moments construite à partir de cette même base, dont les éléments sont regroupés dans le vecteur $\mathbf{m}(v) = (P_i(v))_{i \leq n}$. Le terme source est alors diagonal et donné par (1.18). La fonction de distribution Pn est

$$\hat{f}(\mathbf{\Lambda}) = \sum_{j=0}^n (2j+1) U_j P_j. \quad (3.61)$$

Le j-ème flux d'UGKS-Pn est obtenu en intégrant le flux microscopique d'UGKS contre le j-ème vecteur de la base des polynômes de Legendre :

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2}^{(j)} &= A_{i+1/2} \langle v P_j \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v P_j \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \\ &+ C_{i+1/2} \langle P_1 P_j \rangle \rho_{i+1/2}^n + \frac{D}{\Delta x} \left\langle \left(\frac{2}{3} P_2 + \frac{1}{3} P_0 \right) P_j \right\rangle (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Les termes devant les coefficients $C_{i+1/2}$ et $D_{i+1/2}$ n'apparaissent que dans les premiers flux (par orthogonalité des polynômes de Legendre). Il reste désormais à exprimer les demi-moments de la fonction de distribution PN :

$$\langle v P_j \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle = \sum_{k=0}^n (2k+1) \langle v P_j P_k \mathbb{1}_{v>0} \rangle U^{(k)}. \quad (3.63)$$

Les produits scalaires entre les polynômes de Legendre n'ont *a priori* pas d'expression analytique simple. Ils peuvent cependant être calculés (de manière exacte par opération sur les polynômes) une unique fois dans le code de calcul pour réduire le coût numérique.

3.4 Réalisabilité des schémas pour les modèles aux moments

3.4.1 Principe général

Dans cette section, la réalisabilité des schémas pour les modèles aux moments obtenus avec UGKS est discutée. Tout d'abord, il apparaît que le vecteur des variables conservatives

\mathbf{U}_i^{n+1} ne peut être calculé que si \hat{f}_i^n est bien défini dans toutes les cellules. Cela implique donc que le vecteur des moments \mathbf{U}_i^n soit réalisable. Le schéma ne peut être itéré que si cette propriété reste vérifiée à chaque instant. Autrement dit, il doit être prouvé que si \mathbf{U}_i^n est réalisable alors \mathbf{U}_i^{n+1} l'est aussi. Un schéma qui vérifie cela est dit réalisable. Dans le cas de la méthode proposée dans ce chapitre, cette propriété pourrait être obtenue avec un argument assez simple (voir [19]). En effet, le schéma peut s'écrire sous la forme

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \langle \mathbf{m} f_i^{n+1} \rangle, \quad (3.64)$$

où f_i^{n+1} est obtenu après une itération en temps d'UGKS à partir de \hat{f}_i^n . Si f_i^{n+1} est positif, alors \mathbf{U}_i^{n+1} est réalisable (voir définition 1.2.2). Par conséquent la réalisabilité du schéma peut se réduire à la question de la positivité d'UGKS, du moins avec une donnée initiale ayant une certaine forme (par exemple M1). Cette question va être discutée dans les parties suivantes dans le cas particulier d'UGKS-M1. La question semble plus délicate pour UGKS-Pn puisque la fonction de distribution Pn n'est pas nécessairement positive². Le cas d'UGKS-M2 n'est pas traité.

3.4.2 Positivité d'UGKS

D'une manière générale, UGKS ne préserve pas la positivité de la fonction de distribution lorsque Δt tends vers 0. Ce résultat est ici mis en évidence pour la version minimale du schéma (sans la partie affine de la reconstruction de la fonction de distribution) pour la donnée initiale suivante :

$$\forall v \in [-1, 1], f_i^0(v) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j + 1 \\ \frac{1}{2\delta} \mathbb{1}_{v \in [a-\delta, a+\delta]} & \text{sinon} \end{cases}, \quad (3.65)$$

où $(a, \delta) \in \mathbb{R}_- \times \mathbb{R}_+$. Le domaine est entièrement constitué de vide sauf dans la maille $j + 1$ où la distribution est un créneau. En utilisant les développements asymptotiques des coefficients d'intégration (3.18), il est possible de montrer que la densité et la fonction de distribution en $v = 1$ à l'instant t_1 dans la maille j sont

$$\rho_j^1 = \frac{\Delta t}{\eta \Delta x} \langle -v^- f_{j+1}^0 \rangle + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (3.66a)$$

$$(1 + \Delta t \nu) f_j^1(1) = -\frac{\Delta t^2}{\Delta x} \frac{\nu}{2\eta} \rho_{j+1/2}^0 - \frac{\Delta t^2}{\Delta x} \frac{\nu}{\eta} \langle v^- f_{j+1}^0 \rangle + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (3.66b)$$

où $\rho_{j+1/2}^0 = \langle f_{j+1}^0 \mathbb{1}_{v < 0} \rangle$. Si δ est suffisamment petit par rapport à a alors $\rho_{j+1/2}^0 = 1$ et $\langle -v^- f_{j+1}^0 \rangle = a$. Finalement, la fonction de distribution vérifie

$$(1 + \Delta t \nu) f_j^1(1) = \frac{\Delta t^2}{\Delta x} \frac{\nu}{\eta} \left(a - \frac{1}{2} \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (3.67)$$

Si $a < \frac{1}{2}$ alors la fonction de distribution devient négative pour Δt suffisamment petit.

3.4.3 Modification d'UGKS-M1 pour assurer la réalisabilité

Il a été prouvé précédemment que dans certaines situations pathologiques, la positivité d'UGKS ne peut pas être assurée quand le pas de temps Δt tend vers 0. Par conséquent la

2. La projection d'une fonction de distribution positive sur l'espace Pn ne donne pas forcément une fonction de distribution positive.

réalisabilité du schéma cinétique UGKS-M1 sous-jacent n'est pas garantie. Dans le contre-exemple évoqué, le terme qui engendre une fonction de distribution négative est la densité à l'interface $\rho_{i+1/2}^n$ qui correspond à la partie constante de la reconstruction de la densité. Qualitativement, il peut être remarqué que du fait du caractère constant en temps de la reconstruction, à l'instant $t = t_n$ des particules sont créées ou retirées de part et d'autre de l'interface. Du fait du processus de collision, une partie de ces particules créées peuvent "vider" un certain groupe de vitesse d'une manière trop importante et donc induire une fonction de distribution négative.

L'idée principale présentée ici pour corriger ce problème, consiste à considérer une reconstruction instationnaire de la densité pour introduire progressivement ces particules problématiques. Une telle modification semble possible puisque le schéma offre suffisamment de flexibilité au niveau de la reconstruction de la densité. En effet d'un point de vue formel, la seule contrainte pour obtenir un schéma AP porte sur la présence des pentes dans la reconstruction. En pratique, la modification consiste à introduire deux densités à l'interface $\rho_{i+1/2}^{n\pm}(t)$, *a priori* différentes et dépendantes du temps. La reconstruction est alors affine par demi-maillages (voir figure 3.5).

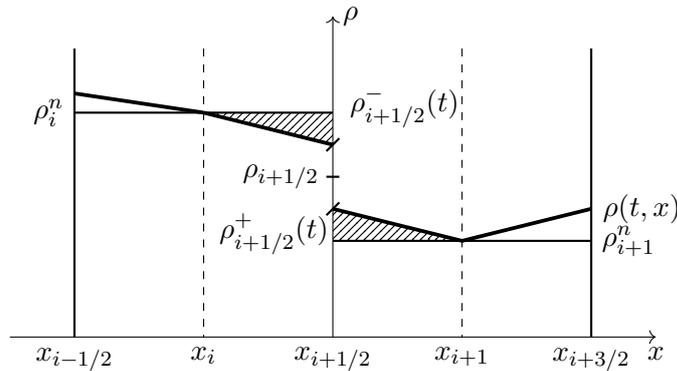


FIGURE 3.5 – Graphique représentant la reconstruction de la densité autour de l'interface $x_{i+1/2}$ à un instant $t > t_n$

À l'instant initial $t = t_n$, les pentes doivent être nulles pour éviter la création de particules et donc $\rho_{i+1/2}^{n-}$ doit être égal à ρ_i^n (respectivement $\rho_{i+1/2}^{n+} = \rho_{i+1}^n$). À l'instant final, les deux densités à l'interface doivent être égales pour obtenir un bon comportement asymptotique. Afin de satisfaire à ces deux conditions, une combinaison convexe peut être utilisée, dans laquelle une fonction dépendante du temps doit être choisie pour décrire la transition. Un choix naturel consiste à introduire les particules au même rythme que celui du mécanisme de collision, qui suit une loi de probabilité exponentielle en la fréquence de collision. Les densités à l'interface adoptées sont donc

$$\rho_{i+1/2}^{n-}(t) = \rho_i^n e^{-\nu(t-t_n)} + \rho_{i+1/2}^n (1 - e^{-\nu(t-t_n)}), \quad (3.68a)$$

$$\rho_{i+1/2}^{n+}(t) = \rho_{i+1}^n e^{-\nu(t-t_n)} + \rho_{i+1/2}^n (1 - e^{-\nu(t-t_n)}). \quad (3.68b)$$

À partir de celle-ci, la reconstruction instationnaire de la densité est

$$\rho(t, x) = \begin{cases} \rho_{i+1/2}^{n-}(t) + \delta_x^L \rho_{i+1/2}^n(t)(x - x_{i+1/2}) & \text{si } x < x_{i+1/2} \\ \rho_{i+1/2}^{n+}(t) + \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n(t)(x - x_{i+1/2}) & \text{si } x > x_{i+1/2} \end{cases}, \quad (3.69)$$

où les pentes, calculées par différences finies, dépendent désormais du temps :

$$\delta_x^L \rho_{i+1/2}^{n-}(t) = \frac{\rho_{i+1/2}^{n-}(t) - \rho_i^n}{\Delta x/2}, \quad \delta_x^R \rho_{i+1/2}^{n+}(t) = \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_{i+1/2}^{n+}(t)}{\Delta x/2}. \quad (3.70)$$

Proposition 3.4.1 (UGKS modifié)

A partir des reconstructions (3.9)-(3.69), le flux microscopique d'UGKS est

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2}(v) = & A_{i+1/2} v \left(f_i^{n(+)} \mathbb{1}_{v>0} + f_{i+1}^{n(-)} \mathbb{1}_{v<0} \right) \\ & + B_{i+1/2} v^2 (\delta_x f_i^n \mathbb{1}_{v>0} + \delta_x f_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0}) \\ & + C_{i+1/2} v \rho_{i+1/2}^n \\ & + D_{i+1/2} v^2 (\delta_x^L \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v>0} + \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v<0}) \\ & + \frac{2F_{i+1/2}}{\Delta x} v (-\delta_x^L \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v>0} + \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v<0}) \\ & + G_{i+1/2} v^2 (-\delta_x^L \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v>0} + \delta_x^R \rho_{i+1/2}^n \mathbb{1}_{v<0}), \end{aligned} \quad (3.71)$$

où les coefficients d'intégrations supplémentaires sont

$$F(\Delta t, \eta, \epsilon, \sigma) = -\frac{1}{\eta} \left[e^w + \frac{1 - e^w}{w} \right], \quad (3.72a)$$

$$G(\Delta t, \eta, \epsilon, \sigma) = -\frac{\epsilon}{2\sigma\eta} \left[w e^w - 2 \left(e^w + \frac{1 - e^w}{w} \right) \right]. \quad (3.72b)$$

Démonstration : La nouvelle reconstruction de la densité se traduit comme une correction de l'ancienne (3.11), dans laquelle deux nouveaux termes apparaissent. Le flux numérique d'UGKS contient donc deux termes supplémentaires. Le calcul de ceux-ci est détaillé dans l'annexe A. ■

Proposition 3.4.2 (Flux macroscopique d'UGKS)

Le nouveau flux macroscopique d'UGKS est

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2} = & A_{i+1/2} \left\langle v f_i^{n(+)} \mathbb{1}_{v>0} + v f_{i+1}^{n(-)} \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \\ & + B_{i+1/2} \left\langle v^2 \delta_x f_i^n \mathbb{1}_{v>0} + v^2 \delta_x f_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \right\rangle \\ & + \left(\frac{-D_{i+1/2}}{3\Delta x} + \frac{F_{i+1/2}}{4} \right) (\rho_i^n - \rho_{i+1}^n) \\ & + \frac{G_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_i^n - 2\rho_{i+1/2}^n - \rho_{i+1}^n). \end{aligned} \quad (3.73)$$

Proposition 3.4.3 (Préservation de l'asymptotique)

La nouvelle version d'UGKS préserve l'asymptotique.

Démonstration : Les développements limités des nouveaux coefficients d'intégrations en $w = 0$ sont

$$F = -\frac{w}{2\eta} + \mathcal{O}(w^2), \quad G = -\frac{\epsilon w^2}{6\sigma\eta} + \mathcal{O}(w^3).$$

Ainsi le flux de transport n'est pas affecté. De plus lorsque $\eta = \epsilon$, les limites en $\epsilon = 0$ sont

$$F(\Delta t, \epsilon, \epsilon, \sigma) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0, \quad D(\Delta t, \epsilon, \epsilon, \sigma) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0.$$

Le flux de diffusion reste donc lui aussi inchangé. ■

La propriété de réalisabilité d'UGKS-M1 est prouvée pour le schéma minimal dans lequel la partie affine de la reconstruction de la fonction de distribution est retirée. Par ailleurs, le terme en $G_{i+1/2}$ est négligé dans les flux. Tout d'abord puisque celui-ci semble avoir un effet mineur dans les flux (le terme associé est en particulier nul dans le flux macroscopique si la définition arithmétique de la densité à l'interface est adoptée). Mais aussi, puisque cette correction d'ordre supérieur ne semble pas altérer les propriétés du schéma. Par la suite, la définition cinétique de la densité à l'interface est utilisée (3.12). Dans un premier temps, montrons le résultat suivant.

Lemme 3.4.1

Le demi-flux de la fonction de distribution M1 est

$$\langle v \hat{f} \mathbb{1}_{v>0} \rangle = \mu(\beta) \rho^+, \quad (3.74)$$

où $\rho^+ = \langle \hat{f} \mathbb{1}_{v>0} \rangle$ est la demi-densité et $\mu : x \mapsto \frac{e^x}{e^x - 1} - \frac{1}{x}$.

Démonstration : Le demi flux est

$$\begin{aligned} \langle v \hat{f} \mathbb{1}_{v>0} \rangle &= \rho \frac{\beta}{2 \sinh \beta} \int_0^1 v e^{\beta v} dv \\ &= \rho \frac{\beta}{2 \sinh \beta} \frac{e^\beta - 1}{\beta} \left(\frac{e^\beta}{e^\beta - 1} - \frac{1}{\beta} \right) \\ &= \mu(\beta) \rho^+. \end{aligned} \quad \blacksquare$$

Théorème 3.4.1 (Préservation de la réalisabilité)

Si l'opacité σ est constante dans la domaine alors la version modifiée d'UGKS-M1 d'ordre 1 en espace préserve la réalisabilité des moments sous les conditions suivantes :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{A(w) + \frac{F(w)}{2} - \frac{2D(w)}{3\Delta x}} + \frac{\Delta t}{w} \frac{2F(w) + C(w) - \frac{4D(w)}{\Delta x}}{A(w) + \frac{F(w)}{2} - \frac{2D(w)}{3\Delta x}}, \quad (3.75a)$$

$$0 \leq -w \left(\min_i \mu(-|\beta_i^n|) A(w) + \frac{F(w)}{4} - \frac{D(w)}{3\Delta x} \right) + \frac{\sigma}{\epsilon} D(w), \quad (3.75b)$$

où μ est la fonction introduite dans le lemme précédent.

Démonstration : Supposons qu'à l'instant t_n la fonction de distribution M1 (\hat{f}_i^n) est bien définie partout. Le schéma écrit sous forme développée permet d'exprimer la densité et la fonction de distribution à l'instant suivant :

$$\begin{aligned} \rho_i^{n+1} &= \left(1 + \frac{2D\Delta t}{3\Delta x^2} - \frac{F\Delta t}{2\Delta x}\right) \rho_i^n + \left(\frac{F\Delta t}{4\Delta x} - \frac{D\Delta t}{3\Delta x^2}\right) (\rho_{i-1}^n + \rho_{i+1}^n) \\ &\quad + \frac{A\Delta t}{\Delta x} \left(\langle |v| \hat{f}_{i-1}^n \mathbb{1}_{v>0} + |v| \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle - \langle |v| \hat{f}_i^n \rangle \right), \end{aligned} \quad (3.76a)$$

$$\begin{aligned} f_i^{n+1} &= \left(1 - v^+ \frac{A\Delta t}{\Delta x} + v^- \frac{A\Delta t}{\Delta x}\right) \hat{f}_i^n + v^+ \frac{A\Delta t}{\Delta x} \hat{f}_{i-1}^n - v^- \frac{A\Delta t}{\Delta x} \hat{f}_{i+1}^n \\ &\quad + v \frac{C\Delta t}{\Delta x} (\rho_{i-1}^{n+} - \rho_i^{n+} + \rho_i^{n-} - \rho_{i+1}^{n-}) \\ &\quad - v^2 \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} ((\rho_{i+1}^{n-} - 2\rho_i^{n-} + \rho_{i-1}^{n-}) \mathbb{1}_{v>0} + (\rho_{i+1}^{n+} - 2\rho_i^{n+} + \rho_{i-1}^{n+}) \mathbb{1}_{v<0}) \\ &\quad + |v| \frac{F\Delta t}{\Delta x} ((\rho_{i+1}^{n-} - 2\rho_i^{n-} + \rho_{i-1}^{n-}) \mathbb{1}_{v>0} + (\rho_{i+1}^{n+} - 2\rho_i^{n+} + \rho_{i-1}^{n+}) \mathbb{1}_{v<0}) \\ &\quad + \Delta t \nu (\rho_i^{n+1} - f_i^{n+1}). \end{aligned} \quad (3.76b)$$

Il est possible de montrer que les coefficients (A, C, F) sont de signe positif et que D est de signe négatif (voir figure 3.2). Tout d'abord, exhibons une condition suffisante pour que la densité reste positive. Pour cela, il est nécessaire de contrôler le terme de flux issu du transport $-A \langle |v| \hat{f}_i^n \rangle$. Comme $v \in [-1, 1]$, celui-ci est borné par ρ_i^n , ainsi la densité au temps t_{n+1} est minorée par :

$$\rho_i^{n+1} \geq \left(1 + \frac{2D\Delta t}{3\Delta x^2} - \frac{F\Delta t}{2\Delta x} - \frac{A\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_i^n + \left(\frac{F\Delta t}{4\Delta x} - \frac{D\Delta t}{3\Delta x^2}\right) (\rho_{i-1}^n + \rho_{i+1}^n). \quad (3.77)$$

Le coefficient D étant négatif, cette quantité est alors positive si la condition suffisante suivante est vérifiée :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{A + \frac{F}{2} - \frac{2D}{3\Delta x}}. \quad (3.78)$$

Faisons de même avec la fonction de distribution et minorons la par une quantité qui reste positive sous conditions. Les termes négatifs à contrôler sont : les demi-densité $\rho_i^{n\pm}$ dans les laplaciens discrets (devant les termes en D et en F), une demi-densité $\rho_i^{n\pm}$ positive ou négative ainsi qu'une demi-densité $\rho_{i\pm 1}^{n\pm}$ en $i \pm 1$ (devant le terme en C). Les termes positifs (comme par exemple $v^- \frac{A\Delta t}{\Delta x} \hat{f}_i^n$) qui ne permettent pas de contrôler les autres termes négatifs ne sont pas utiles à l'analyse et ne sont donc pas considérés par la suite (par soucis de lisibilité). La première minoration de (3.76b) est alors

$$\begin{aligned} (1 + \Delta t \frac{\sigma}{\epsilon^2}) f_{i,j}^{n+1} &\geq (1 - \frac{A\Delta t}{\Delta x}) \hat{f}_{i,j}^n \\ &+ \left(-v^2 \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} + |v| \frac{F\Delta t}{\Delta x}\right) (\rho_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v>0} + \rho_{i-1}^{n+} \mathbb{1}_{v<0}) - |v| \frac{C\Delta t}{\Delta x} (\rho_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v>0} + \rho_{i-1}^{n+} \mathbb{1}_{v<0}) \\ &- 2 \left(-v^2 \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} + |v| \frac{F\Delta t}{\Delta x} + |v| \frac{C\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_i^n \\ &+ \Delta t \nu \rho_i^{n+1}. \end{aligned}$$

Le terme sur la première ligne est issu du transport et ne pose pas de problème particulier. Sur la deuxième ligne les termes positifs positifs et négatifs en rapport avec $\rho_{i\pm 1}^{n\pm}$ sont regroupés. Enfin sur la troisième ligne tous les termes négatifs en ρ_i^n sont écrits. Ceux-ci sont obtenus en majorant les demi-densités par la densité totale.

Tout d'abord, la deuxième ligne peut être réécrite en observant que $F - C = \frac{\sigma}{\epsilon} D$. Ensuite, les termes négatifs de la troisième ligne doivent être contrôlés avec le terme issu de la collision $\Delta t \nu \rho_i^{n+1}$. L'expression de la densité à l'instant suivant (3.76) est donc employée. La nouvelle expression du minorant est alors (en majorant la vitesse par 1 pour les termes négatifs) :

$$\begin{aligned} (1 + \Delta t \frac{\sigma}{\epsilon^2}) f_{i,j}^{n+1} &\geq (1 - \frac{A\Delta t}{\Delta x}) \hat{f}_{i,j}^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\frac{\sigma}{\epsilon} D + \Delta t \nu \left(\frac{F}{4} - \frac{D}{3\Delta x}\right)\right) (\rho_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v>0} + \rho_{i-1}^{n+} \mathbb{1}_{v<0}) \\ &+ \frac{A\Delta t}{\Delta x} \Delta t \nu \left(|v| \hat{f}_{i-1}^n \mathbb{1}_{v>0} + |v| \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0}\right). \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(-2F - C + \frac{4D}{\Delta x} + \Delta t \nu \left(1 + \frac{2D}{3\Delta x} - \frac{F}{2} - A\right)\right) \rho_i^n \end{aligned}$$

Les demi-flux des fonctions de distribution M1 peuvent être exprimés en fonction des demi-densités grâce au lemme 3.4.1. Ce qui donne finalement :

$$\begin{aligned} (1 + \Delta t \frac{\sigma}{\epsilon^2}) f_{i,j}^{n+1} &\geq (1 - \frac{A\Delta t}{\Delta x}) \hat{f}_{i,j}^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(-2F - C + \frac{4D}{\Delta x} + \Delta t \nu \left(1 + \frac{2D}{3\Delta x} - \frac{F}{2} - A\right)\right) \rho_i^n \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\frac{\sigma}{\epsilon} D + \Delta t \nu \left(A\mu(\beta_{i+1}) + \frac{F}{4} - \frac{D}{3\Delta x}\right)\right) \rho_{i+1}^{n-} \mathbb{1}_{v>0} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\frac{\sigma}{\epsilon} D + \Delta t \nu \left(A\mu(-\beta_{i-1}) + \frac{F}{4} - \frac{D}{3\Delta x}\right)\right) \rho_{i-1}^{n+} \mathbb{1}_{v<0}. \end{aligned}$$

Chacun des coefficients en facteur doivent être positifs. Les deux premiers donnent les conditions suivantes :

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{A}, \quad (3.79a)$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{A + \frac{F}{2} - \frac{2D}{3\Delta x}} + \frac{\Delta t}{w} \frac{2F + C - \frac{4D}{\Delta x}}{A + \frac{F}{2} - \frac{2D}{3\Delta x}}. \quad (3.79b)$$

Les conditions (3.78)-(3.79a) sont redondantes avec (3.79b). En effet, si cette dernière est vérifiée alors les deux autres le sont. Seulement celle-ci est donc retenue. Finalement, il ne reste qu'à traduire la positivité des deux derniers termes. Comme la condition doit être vérifiée pour toutes les mailles, seulement le cas le plus défavorable est retenu :

$$\forall i, 0 \leq -w \left(\min_i \mu(-|\beta_i^n|) A(w) + \frac{F(w)}{4} - \frac{D(w)}{3\Delta x} \right) + \frac{\sigma}{\epsilon} D(w). \quad (3.80) \quad \blacksquare$$

Dans les deux conditions suffisantes (3.75a)-(3.75b), les coefficients (A, B, C, F) dépendent de $w = -\nu \Delta t = -\frac{\sigma}{\epsilon \eta} \Delta t$ et donc du pas de temps. Il est donc nécessaire de démontrer qu'il existe toujours un pas de temps sous lequel ces deux conditions sont satisfaites. Tout d'abord, montrons le résultat suivant.

Lemme 3.4.2

Les coefficient A et D (3.15) vérifient la relation suivante :

$$\frac{\frac{\sigma \eta}{\epsilon} D}{-w \eta A} = z\left(\frac{w}{2}\right), \quad (3.81)$$

où $z : x \mapsto \coth x - \frac{1}{x}$ est la même fonction (1.33) que celle intervenant dans la fermeture M1.

Démonstration : Le quotient des coefficients normalisés vaut :

$$\begin{aligned} \frac{\frac{\sigma \eta}{\epsilon} D}{-w \eta A} &= -\frac{1 + e^w + 2\frac{1-e^w}{w}}{1 - e^w} \\ &= -\coth\left(-\frac{w}{2}\right) - \frac{2}{w} \\ &= z\left(\frac{w}{2}\right). \quad \blacksquare \end{aligned}$$

Proposition 3.4.4 (*Existence d'un pas de temps*)

Soit $(\eta, \epsilon, \sigma, \Delta x)$ un jeu de paramètres fixé, il existe toujours un pas de temps minimal Δt_0 , en dessous duquel la réalisabilité d'UGKS-M1 est assurée :

$$\Delta t_0 = \min \left(\frac{\eta \Delta x}{\frac{5}{2} + \frac{3\sigma \Delta x}{5\epsilon}}, \frac{2}{\nu} \min_i z^{-1}(\mu(-|\beta_i^n|)) \right). \quad (3.82)$$

Démonstration : Étudions tout d'abord la première condition (3.75a). Celle-ci est réécrite sous la forme

$$\left(A(w) + \frac{F(w)}{2} - \frac{2D(w)}{3\Delta x} \right) \Delta t - \frac{\Delta t}{w} \left(2F(w) + C(w) - \frac{4D(w)}{\Delta x} \right) \leq \Delta x.$$

Le membre de gauche peut être majoré pour obtenir une nouvelle condition suffisante plus restrictive. L'analyse des coefficients (3.15)-(3.72) (écrits sous forme normalisée) montre que

les premiers termes sont majorés par des constantes :

$$\forall w < 0, \quad \eta A(w) + \frac{\eta F(w)}{2} \leq 1, \quad -\sigma \frac{\eta}{\epsilon} D(w) \leq 1,$$

quel que soit (η, ϵ, σ) positifs, de sorte que :

$$A(w) + \frac{F(w)}{2} - \frac{2D(w)}{3\Delta x} \leq \frac{1}{\eta} \left(1 + \frac{2\epsilon}{3\sigma\Delta x} \right).$$

Pour le deuxième terme, des inégalités à l'ordre supérieur sont utilisées pour induire une compensation par w :

$$\forall w < 0, \quad 2\eta F(w) + \eta C(w) \leq \frac{-3}{2}w, \quad -\sigma \frac{\eta}{\epsilon} D(w) \leq -\frac{w}{4},$$

de sorte que :

$$2F(w) + C(w) - \frac{4D(w)}{\Delta x} \leq -\frac{w}{\eta} \left(\frac{3}{2} + \frac{\epsilon}{\sigma\Delta x} \right).$$

En utilisant ces inégalités, le membre de gauche est alors majoré par une quantité dépendant des paramètres physiques multipliée par Δt :

$$\frac{1}{\eta} \left(1 + \frac{2\epsilon}{3\sigma\Delta x} \right) \Delta t + \frac{1}{\eta} \left(\frac{3}{2} + \frac{\epsilon}{\sigma\Delta x} \right) \Delta t \leq \Delta x.$$

Une nouvelle condition suffisante est finalement obtenue à la place de (3.75a) :

$$\Delta t \leq \frac{\eta\Delta x}{\frac{5}{2} + \frac{5\epsilon}{3\sigma\Delta x}}. \quad (3.83)$$

Étudions désormais la deuxième condition (3.75b). Pour établir une nouvelle condition suffisante, le terme $\frac{F}{4} - \frac{D}{3\Delta x}$ est abandonné et nous considérons la condition suffisante, plus restrictive, suivante :

$$-w \min_i \mu(-|\beta_i^n|) A(w) + \frac{\sigma}{\epsilon} D(w) \geq 0.$$

L'objectif est d'isoler le pas de temps dans cette relation. Le lemme précédent permet de montrer que :

$$\min_i \mu(-|\beta_i^n|) \geq z\left(-\frac{w}{2}\right).$$

En composant par la bijection réciproque de la fonction z (qui est strictement croissante), une nouvelle condition suffisante est obtenue à la place de (3.75b) :

$$\Delta t \leq \frac{2}{\nu} \min_i z^{-1}(\mu(-|\beta_i^n|)) = \Delta t^-. \quad (3.84)$$

Le pas de temps minimal Δt_0 est alors le minimum des pas de temps donnés par les deux nouvelles conditions suffisantes (3.83)-(3.84). ■

Le pas de temps minimal (3.82) permet d'assurer la réalisabilité des moments à tout instant. Néanmoins, celui-ci tend vers 0 dans chacun des deux régimes limites et est donc difficilement utilisable en pratique. Par ailleurs, dans le cadre des schémas qui préservent l'asymptotique, il est nécessaire de prouver que la condition de réalisabilité du schéma ne dépend pas du régime.

Proposition 3.4.5 (Stabilité asymptotique)

La réalisabilité d'UGKS-M1 est assurée sous les conditions CFL habituelles dans les régimes de transport et de diffusion.

Démonstration : Tout d'abord étudions la première condition de stabilité (3.75a). Dans le régime de transport (c'est à dire lorsque ϵ tend vers $+\infty$ à η constant), la condition de stabilité limite est obtenue en employant les développements limités des coefficients d'intégration (voir (3.18) et la proposition 3.4.3) dans le membre de droite. Celui-ci tend vers :

$$\eta\Delta x - \frac{3}{2}\Delta t,$$

et la condition (3.75a) peut s'écrire à la limite sous la forme :

$$\Delta t \leq \frac{2}{5}\eta\Delta x.$$

Ce qui donne une condition CFL légèrement plus restrictive que la condition de transport usuelle. Dans le régime de diffusion (c'est à dire $\eta = \epsilon$ et ϵ tend vers 0), une analyse similaire (reposant sur (3.21)-(3.22) et sur la proposition 3.4.3) permet de montrer que la condition de stabilité limite est la condition parabolique usuelle :

$$\Delta t \leq \frac{3}{2}\sigma\Delta x^2.$$

Examinons désormais la deuxième condition de stabilité (3.75b). Le résultat précédent a permis d'établir qu'il était suffisant de vérifier (3.84) pour vérifier (3.75b). Or dans le régime de transport, cette dernière condition n'est pas restrictive puisque le membre de droite de celle-ci tend vers $+\infty$. Il reste désormais à étudier (3.75b) dans le régime de diffusion. Pour ce faire, établissons une dernière condition suffisante. Celle-ci est obtenue en minorant le membre de droite de (3.75b) (en abandonnant les termes en A et en F), ce qui donne :

$$\Delta t \leq w\frac{D}{3\Delta x} + \frac{\sigma}{\epsilon}D(w). \tag{3.85}$$

Dans le régime de diffusion, celle-ci tend vers :

$$\Delta t \geq 3\eta\Delta x = \Delta t^+.$$

Ainsi dans cette limite, cette condition revient à $\Delta t \geq 0$. La deuxième condition de stabilité (3.75b) n'est donc pas restrictive dans les deux limites. ■

Remarque 3.4.1

Au total, deux conditions (3.84)-(3.85) suffisantes pour satisfaire (3.75b) ont été établies. Celles-ci semblent suggérer qu'une plage de pas de temps compris entre Δt^- et Δt^+ n'est pas admissible (voir figure 3.6). Expérimentalement, il apparaît bien que certains pas de temps compris entre ces deux bornes violent la condition (3.75b) dans certains cas pathologiques.

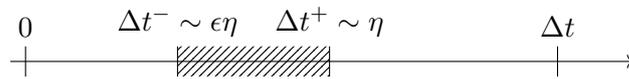


FIGURE 3.6 – Plage des pas de temps admissibles pour satisfaire la deuxième condition de stabilité 3.75b

Enfin, le dernier point à étudier concerne la réalisabilité du schéma lorsque le maillage est raffiné. Lorsque que Δx tend vers 0, l'échelle d'observation s'approche de la description cinétique. De ce fait, une condition hyperbolique doit être retrouvée pour assurer la stabilité.

Remarque 3.4.2 (Convergence en espace)

Lorsque le pas d'espace Δx tend vers 0, la réalisabilité d'UGKS-M1 devrait être assurée sous une condition hyperbolique de stabilité (à paramètres physiques (η, ϵ, σ) fixés), de la

forme :

$$\Delta t \leq \alpha \Delta x, \quad (3.86)$$

où α serait une constante dépendant de (η, ϵ, σ) . En effet, à un nombre de Knudsen fixé, il existe une échelle en espace à partir de laquelle le mécanisme de transport est prépondérant. Pour le moment nous n'avons pas été en mesure de prouver ce résultat.

Cette analyse a permis de montrer que la réalisabilité d'UGKS-M1 peut être assurée sous des conditions raisonnables sur le pas de temps, qui ne sont pas fortement corrélées avec le nombre de Knudsen. En théorie, le pas de temps optimal peut être déterminé numériquement en résolvant les inéquations avec une méthode de Newton. Néanmoins en pratique, l'approximation (3.23) est utilisée par soucis de simplicité. Celle-ci semble fonctionner pour tous les cas de test présentés dans ce chapitre. Sur la figure 3.7, le pas de temps exact donné par (3.75a) est comparé avec celui fourni par l'approximation en fonction du nombre de Knudsen et de l'opacité (pour un pas d'espace donné). Les résultats sont presque identiques, sauf en régime cinétique et pour des fortes opacités où l'approximation est trop optimiste. Par ailleurs en pratique, la deuxième condition de stabilité (3.75b) ne semble pas avoir besoin d'être vérifiée.

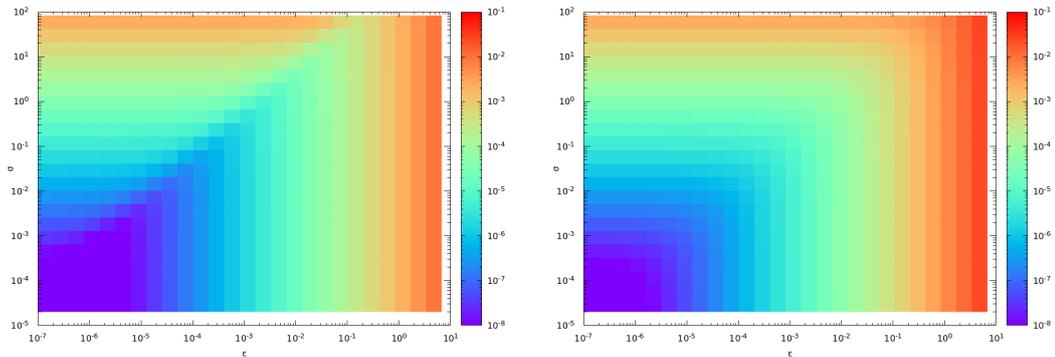


FIGURE 3.7 – Pas de temps donné par la condition exacte (3.75a) et la condition approchée (3.23) en fonction de (ϵ, σ)

3.5 Résultats

Dans cette partie, des résultats numériques sont présentés pour les différents schémas introduits dans ce chapitre. Les schémas pour les modèles aux moments UGKS-M1, UGKS-P1, UGKS-M2 et UGKS-Pn sont comparés avec la solution cinétique. Pour le modèle M1, la solution est aussi comparée avec le schéma HLL préservant l'asymptotique qui a été présenté dans la section 2.5.2. Pour le modèle P1, la solution est comparée au schéma de Godunov. Plusieurs cas de test ont été choisis pour évaluer le schéma dans les différents régimes et vérifier les ordres de convergence. Les paramètres de simulations sont regroupés dans le tableau 3.1.

	η	ϵ	$\sigma(x)$	$f(t, 0, v)$	$f(t, 1, v)$	$\rho(0, x)$	$u(0, x)$
Convergence	1	1	1	Périodique	Périodique	$0.5 + 0.25 \sin(2\pi x)$	0.4
Transport	1	1	1	0	$\mathbb{1}_{v < 0}$	0	0
Intermédiaire	10^{-1}	10^{-1}	1	0	$\mathbb{1}_{v < 0}$	0	0
Diffusion	10^{-8}	10^{-8}	1	$\mathbb{1}_{v > 0}$	0	0	0

TABLE 3.1 – Paramètres de simulation

En pratique, les codes de calculs sont réalisés en Fortran et avec l'interface de programmation OpenMP pour le calcul parallèle des flux. Les solutions cinétiques sont calculées avec UGKS, dans lequel l'espace des vitesses est discrétisé avec 50 points. La formule de quadrature des trapèzes est employée pour évaluer les flux macroscopiques au niveau discret. De plus, la version retenue d'UGKS et d'UGKS pour les modèles aux moments, est celle où la densité à l'interface est calculée avec la moyenne arithmétique $\rho_{i+1/2}^n = (\rho_i^n + \rho_{i+1}^n)/2$. Le domaine spatial $\mathcal{D} = [0, 1]$ est discrétisé avec 200 points. Le pas de temps est donnée par la condition "type CFL" (3.23) dans laquelle le nombre CFL est 0.3.

3.5.1 UGKS-M1

Advection d'une densité sinusoïdale dans un domaine infini

Le premier cas de test a été conçu pour évaluer l'ordre de convergence d'UGKS-M1 en régime cinétique. De ce fait, une donnée régulière est considérée à l'état initial et des conditions de bord périodique sont utilisées. La densité initiale est une sinusoïde et la vitesse $u = \frac{j}{\rho}$ est une constante positive. Les conditions périodiques permettent de modéliser un domaine de taille infini. Sur la figure 3.8, il peut être observé que la sinusoïde est advectée vers la droite. De plus, l'amplitude du signal est réduite de 15% par rapport à l'instant initial. Ce phénomène est dû à la diffusion causée par la relaxation vers la distribution d'équilibre.

D'un point de vue numérique, il apparaît que la solution donnée par le schéma HLL est plus diffuse que celle d'UGKS-M1. Cette diffusion numérique d'HLL est en partie causée par le choix de la vitesse des ondes dans le solveur de Riemann approché. Un choix habituel pour ces vitesses est d'utiliser les valeurs propres extrémales de la Jacobienne du système M1. Cependant, la fermeture M1 n'est pas analytique (pour l'entropie de Boltzmann) et une équation devrait être résolue pour les calculer. Par soucis de simplicité, ces valeurs propres sont donc majorées, ce qui induit de la diffusion numérique.

Pour ce cas de test, la norme L^2 de l'erreur sur la densité $\tilde{\rho} - \rho_{\Delta x}$ est calculée pour la version d'ordre 1 et d'ordre 2 d'UGKS-M1 et est représentée sur la figure 3.9. La solution de référence $\tilde{\rho}$ est évaluée à partir d'une grille suffisamment fine pour que l'erreur par rapport à la solution exacte puisse être supposée négligeable dans l'analyse. Enfin, une régression linéaire est réalisée pour évaluer les ordre de convergence des deux schémas. Sans la partie affine de la reconstruction de la fonction de distribution, le schéma est bien d'ordre 1. Pour la version d'ordre 2, le limiteur de pente de Van Leer est utilisé dans les flux. Dans ce cas, le schéma est d'un ordre légèrement inférieur à 2. D'une manière générale, il est normal de ne pas retrouver exactement l'ordre 2 du fait de la dégradation de l'ordre induit par l'action du limiteur. Dans ce cas, le limiteur intervient de manière négligeable puisque les données initiales sont très régulières. Il est possible que la procédure proposée dans la section 3.3.1.2 dégrade en partie l'ordre, bien que celui-ci reste encore très bon dans les faits.

Formellement, le schéma est d'ordre 2 en espace et en temps dans le régime de transport libre. Dans le régime de diffusion, le schéma est d'ordre 2 en espace et seulement d'ordre 1 en temps. Cependant, du fait de la condition CFL parabolique, l'erreur en temps est contrainte d'être du même ordre que celle en espace. De ce fait, l'utilisation d'un schéma de Runge-Kutta pour l'intégration en temps n'est pas nécessaire. La méthode de Crank-Nicolson (proposée dans la remarque 3.2.1) peut être utilisée pour améliorer la convergence en temps dans les régimes intermédiaires. Pour ce cas test (et les autres), aucune amélioration n'a cependant pu être constatée avec cette correction.

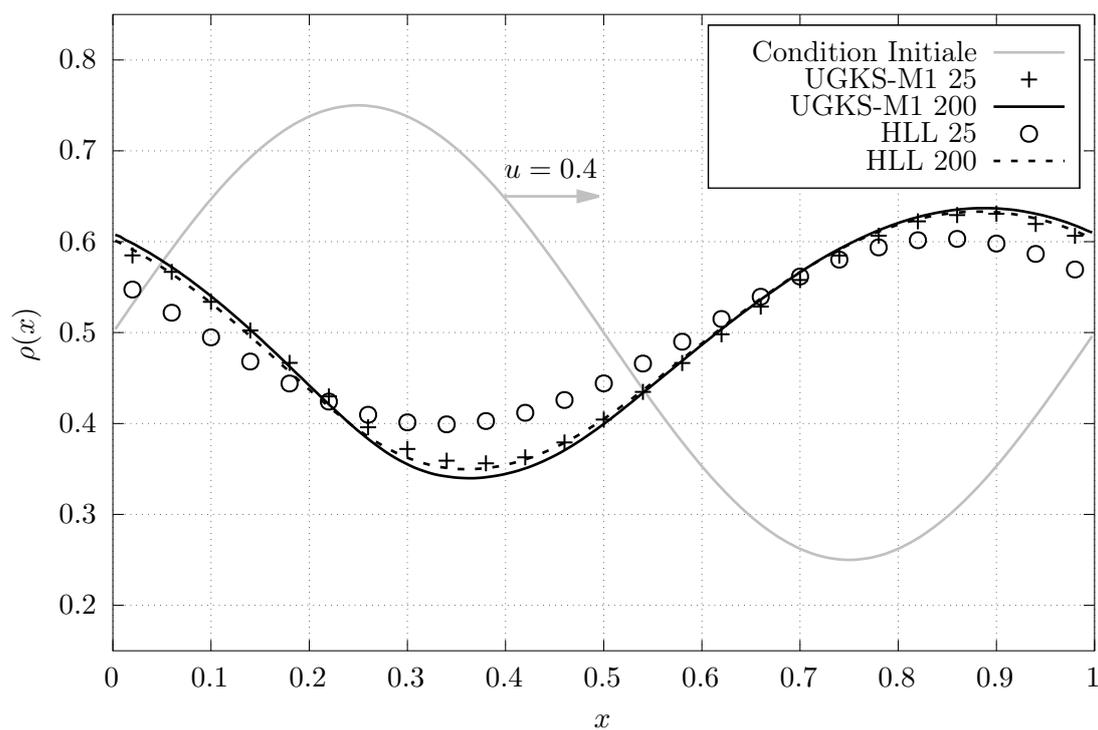


FIGURE 3.8 – Test n°1 : advection d’une densité sinusoïdale dans un domaine infini. Densité dans le domaine à $t = 1.0$

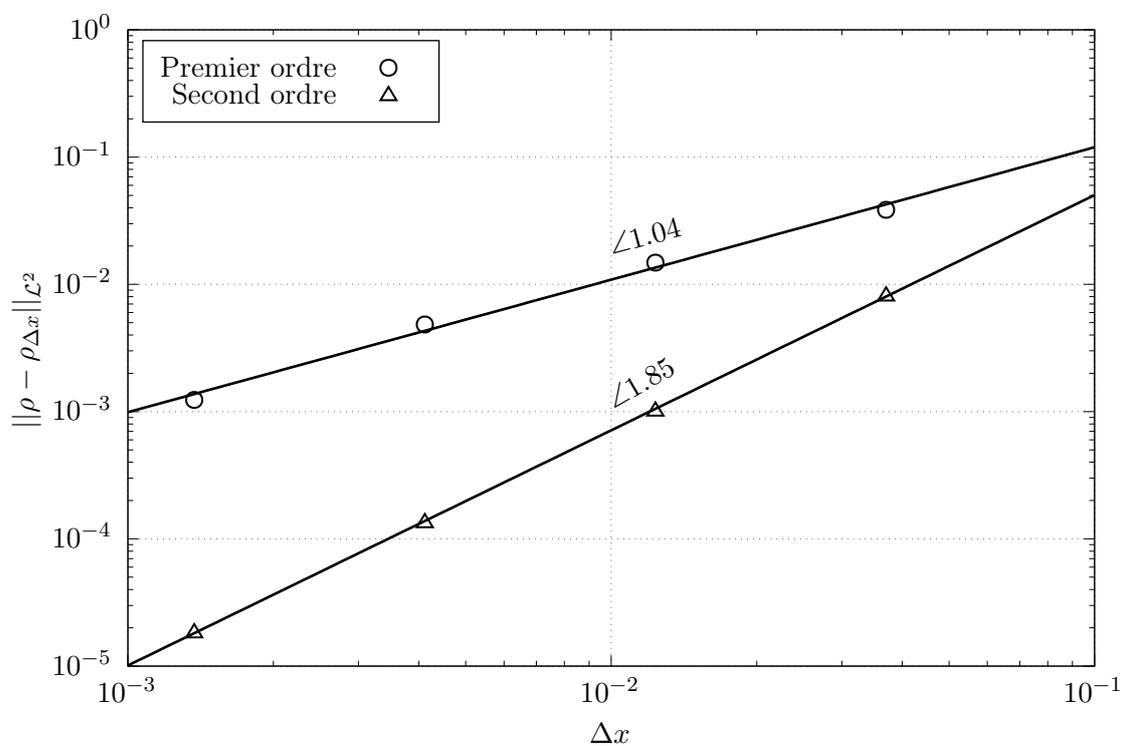


FIGURE 3.9 – Test n°1 : advection d’une densité sinusoïdale dans un domaine infini. Erreur sur la densité d’UGKS M1 en fonction du pas du maillage

Régime cinétique avec des conditions aux limites de Dirichlet

L'objectif de ce deuxième cas de test est d'évaluer le schéma dans le régime cinétique avec des données aux bords de Dirichlet. A l'état initial, les deux variables M1 sont nulles. Ce premier choix pose plusieurs problèmes numériques puisque la fermeture M1 n'est pas continue en $f = 0$. En effet, en présence de vide, il n'est plus possible de définir le rapport $u = \frac{j}{\rho}$ et donc de calculer la variable entropique β . Dans les faits, lorsque la densité est inférieure à un certain seuil (qui a été choisi à 10^{-12} dans les cas de test), la fonction de distribution M1 est supposée nulle et la variable entropique est alors imposée à 0. Des seuils sont aussi introduits pour calculer la Jacobienne (3.42), nécessaire à l'ordre 2 (où la quantité ρ^{-1} intervient) et pour l'évaluation des demi-moments de la fonction distribution M1 (dont les expressions ne sont pas définies en $\beta = 0$).

Sur les bords, une condition héritée du cinétique est imposée dans UGKS-M1 (3.45). Celle-ci consiste en une demi-fonction de distribution uniforme (qui est donc à l'équilibre) sur le bord gauche et en une demi-fonction de distribution nulle sur le bord droit. Dans HLL, des cellules fantômes sont introduites pour implémenter des conditions de Marshak (3.44) équivalentes à celle d'UGKS-M1.

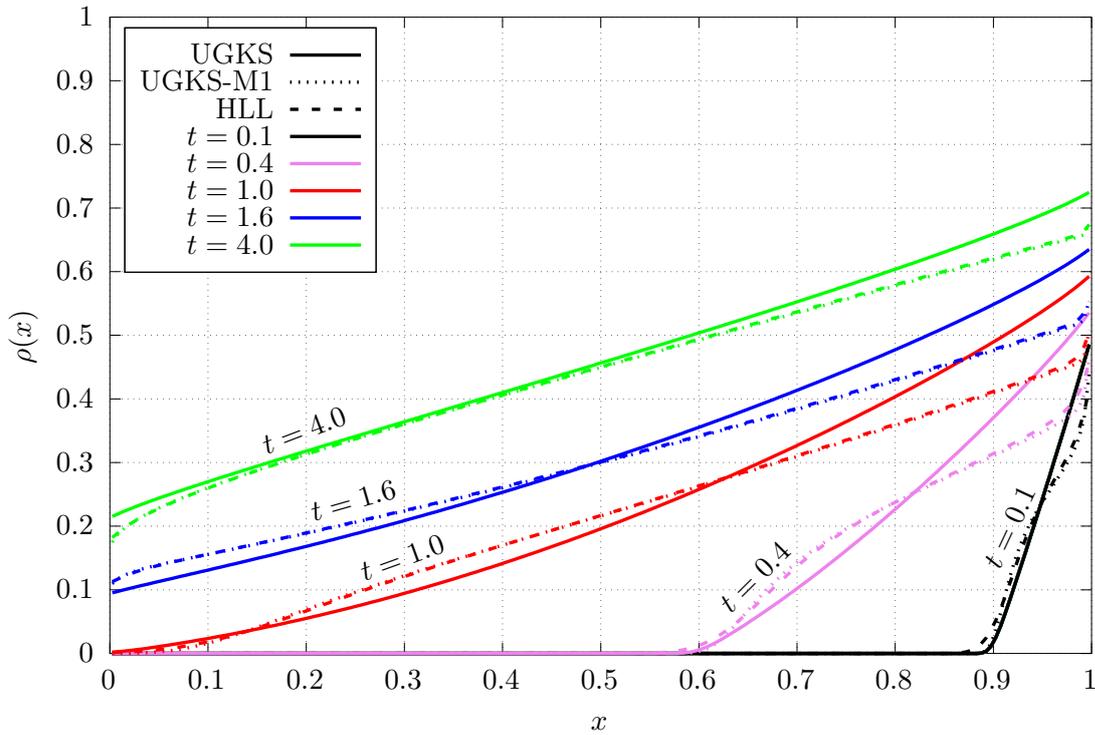


FIGURE 3.10 – Test n°2 : régime cinétique. Densité dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

Sur la figure 3.10, la densité donnée par le modèle M1 (avec les schémas UGKS-M1 et HLL) et par l'équation cinétique (avec UGKS) est représentée à différents instants dans le domaine. Dans les deux cas, il peut être observé que les particules rentrent progressivement dans le domaine par le bord droit. Au fur et à mesure du temps, la fonction de distribution devient isotrope, et la solution atteint un état stationnaire. Cependant, il apparaît que la solution cinétique est significativement différente de celles du modèle aux moments. Cette observation est une conséquence du fait que dans le régime cinétique le modèle M1 est imprécis par rapport à l'équation cinétique. En effet, les fonctions de distribution sont fortement hors

équilibre, de ce fait les projections sur l'espace M1 sont éloignées des distributions réelles. C'est en particulier le cas pour la donnée de bord où la projection de $f_D(v) = \mathbb{1}_{v < 0}$ sur l'espace M1 engendre la création de particules à vitesse positive. Par conséquent, moins de particules rentrent dans le domaine et la densité du modèle aux moments au bord est donc plus faible à tous les instants. L'écart entre les deux modèles se réduit néanmoins au cours du temps puisque la fonction de distribution devient isotrope et donc l'erreur de projection du modèle M1 devient plus faible. L'erreur se concentre alors seulement aux bords.

D'un point de vue numérique, les solutions du modèle M1 données par UGKS-M1 et HLL sont presque indiscernables. Aux premiers instants, il peut être remarqué que HLL a toujours plus de diffusion numérique qu'UGKS-M1, en particulier proche du bord et du front de l'onde. Cet écart se réduit aussi au court du temps.

Régime intermédiaire avec des conditions aux limites de Dirichlet

Dans ce cas de test, le nombre de Knudsen est réduit pour passer d'un régime cinétique à un régime intermédiaire. Sur la figure 3.11, il peut être observé que l'état stationnaire est atteint plus rapidement du fait de la prépondérance du mécanisme de collision. Par ailleurs, la solution du modèle aux moments est globalement bien plus proche de la solution cinétique. En effet, le modèle M1 est plus précis dans ce régime puisque les fonctions de distribution sous-jacentes sont plus proches de la distribution d'équilibre. Aux premiers instants, un écart de l'ordre de 2% à proximité du bord peut être observé sur l'amplitude de la solution d'UGKS-M1 par rapport à celle d'UGKS. Aux instants suivants, les solutions deviennent indiscernables. Le schéma HLL a toujours plus de diffusion numérique ; avant d'atteindre le régime stationnaire, un écart significatif peut être observé par rapport à UGKS-M1.

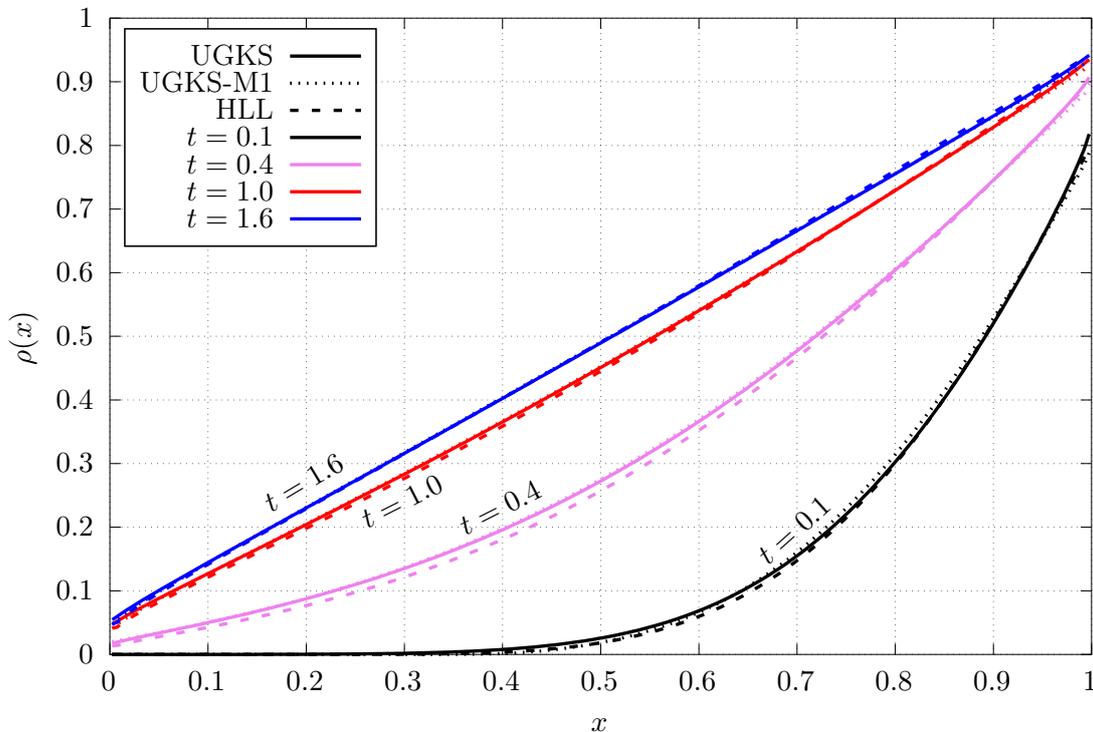


FIGURE 3.11 – Test n°3 : régime intermédiaire. Densité dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

Régime de diffusion avec des conditions aux limites de Dirichlet

Dans ce cas de test, le nombre de Knudsen est très faible pour atteindre le régime de diffusion. Sur la figure 3.12, toutes les solutions sont identiques puisque les schémas dégénèrent tous vers le schéma centré à 3 points pour l'équation de diffusion limite. Expérimentalement, il apparaît donc bien qu'UGKS-M1 est capable de résoudre la solution de diffusion limite.

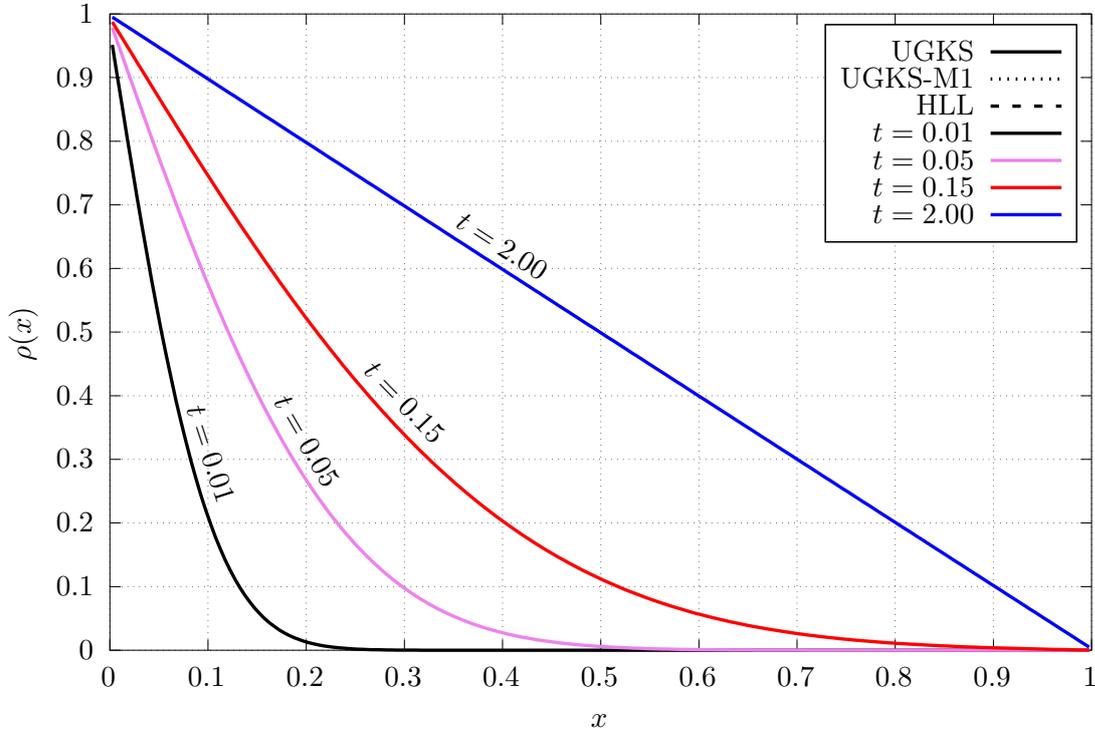


FIGURE 3.12 – Test n°4 : régime de diffusion. Densité dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

3.5.2 UGKS-P1

Pour illustrer simplement le fait que cette méthode fonctionne avec d'autres types de fermeture, le schéma pour le modèle P1 (3.47) obtenu à partir d'UGKS est comparé avec le schéma de Godunov (décrit dans 2.2.2).

Les résultats du cas de test cinétique sont représentés sur la figure 3.13. Tout d'abord d'un point de vue physique, il apparaît que le modèle P1 arrive beaucoup moins bien à restituer les effets cinétique. En effet, le front de densité a un retard significatif par rapport à celui de l'équation cinétique et ce à tous les instants. Cette observation est une conséquence du fait que la fonction de distribution P1 représente moins bien les fonctions de distribution fortement hors équilibre. D'un point de vue numérique, le schéma de Godunov donne un résultat légèrement moins diffus qu'UGKS-P1.

Pour le cas de test intermédiaire, UGKS-P1 donne des résultats similaires à UGKS-M1. En effet dans ce régime, les fonctions de distribution sont plus proches de l'équilibre et les deux modèles sont pertinents. Dans le régime de diffusion, UGKS-P1 dégénère correctement. Pour ces deux derniers tests, les résultats ne sont pas représentés puisque n'apportant rien par rapport à ceux obtenus pour le modèle M1.

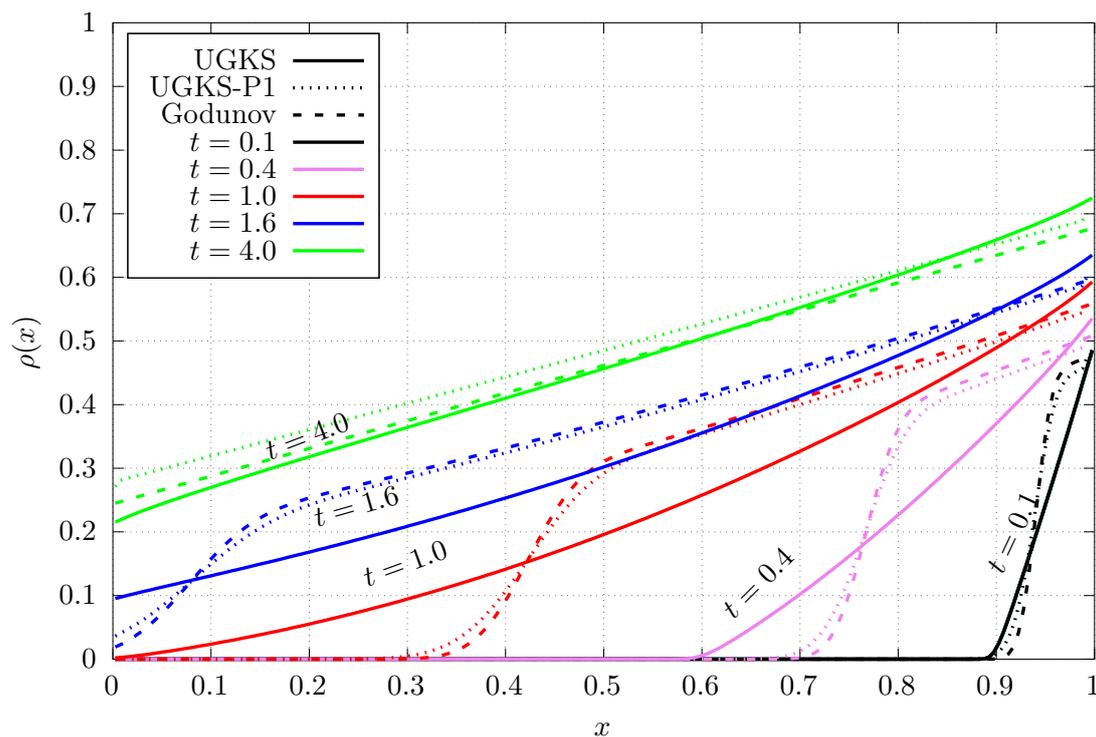


FIGURE 3.13 – Test n°5 : régime cinétique. Densité dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle P1

3.5.3 UGKS-M2

Dans le test n°3, il a pu être mis en évidence que le modèle M1 est peu précis dans le régime cinétique. Le modèle M2 consiste en une augmentation de la taille de la hiérarchie de moments. Le modèle M1 étant inclus dans celui-ci, l'ensemble des fonctions de distribution représentables augmente. De ce fait, le modèle M2 est en théorie capable de restituer plus d'effets cinétiques et donc d'être plus précis dans ces régimes.

Sur la figure 3.14, la solution du modèle aux moments M2 (calculée avec UGKS-M2) est comparée avec celle du modèle M1 et avec la solution cinétique dans le régime cinétique. Globalement, la solution est significativement améliorée par rapport à M1. Au bord, l'écart avec la solution cinétique est grandement réduit puisque la projection de la donnée de bord sur l'espace M2 conduit à beaucoup moins de particules à vitesse positive. Dans le domaine, la solution est aussi beaucoup plus proche à la solution cinétique, en particulier aux deux premiers instants où la fonction de distribution est pourtant fortement hors équilibre et où le modèle M1 est très mauvais. Bien que les résultats soient grandement améliorés, le modèle M2 n'est toujours pas suffisant pour parfaitement résoudre ce cas cinétique.

Sur la figure 3.15, la même comparaison est réalisée dans le régime intermédiaire. Dans ce cas, la solution du modèle M2 est indiscernable de la solution cinétique. Il peut être remarqué que l'augmentation de la taille de la hiérarchie a permis de corriger l'écart au bord au premier instant de la solution M1.

Enfin, UGKS-M2 a aussi été testé dans le régime de diffusion et donne exactement les mêmes résultats qu'UGKS-M1 (puisque dégénérant de la même manière dans cette limite). Ce résultat redondant n'est pas exposé ici.

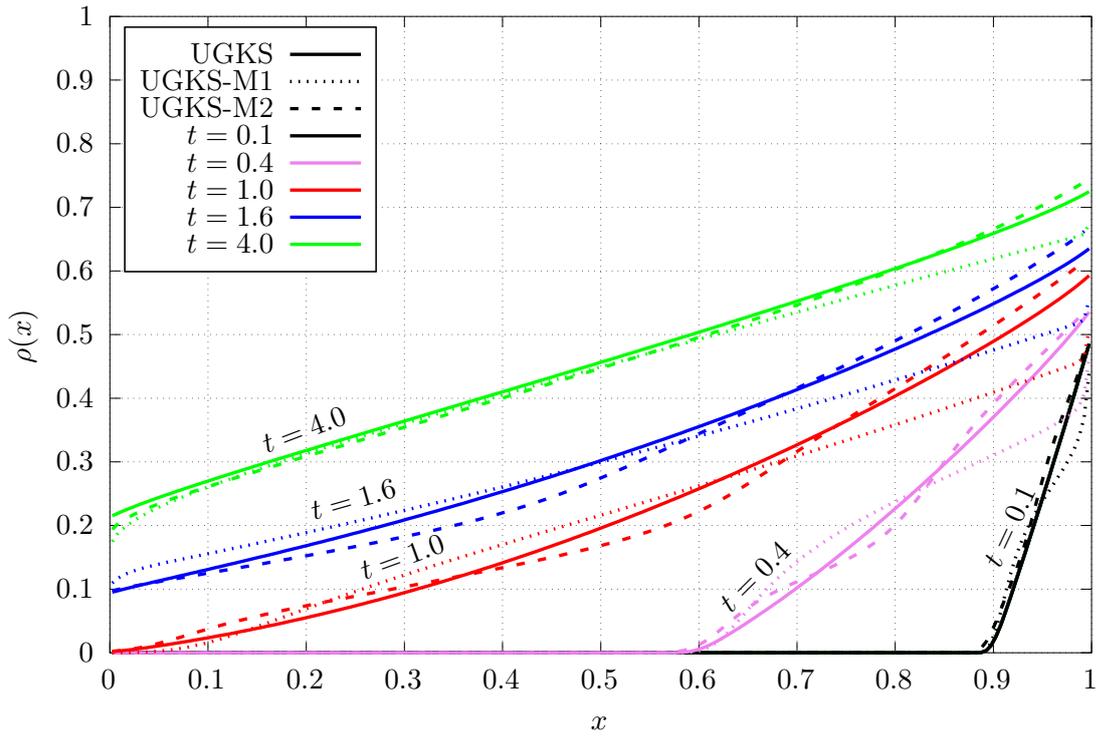


FIGURE 3.14 – Test n°6 : régime cinétique. Densité dans le domaine pour l'équation cinétique, le modèle M1 et le modèle M2

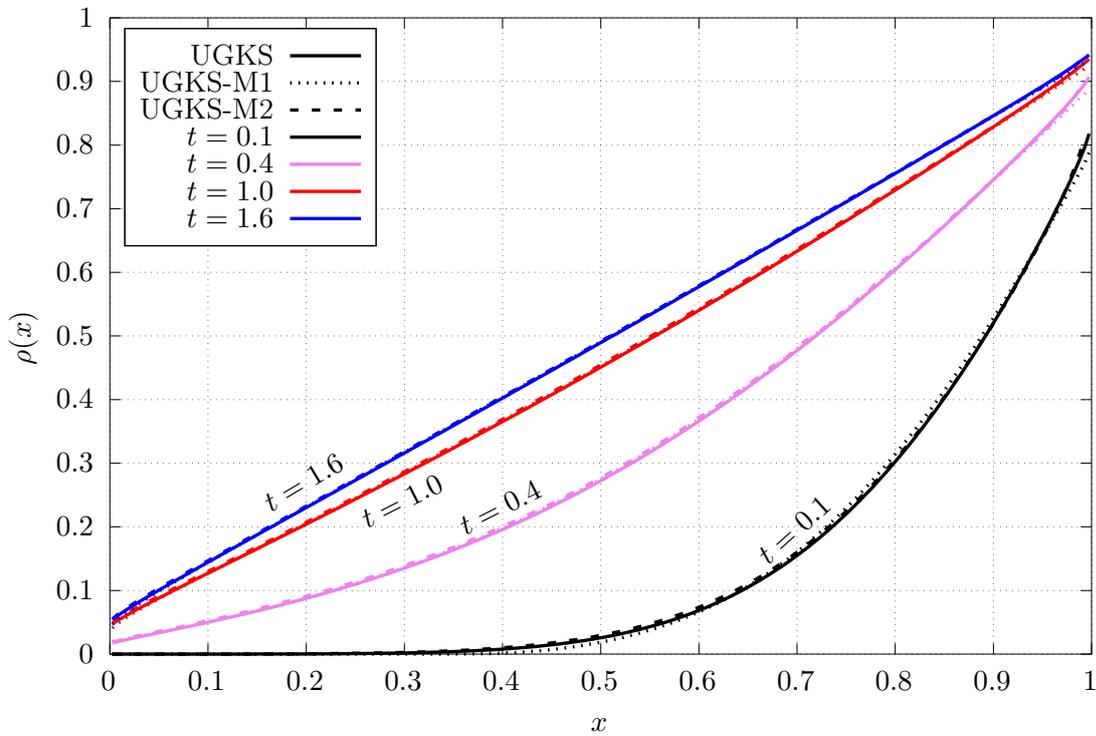


FIGURE 3.15 – Test n°7 : régime intermédiaire. Densité dans le domaine pour l'équation cinétique, le modèle M1 et le modèle M2

3.5.4 UGKS-PN

Dans cette section, le schéma sur le modèle PN est comparé avec UGKS. Dans la figure 3.16, la densité à un instant donnée est représentée pour différentes tailles de hiérarchies : $n = \{1, 4, 8, 32\}$. La solution du moment aux moments semblent converger uniformément vers la solution cinétique à mesure que la taille de la hiérarchie augmente. Pour $n \leq 8$, les solutions oscillent autour de la solution cinétique ce qui est probablement similaire au phénomène de raies qui peut être observé avec les schémas pour l'équation cinétique lorsque la discrétisation de l'espace des vitesses est trop grossière.

Par ailleurs, l'intérêt des modèles entropiques apparaît clairement ici puisque le modèle Pn nécessite d'augmenter la taille de la hiérarchie pour capturer la position du front (où les distributions sont loin de la distribution équilibre).

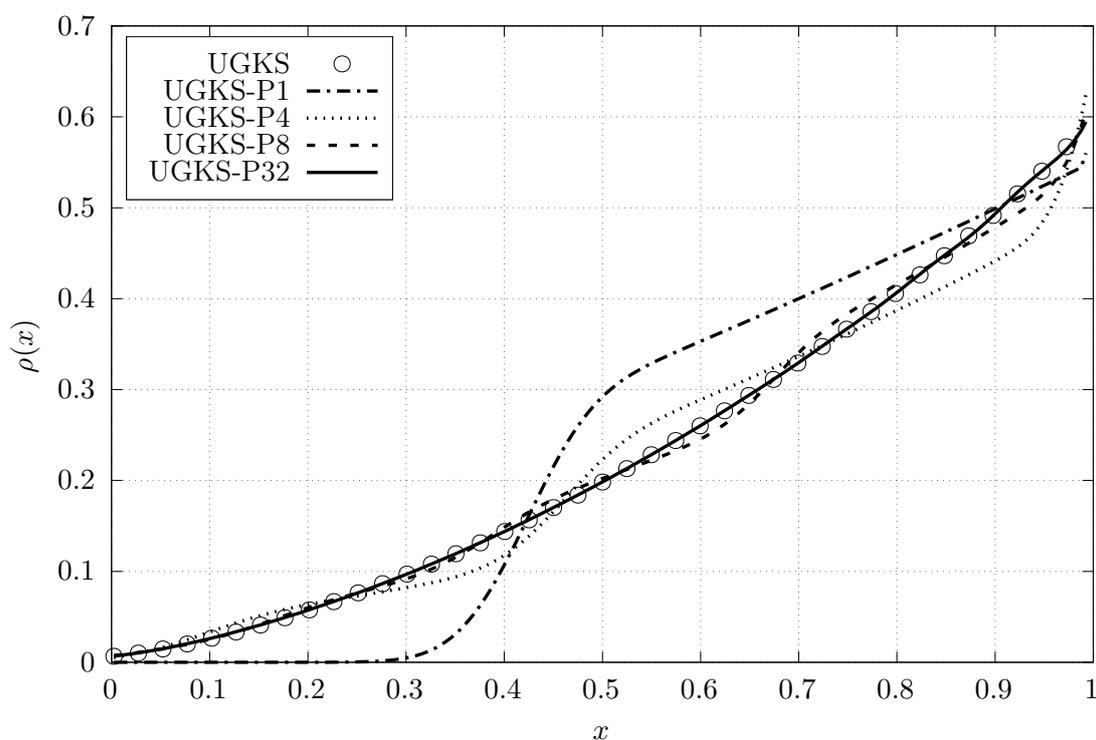


FIGURE 3.16 – Test n°8 : régime cinétique. Densité dans le domaine à $t = 1.0$ pour l'équation cinétique, le modèle P1, P4, P8 et P32

Chapitre 4

Le transport électronique

Sommaire

4.1	Introduction	108
4.2	UGKS	108
4.2.1	Formulation volumes finis	108
4.2.2	Une méthode basée sur les caractéristiques	109
4.2.3	Analyse asymptotique et stabilité	113
4.2.4	Conditions aux limites	113
4.2.5	Schémas de diffusion alternatifs	115
4.3	UGKS-M1	116
4.3.1	Une fermeture entropique d'UGKS	116
4.3.2	Demi-moments angulaires de la fonction de distribution M1	118
4.3.3	Discrétisation de l'espace des vitesses	119
4.3.4	Ordre élevé en espace	120
4.4	Extension aux maillages non structurés	122
4.4.1	UGKS	122
4.4.2	Définition des états macroscopiques	124
4.4.3	UGKS-M1	129
4.5	Résultats	131
4.5.1	Maillage Cartésien	132
4.5.2	Maillage non structuré triangulaire	141

Résumé

Dans ce chapitre, la méthode développée dans le chapitre 3 dans le contexte du transport linéaire est étendue au modèle M1 du transport électronique introduit dans le chapitre 1. La construction d'UGKS est brièvement rappelée dans ce contexte avant d'explicitier le nouveau schéma et ses extensions. Le cas des maillages non structurés est en particulier traité.

4.1 Introduction

L'idée principale présentée dans le chapitre 3 consistait à réaliser des fermetures à l'échelle numérique dans UGKS pour obtenir des schémas AP pour les modèles aux moments associés. Cette démarche est générique et semble pouvoir s'appliquer dans des contextes plus complexes que celui du transport linéaire. La seule restriction à cette méthode est qu'il est nécessaire de pouvoir construire UGKS pour l'équation cinétique sous-jacente. Dans le cas du modèle du transport électronique (présenté dans la section 1.3), l'opérateur de collision est aussi un opérateur de relaxation. Il est donc toujours possible d'écrire la formule de Duhamel qui est à la base des flux d'UGKS.

Pour ce modèle, le régime asymptotique est légèrement différent. Lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, la densité et l'énergie tendent à vérifier un système de diffusion couplé et non linéaire (1.47). De plus, les équations sont dans ce cas considérées en deux dimension d'espace ce qui peut engendrer des problèmes numériques en fonction du type de maillage considéré. Pour les maillages cartésiens non déformés, le schéma de diffusion est facile à construire. Cependant pour les maillages non structurés, une attention particulière doit être portée lors de l'élaboration des flux pour obtenir une approximation consistante quelque soit la forme du maillage. Dans la littérature, plusieurs méthodes ont été proposées pour les construire (voir section 2.4.2.2). Dans UGKS, les reconstructions doivent donc être adaptées de telle manière que les flux dégénèrent vers le schéma de diffusion voulu.

Dans ce chapitre, un schéma pour le modèle M1 du transport électronique est tout d'abord construit dans le cas cartésien. Plusieurs difficultés numériques liées à l'augmentation de la dimension sont discutées. Ce schéma est ensuite étendu aux maillages non structurés.

4.2 UGKS

L'équation cinétique à résoudre est

$$\partial_t f + \frac{v}{\eta} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \nu (M[f] - f), \quad (4.1)$$

où $f : (t, \mathbf{x}, v, \boldsymbol{\Omega}) \rightarrow f(t, \mathbf{x}, v, \boldsymbol{\Omega})$ est la fonction de distribution, $\nu = \sigma(\mathbf{W})/\epsilon\eta$ est la fréquence de collision, $\mathbf{W}^T = (\rho \ q)$ est le vecteur des variables conservatives et $M[f]$ est la maxwellienne de f définie par :

$$\forall v \in \mathbb{R}^+, M[f](v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right). \quad (4.2)$$

La température T vaut $\frac{2q}{3\rho}$.

4.2.1 Formulation volumes finis

Dans cette partie, la formulation volumes finis de l'équation cinétique du transport électronique est tout d'abord établie en deux dimension d'espace sur maillage structuré cartésien. Les notations employées sont celles introduites dans la section 2.4.1 (voir en particulier la figure 2.8). Soient $\mathcal{C}_{i,j} = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}]$ un volume de contrôle de taille $\Delta x_i \Delta y_j$ et $[t_n, t_{n+1}]$ un intervalle de temps de taille Δt . La moyenne de la fonction de distribution dans la maille $\mathcal{C}_{i,j}$ à l'instant t_n est

$$\forall (v, \boldsymbol{\Omega}) \in \mathbb{R}_+ \times \mathcal{S}^2, f_{i,j}^n(v, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j} \iint_{\mathcal{C}_{i,j}} f(t_n, x, y, \cdot, \cdot) dx dy, \quad (4.3)$$

et le flux moyen le long de la face Est : $[\mathbf{x}_{i+1/2,j-1/2}, \mathbf{x}_{i+1/2,j-1/2}]$ est

$$\forall(v, \boldsymbol{\Omega}) \in \mathbb{R}_+ \times \mathcal{S}^2, \phi_{i+1/2,j}(v, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{\eta \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v \Omega_x f(t, \mathbf{x}_{i+1/2,j}, v, \boldsymbol{\Omega}) dt + \mathcal{O}(\Delta y^2). \quad (4.4a)$$

Tout comme pour le transport électronique, les variables cinétiques sont pour le moment gardées continues dans le développement d'UGKS. La formulation volumes finis semi-discrète est obtenue en intégrant l'équation cinétique sur le volume de contrôle $\mathcal{C}_{i,j}$ entre t_n et t_{n+1} :

$$\frac{f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{\phi_{i+1/2,j} - \phi_{i-1/2,j}}{\Delta x_i} + \frac{\phi_{i,j+1/2} - \phi_{i,j-1/2}}{\Delta y_j} = \nu(\mathbf{W}_{i,j}^{n+1}) \left(M[\mathbf{W}_{i,j}^{n+1}] - f_{i,j}^{n+1} \right). \quad (4.5)$$

où $\mathbf{W}_{i,j}^n = \langle \langle \Psi(v) f_{i,j}(v, \boldsymbol{\Omega}) \rangle \rangle = (\rho \quad q)^T$ est le vecteur des variables macroscopique et Ψ est le vecteur des invariants collisionnels $\Psi(v)^T = (1 \quad \frac{1}{2}v^2)$. Une formule des rectangles à droite est utilisée pour obtenir un schéma stable dans la limite asymptotique. De même, ce choix implique de devoir calculer les variables macroscopiques au temps t_{n+1} avant la fonction de distribution. De ce fait, une autre formulation volumes finis est écrite en intégrant (4.5) sur l'espace des variables cinétiques, contre Ψ :

$$\frac{\mathbf{W}_{i,j}^{n+1} - \mathbf{W}_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{\Delta x_i} (\Phi_{i+1/2,j} - \Phi_{i-1/2,j}) + \frac{1}{\Delta y_j} (\Phi_{i,j+1/2} - \Phi_{i,j-1/2}) = 0. \quad (4.6)$$

Le terme source de cette équation est nul puisque les variables macroscopiques sont conservées par l'opérateur de collision BGK. De plus, le flux macroscopique n'est rien d'autre que l'intégrale du flux microscopique : $\Phi_{i+1/2,j} = \langle \langle \Psi(v) \phi_{i+1/2,j}(v, \boldsymbol{\Omega}) \rangle \rangle$. Il reste désormais à donner une approximation consistante et conservative de ce dernier.

4.2.2 Une méthode basée sur les caractéristiques

Dans cette section, le flux numérique d'UGKS est établi sur la face Est. Le développement est similaire sur les autres faces. Tout comme pour le transport linéaire, l'idée principale d'UGKS est d'utiliser la représentation intégrale de l'équation cinétique pour calculer les flux. Celle-ci peut être établie de la même manière que pour le transport linéaire puisque le terme de collision s'écrit toujours sous la forme d'un opérateur de relaxation et que la méthode des caractéristiques peut être utilisée indépendamment de la dimension du problème. Si la fréquence de collision est constante alors

$$\frac{d}{dt} \left(e^{\nu t} f(t, \mathbf{x} + \frac{v}{\eta} t \boldsymbol{\Omega}, v, \boldsymbol{\Omega}) \right) = \nu e^{\nu t} M[\mathbf{W}](t, \mathbf{x} + \frac{v}{\eta} t \boldsymbol{\Omega}, v, \boldsymbol{\Omega}) \quad (4.7)$$

Cependant, l'opacité dépend de l'état macroscopique du système \mathbf{W} . La même hypothèse de faibles variations de la fréquence de collision à l'échelle d'une cellule et d'un pas de temps est donc formulée. De ce fait, la représentation (4.7) peut être utilisée comme une approximation afin d'établir la formule de Duhamel au centre de l'interface $\mathbf{x}_{i+1/2,j}$ entre t_n et t :

$$f(t, \mathbf{x}_{i+1/2,j}, v, \boldsymbol{\Omega}) \approx e^{-\nu_{i+1/2,j}^n (t-t_n)} f(t_n, \mathbf{x}_{i+1/2,j} - \frac{v}{\eta} (t-t_n) \boldsymbol{\Omega}, v, \boldsymbol{\Omega}) + \nu_{i,j+1/2}^n \int_{t_n}^t e^{-\nu_{i+1/2,j}^n (t-s)} M[\mathbf{W}](s, \mathbf{x}_{i+1/2,j} - \frac{v}{\eta} (t-s) \boldsymbol{\Omega}, v) ds. \quad (4.8)$$

Dans celle-ci, la fréquence de collision à l'interface est $\nu_{i+1/2,j} = \frac{1}{2}(\nu_{i,j} + \nu_{i+1,j})$. Pour établir le flux numérique d'UGKS, des reconstructions de la fonction de distribution ainsi que de la maxwellienne doivent être fournies. Des choix similaires à ceux présentés dans le chapitre 3

sont faits. Tout d'abord la fonction de distribution est reconstruite par une fonction \tilde{f} affine par maille autour de la face Est, dans la direction \mathbf{e}_x :

$$\forall(x, y) \in [x_i, x_{i+1}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}],$$

$$\tilde{f}(t_n, x, y, \cdot, \cdot) = \begin{cases} f_{i,j}^n + \delta_x f_{i,j}^n (x - x_{i,j}) & \text{si } x \leq x_{i+1/2,j} \\ f_{i+1,j}^n + \delta_x f_{i+1,j}^n (x - x_{i+1,j}) & \text{si } x \geq x_{i+1/2,j} \end{cases}, \quad (4.9)$$

où $\delta_x f_{i,j}^n$ est la pente normale à l'interface de la fonction de distribution. Il est possible d'ajouter un terme de reconstruction tangentiel mais au prix d'un coût calcul plus important et d'un stencil plus grand. La pente est donnée par des formules de différence finie et limitée par un limiteur de pente ψ . Sur un maillage à pas constant, celle-ci est

$$\delta_x f_{i,j}^n = \psi \left(\frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x}, \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x}, \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right). \quad (4.10)$$

La reconstruction de la maxwellienne \tilde{M} est affine par maille et continue entre les mailles :

$$\forall t \in [t_n, t_{n+1}], \forall(x, y) \in [x_i, x_{i+1}] \times [y_{j-1/2}, y_{j+1/2}],$$

$$\tilde{M}(t, x, y, \cdot) = M[\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n] + \begin{cases} \delta_x^G M_{i+1/2,j}^n (x - x_{i+1/2,j}) & \text{si } x \leq x_{i+1/2,j} \\ \delta_x^D M_{i+1/2,j}^n (x - x_{i+1/2,j}) & \text{si } x \geq x_{i+1/2,j} \end{cases}, \quad (4.11)$$

où $M[\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n]$ est la maxwellienne à l'état macroscopique de l'interface $\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n$ et $\delta_x^{GD} M_{i+1/2,j}^n$ sont les pentes à gauche et à droite de la face Est de la maxwellienne dans la direction \mathbf{e}_x . La fonction ainsi obtenue n'est alors plus une Maxwellienne. Un terme de reconstruction tangentiel peut aussi être ajouté mais celui-ci n'a pas d'influence sur le flux macroscopique et donc sur le comportement asymptotique. Tout comme précédemment, plusieurs définitions peuvent être adoptées pour le vecteur des variables macroscopiques à l'interface ; la première est la définition arithmétique $\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n = \frac{1}{2}(\mathbf{W}_{i+1,j}^n + \mathbf{W}_{i,j}^n)$ et la deuxième est cinétique :

$$\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n = \langle \langle \Psi (f_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + f_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0}) \rangle \rangle. \quad (4.12)$$

Il reste désormais à exprimer les pentes de la maxwellienne en fonction des variables conservatives.

Proposition 4.2.1 (Dérivée de la Maxwellienne)

La dérivée de la maxwellienne s'exprime en fonction de la dérivée du vecteur des variables conservatives de la manière suivante :

$$\partial_x M[\mathbf{W}] = \Psi^T \mathbf{K}(\mathbf{W}) \partial_x \mathbf{W}, \quad (4.13)$$

où la matrice $\mathbf{K} \in M_2(\mathbb{R})$ est définie par :

$$\mathbf{K}(\mathbf{W}) = M[\mathbf{W}] \begin{pmatrix} 5 & -3 \\ 2\rho & 2q \\ 3 & 3\rho \\ -2q & 2q^2 \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Démonstration : La formule de la chaîne permet d'écrire la dérivée de la maxwellienne sous la forme suivante :

$$\partial_x M[\mathbf{W}] = (\partial_x \rho) \partial_\rho M[\mathbf{W}] + (\partial_x q) \partial_q M[\mathbf{W}],$$

où les dérivées de la maxwellienne par rapport à chacune des grandeurs macroscopiques sont :

$$\begin{aligned}\partial_\rho M[\mathbf{W}] &= M[\mathbf{W}] \left(\frac{5}{2\rho} - \frac{3v^2}{4q^2} \right) = M[\mathbf{W}] \begin{pmatrix} 5 \\ \frac{2\rho}{3} \\ -\frac{2q}{3} \end{pmatrix} \cdot \Psi, \\ \partial_q M[\mathbf{W}] &= M[\mathbf{W}] \left(-\frac{3}{2q} - \frac{3\rho v^2}{4q^2} \right) = M[\mathbf{W}] \begin{pmatrix} -\frac{3}{2q} \\ \frac{3\rho}{2q^2} \end{pmatrix} \cdot \Psi. \quad \blacksquare\end{aligned}$$

Définition 4.2.1 (*Pentes de la maxwellienne*)

Les pentes de la maxwellienne sont obtenues en appliquant des formules de différences finies sur la dérivée de celle-ci (4.13) à l'interface :

$$\delta_x^G M_{i+1/2,j}^n = \Psi^T \mathbf{K}(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n) \frac{\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n - \mathbf{W}_{i,j}^n}{\Delta x_i/2}, \quad (4.15a)$$

$$\delta_x^D M_{i+1/2,j}^n = \Psi^T \mathbf{K}(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n) \frac{\mathbf{W}_{i+1,j}^n - \mathbf{W}_{i+1/2,j}^n}{\Delta x_{i+1}/2}. \quad (4.15b)$$

Finalement, ces reconstructions sont employées dans la formule de Duhamel (4.8), puis l'expression obtenue est intégrée entre t_n et t_{n+1} pour obtenir le flux numérique. De même que dans le cadre du transport linéaire, il est supposé que les domaines de validité des reconstructions peuvent être étendus.

Proposition 4.2.2 (*UGKS*)

Le flux numérique microscopique d'UGKS est

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2,j}(v, \Omega) &= A_{i+1/2,j}^n v \Omega_x \left(f_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + f_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right) \\ &\quad + B_{i+1/2,j}^n v^2 \Omega_x^2 \left(\delta_x f_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \delta_x f_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right) \\ &\quad + C_{i+1/2,j}^n v \Omega_x M[\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n] \\ &\quad + D_{i+1/2,j}^n v^2 \Omega_x^2 \left(\delta_x^L M_{i+1/2,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \delta_x^R M_{i+1/2,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right).\end{aligned} \quad (4.16)$$

où $f_{i,j}^{n(\pm)} = f_{i,j}^n \pm \frac{\Delta x}{2} \delta_x f_{i,j}^n$ et où les coefficients d'intégrations sont les mêmes que ceux obtenus pour le transport linéaire (voir les expressions (3.15)). De plus, si le maillage est à pas constant, les deux composantes du flux macroscopique d'UGKS sont

$$\begin{aligned}\Phi_{i+1/2,j}^\rho &= A_{i+1/2,j}^n \left\langle \left\langle v \Omega_x f_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v \Omega_x f_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ &\quad + B_{i+1/2,j}^n \left\langle \left\langle v^2 \Omega_x^2 \delta_x f_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^2 \Omega_x^2 \delta_x f_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ &\quad + \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} (q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n),\end{aligned} \quad (4.17a)$$

$$\begin{aligned}\Phi_{i+1/2,j}^q &= \frac{A_{i+1/2,j}^n}{2} \left\langle \left\langle v^3 \Omega_x f_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^3 \Omega_x f_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ &\quad + \frac{B_{i+1/2,j}^n}{2} \left\langle \left\langle v^4 \Omega_x^2 \delta_x f_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^4 \Omega_x^2 \delta_x f_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ &\quad + \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \frac{5(q_{i+1/2,j}^n)^2}{3\rho_{i+1/2,j}^n} \left(-\frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\rho_{i+1/2,j}^n} + 2\frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{q_{i+1/2,j}^n} \right),\end{aligned} \quad (4.17b)$$

où $\Phi_{i+1/2,j} = \left(\Phi_{i+1/2,j}^\rho \quad \Phi_{i+1/2,j}^q \right)^T$.

Démonstration : Le calcul du flux microscopique est presque identique à celui réalisé dans le cadre du transport linéaire et n'est pas détaillé ici. Pour le flux macroscopique, le terme associé à la reconstruction affine de la maxwellienne (en $D_{i+1/2}^n$) est explicité (en utilisant les expressions des moments de celle-ci données dans l'annexe D). Le terme de diffusion du flux macroscopique de densité est

$$\begin{aligned}
 & D_{i+1/2,j}^n \left\langle \left\langle v^2 \Omega_x^2 \left(\delta_x^{Ln} M_{i+1/2,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \delta_x^{Rn} M_{i+1/2,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right) \right\rangle \right\rangle \\
 &= \frac{D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \left\langle \left\langle v^2 K(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n)^T \Psi \right\rangle \right\rangle \cdot (\mathbf{W}_{i+1,j}^n - \mathbf{W}_{i,j}^n) \\
 &= \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \begin{pmatrix} q_{i+1/2,j}^n & 5(q_{i+1/2,j}^n)^2 \\ 3\rho_{i+1/2,j}^n & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 2\rho_{i+1/2,j}^n & -2q_{i+1/2,j}^n \\ 3 & 3\rho_{i+1/2,j}^n \\ -2q_{i+1/2,j}^n & 2(q_{i+1/2,j}^n)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n \\ q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n \end{pmatrix} \\
 &= \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} (q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n).
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

Celui associé au flux d'énergie est

$$\begin{aligned}
 & D_{i+1/2,j}^n \left\langle \left\langle \frac{1}{2} v^4 \Omega_x^2 \left(\delta_x^{Ln} M_{i+1/2,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \delta_x^{Rn} M_{i+1/2,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right) \right\rangle \right\rangle \\
 &= \frac{D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \left\langle \left\langle \frac{1}{2} v^4 \Psi^T K(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n) \right\rangle \right\rangle (\mathbf{W}_{i+1,j}^n - \mathbf{W}_{i,j}^n) \\
 &= \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \frac{5}{3} \begin{pmatrix} (q_{i+1/2,j}^n)^2 & 7(q_{i+1/2,j}^n)^3 \\ \rho_{i+1/2,j}^n & 3(\rho_{i+1/2,j}^n)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 2\rho_{i+1/2,j}^n & -2q_{i+1/2,j}^n \\ 3 & 3\rho_{i+1/2,j}^n \\ -2q_{i+1/2,j}^n & 2(q_{i+1/2,j}^n)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n \\ q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n \end{pmatrix} \\
 &= \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \frac{5(q_{i+1/2,j}^n)^2}{3\rho_{i+1/2,j}^n} \left(-\frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\rho_{i+1/2,j}^n} + 2\frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{q_{i+1/2,j}^n} \right).
 \end{aligned} \tag{4.19} \blacksquare$$

4.2.3 Analyse asymptotique et stabilité

Tout comme dans le cadre du transport linéaire, le comportement asymptotique des flux est totalement déterminé par les limites des coefficients d'intégrations dans les différents régimes (3.21)-(3.18).

Proposition 4.2.3 (*Limites asymptotiques*)

Dans le régime de transport ($\epsilon \rightarrow +\infty$), le flux limite microscopique est le flux standard de Godunov d'ordre 2 en espace et en temps pour l'équation d'advection linéaire (2.50)-(2.18) :

$$\phi_{i+1/2,j} \xrightarrow{w \rightarrow +\infty} \frac{v\Omega_x}{\eta} (f_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + f_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0}) - \Delta t \frac{v^2 \Omega_x^2}{2\eta^2} (\delta_x f_{i,j}^n \mathbb{1}_{v > 0} + \delta_x f_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{v < 0}). \quad (4.20)$$

Dans la limite de diffusion ($\eta = \epsilon$ et $\epsilon \rightarrow 0$), les flux limites macroscopiques sont les flux usuels d'ordre 2 en espace pour le système de diffusion écrit en fonction des variables conservatives (2.54) :

$$\Phi_{i+1/2,j}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-2}{3\sigma_{i+1/2,j}^n} \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{\Delta x}, \quad (4.21a)$$

$$\Phi_{i+1/2,j}^q \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-2}{3\sigma_{i+1/2,j}^n} \frac{5(q_{i+1/2,j}^n)^2}{3\rho_{i+1/2,j}^n} \left(\frac{-1}{\rho_{i+1/2,j}^n} \frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\Delta x} + \frac{2}{q_{i+1/2,j}^n} \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{\Delta x} \right), \quad (4.21b)$$

et les fonctions de distributions tendent vers des maxwelliennes :

$$f_{i,j}^{n+1} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} M[\mathbf{W}_{i,j}^{n+1}]. \quad (4.22)$$

Les flux limites sont corrects dans chacun des deux régimes et correspondent bien à ceux introduit dans la section 2.4. Par ailleurs, les flux sont analogues dans les autres directions et dégénèrent bien eux aussi. De plus, il apparaît que les pentes issues de la reconstruction de la Maxwellienne conditionnent entièrement les flux limites de diffusion.

De même que pour le transport linéaire, il apparaît expérimentalement que le schéma reste stable sous une condition "type CFL" mélangeant les conditions usuelles hyperbolique et parabolique :

$$\Delta t \leq \text{CFL} \left(\frac{\eta}{v_m} \min(\Delta x, \Delta y) + \frac{9}{10} \sigma_0 \min(\Delta x, \Delta y)^2 \right), \quad (4.23)$$

où Δx et Δy sont les plus petits pas du maillage et σ_0 est l'opacité la plus faible dans le domaine. Celle-ci n'est *a priori* pas connue puisque dépendant de l'état macroscopique (qui évolue). Elle est donc supposée en fonction des cas d'application. Par ailleurs, cette dernière condition parabolique n'est pas formelle et est seulement inspirée du cas scalaire. Pour le moment, aucun résultat théorique n'a pu être prouvé sur le système de diffusion. Finalement, ces résultats permettent de conclure sur le fait que cette version d'UGKS pour le transport électronique est bien un schéma qui préserve l'asymptotique.

4.2.4 Conditions aux limites

Dans cette section, le traitement des conditions aux limites de type Dirichlet est explicité. La fonction de distribution est imposée sur le demi-espace des particules entrantes. Par

exemple sur le bord ouest, une condition de bord à l'équilibre est

$$\forall \mathbf{\Omega} \in \{\mathbf{\Omega} \in \mathcal{S}^2 | \Omega_x > 0\}, f(t, x_O, y, v, \mathbf{\Omega}) = M[\mathbf{W}_O(t, y)](v),$$

où x_O correspond à l'abscisse du bord ouest et $\mathbf{W}_O(t, y)$ est l'état macroscopique sur celui-ci. Dans ce cas, tout comme dans le cadre du transport linéaire, le flux microscopique est établi en modifiant l'état de la fonction de distribution à l'interface (donné par la formule de Duhamel (4.8)) pour prendre en compte les particules entrantes. La nouvelle représentation est alors

$$f(t, \mathbf{x}_{1/2,j}, v, \mathbf{\Omega}) = \begin{cases} M[\mathbf{W}_O(t, \mathbf{x})](v) & \text{si } \Omega_x > 0 \\ e^{-\nu_{1/2,j}^n(t-t_n)} f(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j} - \frac{v}{\eta}(t-t_n)\mathbf{\Omega}, v, \mathbf{\Omega}) & \\ + \nu_{1/2,j}^n \int_{t_n}^t e^{-\nu_{1/2,j}^n(t-s)} M[f](s, \mathbf{x}_{1/2,j} - \frac{v}{\eta}(t-s)\mathbf{\Omega}, v) ds & \text{si } \Omega_x < 0 \end{cases} \quad (4.24)$$

En utilisant des reconstructions similaires à celles introduites précédemment, le flux microscopique d'UGKS au bord (d'ordre 1 en espace) peut alors être établi :

$$\begin{aligned} \phi_{1/2,j}(v, \mathbf{\Omega}) &= \frac{v\Omega_x}{\eta} M[\mathbf{W}_W(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j})](v) \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} \\ &+ \left(A_{1/2,j}^n v \Omega_x f_{1/2,j}^n + C_{1/2,j}^n v \Omega_x M[\mathbf{W}_{1/2,j}^n] + D_{1/2,j}^n v^2 \Omega_x^2 \delta_x^R M_{1/2,j}^n \right) \mathbb{1}_{\Omega_x < 0}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Le flux macroscopique au bord est toujours l'intégrale du flux microscopique : $\Phi_{1/2,j} = \langle \langle \Psi \phi_{1/2,j} \rangle \rangle$. De la même manière que dans le cas du transport linéaire (voir section 3.2.5), afin que celui-ci reste borné dans la limite de diffusion, l'état macroscopique à l'interface est défini de la manière suivante :

$$\mathbf{W}_{1/2,j}^n = \mathbf{W}_O(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j}). \quad (4.26)$$

Il est alors possible de montrer que les flux aux bords dégénèrent bien dans les deux régimes limites. Si la donnée de bord n'est plus une maxwellienne mais une distribution quelconque f_O , il est toujours possible de modifier l'état macroscopique à l'interface pour obtenir la compensation des deux termes divergent (celui en $\frac{1}{\eta}$ et en $C_{1/2,j}^n$) et ainsi obtenir un flux de diffusion limite borné.

Proposition 4.2.4

Si l'état macroscopique à l'interface $\mathbf{W}_{1/2,j}^n = \left(\rho_{1/2,j}^n \quad \frac{3}{2} \rho_{1/2,j}^n T_{1/2,j}^n \right)^T$ est tel que

$$\begin{cases} \rho_{1/2,j}^n = 2 \sqrt{\pi \frac{\langle \langle v \Omega_x f_O(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j}) \rangle \rangle^3}{\langle \langle \frac{v^3}{2} \Omega_x f_O(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j}) \rangle \rangle}} \\ T_{1/2,j}^n = \frac{\langle \langle \frac{v^3}{2} \Omega_x f_O(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j}) \rangle \rangle}{2 \langle \langle v \Omega_x f_O(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j}) \rangle \rangle} \end{cases}, \quad (4.27)$$

alors le flux macroscopique $\Phi_{1/2,j}^n$ reste borné.

Démonstration : Tout d'abord, un calcul direct permet de montrer que les flux de la maxwellienne sur le demi-espace sont (voir annexe D)

$$\langle \langle v \Psi \Omega_x M[W] \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \rangle \rangle = -\frac{\rho}{2} \sqrt{\frac{2T}{\pi}} \left(\frac{1}{2T} \right). \quad (4.28)$$

De la même manière que précédemment, ces flux (associé au terme en C dans (4.25)) doivent compenser le flux de transport issu des particules entrantes, qui est dans ce cas :

$$\left\langle \left\langle \frac{v\Omega_x}{\eta} f_O(t_n, \mathbf{x}_{1/2,j}, v, \mathbf{\Omega}) \mathbb{1}_{\Omega_x \geq 0} \right\rangle \right\rangle.$$

La compensation des flux se traduit par l'équation suivante :

$$\langle\langle v\Psi(v)\Omega_x M[W]\mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \rangle\rangle + \langle\langle v\Psi(v)\Omega_x f_O\mathbb{1}_{\Omega_x > 0} \rangle\rangle = 0, \quad (4.29)$$

La résolution de cette équation permet de définir l'état à l'interface adéquatement. ■

Cette modification permet seulement de conserver un flux borné mais ne tient pas compte de la couche limite limite qui peut se former au bord.

4.2.5 Schémas de diffusion alternatifs

Il a été mis en évidence dans la section 4.2.3 que les pentes de la reconstruction de la maxwellienne conditionne entièrement le schéma de diffusion limite. Dans (4.11), les variables conservatives \mathbf{W} sont utilisées pour les exprimer. Ce choix résulte en un schéma limite pour le système de diffusion dans lequel le gradient $\nabla_{\mathbf{x}} \frac{q^2}{\rho}$ est développé en $2\frac{q}{\rho}\nabla_{\mathbf{x}}q - \frac{q^2}{\rho^2}\nabla_{\mathbf{x}}\rho$ (voir relation (2.53)). De ce fait, les grandeurs à l'interface interviennent dans les flux, ce qui n'est pas naturel. D'autres choix sont possibles pour exprimer les pentes. L'un d'eux est par exemple d'utiliser les variables non conservatives.

Proposition 4.2.5 (Schéma sur les variables non-conservatives)

Soit $\mathbf{Z} = (\rho \ T)^T$, le vecteur des variables non conservatives. Pour obtenir un schéma de diffusion sur les variables non-conservatives, les pentes spatiales de la maxwellienne (4.15) doivent désormais s'exprimer à partir de différences finies sur \mathbf{Z} et la matrice est

$$K(\mathbf{Z}) = M[\mathbf{Z}] \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho} & -\frac{3}{2T} \\ 0 & \frac{1}{2T^2} \end{pmatrix}. \quad (4.30)$$

Dans la limite de diffusion, les flux macroscopiques associés tendent vers les flux usuels d'ordre 2 en espace pour le système de diffusion écrit sous forme non-conservative :

$$\Phi_{i+1/2,j}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{\sigma_{i+1/2,j}} \left[T_{i+1/2,j}^n \frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\Delta x} + \rho_{i+1/2,j}^n \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right], \quad (4.31a)$$

$$\Phi_{i+1/2,j}^q \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-5}{2\sigma_{i+1/2,j}} \left((T_{i+1/2,j}^n)^2 \frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\Delta x} + 2\rho_{i+1/2,j}^n T_{i+1/2,j}^n \frac{T_{i+1,j}^n - T_{i,j}^n}{\Delta x} \right). \quad (4.31b)$$

Ce choix donne lieu à des flux pour le système de diffusion écrit à partir des variables non conservatives, dans lequel les gradients : $\nabla_{\mathbf{x}}\rho T$, $\nabla_{\mathbf{x}}\rho T^2$ sont développés. De ce fait, les grandeurs aux interfaces interviennent toujours. Le schéma naturel (2.55) (obtenu pour le système écrit sans développer le gradient (2.53)) peut être retrouvé en utilisant le jeu de variable adéquat dans la reconstruction.

Proposition 4.2.6 (Schéma naturel)

Soient $w = \frac{q^2}{\rho}$ et $\mathbf{Y} = (q \ w)$. Si le jeu de variables utilisé pour reconstruire la maxwellienne est \mathbf{Y} alors, la matrice intervenant dans les pentes de la reconstruction est

$$K(\mathbf{Y}) = M[\mathbf{Y}] \begin{pmatrix} \frac{7}{2q} & -\frac{3}{2w} \\ -\frac{5}{2w} & \frac{3q}{2w^2} \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

et les flux limites de diffusion associés sont ceux obtenus pour le système de diffusion écrit

sans développer le gradient (2.55) :

$$\Phi_{i+1/2,j}^{\rho} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{-2}{\sigma_{i+1/2,j}} \frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{\Delta x}, \quad (4.33a)$$

$$\Phi_{i+1/2,j}^q \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} \frac{5}{3} \frac{-2}{3\sigma_{i+1/2,j}} \frac{w_{i+1,j}^n - w_{i,j}^n}{\Delta x}. \quad (4.33b)$$

Dans les faits, tant que les données sont régulières, le choix du schéma de diffusion n'est pas très important et donc n'importe quelle reconstruction peut être adoptée. Cependant, ces deux propositions alternatives peuvent être plus délicates à utiliser puisque dans la limite où la densité tend vers 0, la température et y ne sont pas bien définis.

4.3 UGKS-M1

Cette section se concentre sur la résolution du modèle M1 du transport électronique (1.53)-(1.60) qui est rappelé ici sous forme développée :

$$\begin{cases} \partial_t f^{(0)} + \frac{v}{\eta} \nabla \cdot \mathbf{f}^{(1)} &= \nu (4\pi M[f^{(0)}] - f^{(0)}) \\ \partial_t \mathbf{f}^{(1)} + \frac{v}{\eta} \nabla \cdot \mathbf{f}^{(2)} &= -\nu \mathbf{f}^{(1)} \end{cases},$$

où $\mathbf{f}^{(i)}(v) = \langle \boldsymbol{\Omega}^{\otimes i} f(v, \boldsymbol{\Omega}) \rangle$ sont les moments angulaires de la fonction de distribution, $M[f^{(0)}]$ est la maxwellienne associée à $f^{(0)}$ (1.44) et $\nu = \frac{\sigma(\mathbf{x})}{\epsilon\eta}$ est la fréquence de collision (1.43).

4.3.1 Une fermeture entropique d'UGKS

Dans cette section, un nouveau schéma pour le modèle M1 du transport électronique est proposé. L'approche générale est identique à celle introduite dans la section 3.3 pour le transport linéaire. L'idée principale est d'appliquer UGKS à la fonction de distribution M1 : $\hat{f}_{i,j}^n(v, \boldsymbol{\Omega})$, reconstruite à partir du vecteur des moments $\mathbf{U}_{i,j}^n(v)^T = \left(f_{i,j}^{0,n}(v) \quad \mathbf{f}_{i,j}^{1,n}(v) \right)$. Ensuite les variables macroscopiques au temps t_{n+1} sont les moments de $\hat{f}_{i,j}^{n+1}(v, \boldsymbol{\Omega})$. La formulation volumes finis du modèle aux moments est obtenue en intégrant celle du schéma (4.5) contre le vecteur de la hiérarchie $\mathbf{m}(\boldsymbol{\Omega})^T = (1 \quad \boldsymbol{\Omega})$:

$$\frac{\mathbf{U}_{i,j}^{n+1} - \mathbf{U}_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{(\boldsymbol{\chi}_{i+1/2,j} - \boldsymbol{\chi}_{i-1/2,j})}{\Delta x_i} + \frac{(\boldsymbol{\chi}_{i,j+1/2} - \boldsymbol{\chi}_{i,j-1/2})}{\Delta y_j} = \nu(\mathbf{W}_{i,j}^{n+1})\mathbf{S}(\mathbf{U}_{i,j}^{n+1}), \quad (4.34)$$

où $\boldsymbol{\chi}_{i+1/2,j} = \langle \mathbf{m}(\boldsymbol{\Omega}) \phi_{i+1/2,j}(\cdot, \boldsymbol{\Omega}) \rangle = \left(\chi_{i+1/2,j}^0 \quad \boldsymbol{\chi}_{i+1/2,j}^1 \right)^T \in \mathbb{R}^4$ est le flux mésoscopique du modèle M1 et $\mathbf{S}(\mathbf{U}) = (M_0[\mathbf{U}] \quad \mathbf{0})^T - \mathbf{U}$ est le terme source. Ce vecteur des flux est calculé en intégrant le flux microscopique d'UGKS contre $\mathbf{m}(\boldsymbol{\Omega})$ et en fermant la fonction de distribution à l'intérieur : $f_{i,j}^n = \hat{f}_{i,j}^n$. Tout d'abord, commençons par expliciter les flux dans le cas où la partie affine de la reconstruction de la fonction de distribution (4.9) est négligée.

Proposition 4.3.1 (UGKS-M1)

Si le pas du maillage est constant, alors les flux mésoscopiques d'UGKS-M1 sont

$$\begin{aligned} \chi_{i+1/2,j}^0(v) = & A_{i+1/2,j}^n v \left\langle \Omega_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \Omega_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \\ & + \frac{D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} v^2 \Psi^T \mathbf{K}_0 \left(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n \right) \left(\mathbf{W}_{i+1,j}^n - \mathbf{W}_{i,j}^n \right), \end{aligned} \quad (4.35a)$$

$$\begin{aligned} \chi_{i+1/2,j}^1(v) = & A_{i+1/2,j}^n v \left\langle \Omega_x \Omega \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \Omega_x \Omega \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \\ & + \frac{C_{i+1/2,j}^n}{3} v M_0[\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n] \mathbf{e}_x \\ & - \frac{D_{i+1/2,j}^n}{4\Delta x} v^2 \Psi^T \mathbf{K}_0 \left(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n \right) \left(\mathbf{W}_{i+1,j}^n - 2\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n + \mathbf{W}_{i,j}^n \right) \mathbf{e}_x, \end{aligned} \quad (4.35b)$$

où $\mathbf{K}_0(\mathbf{W}) = \langle \mathbf{K}(\mathbf{W}) \rangle$. De plus, les deux composantes du flux macroscopique sont

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2,j}^\rho = & A_{i+1/2,j}^n \left\langle \left\langle v \Omega_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v \Omega_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ & + \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} (q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n), \end{aligned} \quad (4.36a)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2,j}^q = & \frac{A_{i+1/2,j}^n}{2} \left\langle \left\langle v^3 \Omega_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^3 \Omega_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ & + \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \frac{5(q_{i+1/2,j}^n)^2}{3\rho_{i+1/2,j}^n} \left(-\frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\rho_{i+1/2,j}^n} + 2\frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{q_{i+1/2,j}^n} \right). \end{aligned} \quad (4.36b)$$

Démonstration : Les flux mésoscopiques sont obtenus en utilisant les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \langle \Omega_i \rangle = 0, \quad \langle \Omega_i^2 \rangle = \frac{4\pi}{3}, \quad \langle \Omega_i \Omega_j \rangle = 0, \\ \langle \Omega_i^2 \mathbb{1}_{\Omega_i \geq 0} \rangle = \frac{4\pi}{6}, \quad \langle \Omega_i^3 \mathbb{1}_{\Omega_i \geq 0} \rangle = \pm \frac{4\pi}{8}, \quad \langle \Omega_i^2 \Omega_j \mathbb{1}_{\Omega_i \geq 0} \rangle = 0. \end{aligned} \quad \blacksquare$$

Il vient alors immédiatement qu'UGKS-M1 hérite de la propriété de préservation de l'asymptotique d'UGKS énoncé dans la proposition 4.2.3.

Proposition 4.3.2 (Préservation de l'asymptotique)

Dans la limite de diffusion, les flux macroscopiques discrétisent bien le système de diffusion. De ce fait, UGKS-M1 préserve l'asymptotique du modèle aux moments M1.

Afin de pouvoir utiliser et implémenter ce schéma, plusieurs problèmes se posent. Tout d'abord, la variable cinétique v dont dépend les moments angulaires \mathbf{U} doit être discrétisée et une formule de quadrature doit être fournie pour calculer les flux macroscopiques dans laquelle des intégrales sur v interviennent. De plus, il est aussi nécessaire de calculer les demi-moments des fonctions de distribution M1 sur la sphère qui apparaissent dans les flux. Ceux-ci ne sont *a priori* pas analytiques.

Enfin, l'ordre 2 en espace peut être obtenu en utilisant la reconstruction complète de la fonction de distribution dans UGKS. Ces différents aspects du schéma sont discutés dans les sections suivantes.

4.3.2 Demi-moments angulaires de la fonction de distribution M1

En dépit du fait que les moments angulaires sur la sphère de la fonction de distribution M1 sont analytiques, ceux sur les demi-sphères ne le sont pas. Ceux-ci s'écrivent sous la forme :

$$\left\langle \Omega_x^i \Omega_y^j \Omega_z^k \hat{f}(\mathbf{\Omega}) \mathbb{1}_{\Omega_{xyz} \geq 0} \right\rangle = \frac{f^{(0)}}{4\pi} \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|}{\sinh \|\boldsymbol{\beta}\|} \int_{\mathbb{S}^2} \Omega_x^i \Omega_y^j \Omega_z^k e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{\Omega}} \mathbb{1}_{\Omega_{xyz} \geq 0} d\Omega,$$

où $(i, j, k) \in \mathbb{N}^3$ et $\boldsymbol{\beta}$ est la variable entropique vérifiant (1.59b). Pour les évaluer, il serait possible d'utiliser une quadrature sur la sphère (comme celle de Lebedev par exemple). Cependant cette stratégie est sous-optimale puisqu'elle revient finalement à réintroduire la variable cinétique éliminée par le modèle au moment, ce qui enlève tout l'intérêt des modèles réduits. Dans cette section, une nouvelle méthode de quadrature est proposée pour évaluer les demi-moments nécessaires à UGKS-M1 (dans sa version d'ordre 1 en espace).

Par soucis de simplicité, les demi-moments de la fonction de distribution M1 sont donnés sur la demi-sphère $\{\mathbf{\Omega} \in \mathbb{S}^2 \mid \Omega_z \geq 0\}$. Une simple rotation de la variable entropique $\boldsymbol{\beta}$ permet de retrouver toutes les quantités dans chacune des directions du maillage. Tout d'abord, les deux premiers moments sont réécrits sous une forme adaptée pour une quadrature.

Proposition 4.3.3

Sous la forme d'une intégrale unidimensionnelle, les premiers demi-moments de la fonction de distribution M1 sont (pour tout entier k positif)

$$\left\langle \Omega_z^k \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \right\rangle = f_0 \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|}{2 \sinh \|\boldsymbol{\beta}\|} \int_0^1 \mu^k e^{\beta_z \mu} I_0(\beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2}) d\mu, \quad (4.37a)$$

$$\left\langle \Omega_z^k \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \end{pmatrix} \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z > 0} \right\rangle = f_0 \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|}{2 \sinh \|\boldsymbol{\beta}\|} \begin{pmatrix} \cos \varphi_0 \\ \sin \varphi_0 \end{pmatrix} \int_0^1 \mu^k \sqrt{1 - \mu^2} e^{\beta_z \mu} I_1(\beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2}) d\mu, \quad (4.37b)$$

où $\beta_{xy} = \sqrt{\beta_x^2 + \beta_y^2}$ est la norme du vecteur projeté, $\varphi_0 = \arctan \frac{\beta_y}{\beta_x} - (1 - \text{sgn } \beta_x) \frac{\pi}{2}$ est une phase et I_n est la fonction de Bessel modifiée de première espèce définie par :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \forall x \in \mathbb{R}_+, I_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\phi) e^{x \cos \phi} d\phi. \quad (4.38)$$

Démonstration : Tout d'abord, adoptons le système de coordonnées sphérique (μ, φ) , où $\mu \in [-1, 1]$ est le cosinus de la colatitude et $\varphi \in [-\pi, \pi]$ est la longitude. Le vecteur unitaire sur la sphère est

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi \\ \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi \\ \mu \end{pmatrix}.$$

Dans ce système, le domaine d'intégration s'exprime facilement et les premiers moments sont :

$$\begin{aligned} \left\langle \Omega_z^k \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \right\rangle &= \int_{\mathbb{S}^2} \Omega_z^k e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{\Omega}} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} d\Omega \\ &= f_0 \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|}{4\pi \sinh \|\boldsymbol{\beta}\|} \int_0^1 \mu^k e^{\beta_z \mu} \int_{-\pi}^\pi e^{\beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi - \varphi_0)} d\varphi d\mu \\ &= f_0 \frac{\|\boldsymbol{\beta}\|}{2 \sinh \|\boldsymbol{\beta}\|} \int_0^1 \mu^k e^{\beta_z \mu} I_0(\beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2}) d\mu. \end{aligned}$$

Les moments suivants sont :

$$\begin{aligned}
\langle \Omega_z^k \Omega_x \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \rangle &= \int_{\mathbb{S}^2} \Omega_z^k \Omega_x e^{\alpha + \beta \cdot \Omega} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} d\Omega \\
&= f_0 \frac{\|\beta\|}{4\pi \sinh \|\beta\|} \int_0^1 \mu^k \sqrt{1 - \mu^2} e^{\beta_z \mu} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \right) e^{\beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\varphi - \varphi_0)} d\varphi d\mu \\
&= f_0 \frac{\|\beta\|}{4\pi \sinh \|\beta\|} \left(\frac{\cos \varphi_0}{\sin \varphi_0} \right) \int_0^1 \mu^k \sqrt{1 - \mu^2} e^{\beta_z \mu} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \right) e^{\beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi} d\varphi d\mu \\
&= f_0 \frac{\|\beta\|}{2 \sinh \|\beta\|} \left(\frac{\cos \varphi_0}{\sin \varphi_0} \right) \int_0^1 \mu^k \sqrt{1 - \mu^2} e^{\beta_z \mu} \mathbf{I}_1(\beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2}) d\mu. \quad \blacksquare
\end{aligned}$$

Ces intégrales unidimensionnelles sont ensuite approchées par une quadrature de Gauss-Legendre, l'approximation est alors notée $\langle \cdot \rangle_{GL}$. Cette procédure n'assure *a priori* pas la consistance des flux dans le régime de transport¹. Pour obtenir cette propriété, les formules de quadrature sur les demi-sphères doivent être consistantes avec la valeur exacte sur la sphère entière. Autrement dit, au niveau discret la somme des deux demi-moments doit donner exactement la valeur du moment total (qui est analytique). Par exemple le premier moment doit vérifier la propriété suivante :

$$\langle \Omega_z \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z > 0} \rangle_{GL} + \langle \Omega_z \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z < 0} \rangle_{GL} = \langle \Omega_z \hat{f} \rangle. \quad (4.39)$$

Or le flux de la distribution M1 est analytique et vaut :

$$\langle \Omega_z \hat{f} \rangle = \|\mathbf{f}^{(1)}\| \frac{\beta_z}{\|\beta\|}.$$

Ainsi, en renormalisant les demi-moments par la quantité :

$$\frac{1}{\langle \Omega_z \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \rangle_{GL} + \langle \Omega_z \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_z \leq 0} \rangle_{GL}} \|\mathbf{f}^{(1)}\| \frac{\beta_z}{\|\beta\|}, \quad (4.40)$$

il est possible d'obtenir la propriété de consistance à l'échelle discrète. La procédure est similaire avec les autres moments.

Remarque 4.3.1 (*Fonction de Bessel*)

Le jeu de réécriture permettant d'exprimer les demi-moments sous la forme d'intégrale 1D se fait au prix de l'introduction d'une fonction spéciale. En pratique, l'évaluation numérique de cette fonction est faite avec un algorithme de la bibliothèque présentée dans [14].

4.3.3 Discrétisation de l'espace des vitesses

Jusqu'à maintenant, la variable cinétique v a été conservée continue dans le développement d'UGKS et d'UGKS-M1. En pratique, celle-ci est discrétisée. Le problème principal est que cette variable est à valeur dans \mathbb{R}_+ , qui est un espace non borné. De ce fait, il doit être tronqué et un critère doit être choisi pour cela. En fonction de la situation physique, il est possible de définir une borne supérieure v_m au delà de laquelle les fonctions de distributions sont toutes majorées par un certain seuil. Cette borne dépend l'état macroscopique dans le domaine et doit donc être supposée au préalable en fonction de la situation physique.

¹. Dans la limite de transport, le modèle M1 peut être fortement imprécis par rapport à l'équation cinétique. Cependant, cette propriété de consistance est importante d'un point de vue numérique.

Soient $(v_k)_{k \leq m}$ l'ensemble des vitesses discrètes dans $[0, v_m]$ et Δv un pas de vitesse. La mise à jour des variables mésoscopiques se fait en chacun des points de discrétisation v_k . Cependant, des intégrales sur l'espace des vitesses doivent être évaluées dans le flux macroscopique. Une formule de quadrature doit donc être introduite. Soit $u : v \rightarrow u(v)$ n'importe quelle fonction de v (intégrable sur \mathbb{R}_+), l'intégrale de cette fonction peut être approchée par la formule de quadrature composite des trapèzes qui est

$$\int_0^{v_m} u(v) dv \approx \frac{\Delta v}{2} \sum_{k=0}^{m-1} (u(v_k) + u(v_{k+1})).$$

Soit $\hat{f}_{i,j,k}^n(\mathbf{\Omega})$ la fonction de distribution M1 à la vitesse v_k représenté par le vecteur des variables M1 : $\mathbf{U}_{i,j,k}^n = \mathbf{U}_{i,j}^n(v_k)$. Les intégrales dans les flux macroscopiques sont approchées par la formule précédente :

$$\forall p \geq 1, \left\langle \left\langle v^p \hat{f}_{i,j}^n(v, \cdot) \right\rangle \right\rangle \approx \frac{\Delta v}{2} \sum_{k=0}^{m-1} \left(\left\langle v_k^p \hat{f}_{i,j,k}^n \right\rangle + \left\langle v_{k+1}^p \hat{f}_{i,j,k+1}^n \right\rangle \right), \quad (4.41)$$

Cette formule peut être adaptée pour exactement intégrer l'équilibre maxwellien et ses moments. Cependant cette propriété n'est pas requise pour obtenir un bon schéma de diffusion dans la limite asymptotique.

4.3.4 Ordre élevé en espace

La version d'ordre 1 d'UGKS-M1 a été obtenue en négligeant la partie affine de la reconstruction de la fonction de distribution. Pour retrouver l'ordre 2 en espace, la même idée que celle présentée pour le transport linéaire est utilisée. Tout d'abord les variables M1 sont reconstruites par une fonction affine par maille :

$$\mathbf{U}_{i,j}^n(x, \cdot) = \begin{cases} \mathbf{U}_{i,j}^n + \delta_x \mathbf{U}_{i,j}^n (x - x_{i,j}) & \text{si } x < x_{i+1/2,j} \\ \mathbf{U}_{i+1,j}^n + \delta_x \mathbf{U}_{i+1,j}^n (x - x_{i+1,j}) & \text{si } x > x_{i+1/2,j} \end{cases},$$

où les pentes $\delta_x \mathbf{U}_{i,j}^n$ sont limitées composantes par composantes par un limiteur de pente Ψ . Sur un maillage à pas constant, celles-ci sont

$$\delta_x \mathbf{U}_{i,j}^n = \Psi \left(\frac{\mathbf{U}_{i+1,j}^n - \mathbf{U}_{i,j}^n}{\Delta x}, \frac{\mathbf{U}_{i,j}^n - \mathbf{U}_{i-1,j}^n}{\Delta x}, \frac{\mathbf{U}_{i+1,j}^n - \mathbf{U}_{i-1,j}^n}{2\Delta x} \right).$$

Dans UGKS-M1, la reconstruction de la fonction de distribution est désormais définie de la manière suivante :

$$f(t_n, \mathbf{x}, \cdot, \cdot) = \begin{cases} \hat{f}_{i,j}^n + \delta_x \hat{f}_{i,j}^n (x - x_{i,j}) & \text{si } x \leq x_{i+1/2} \\ \hat{f}_{i+1,j}^n + \delta_x \hat{f}_{i+1,j}^n (x - x_{i+1,j}) & \text{si } x \geq x_{i+1/2} \end{cases},$$

où les nouvelles pentes sont calculées à partir d'un développement limité de $\hat{f}(\mathbf{U}_{i,j}^n(x)) = \exp(\mathbf{\Lambda}(\mathbf{U}_{i,j}^n(x)) \cdot \mathbf{m})$. Celles-ci s'expriment à partir des pentes issues de la reconstruction des variables M1 et de la jacobienne de l'application $\mathbf{U} \rightarrow \mathbf{\Lambda}(\mathbf{U})$:

$$\delta_x \hat{f}_{i,j}^n = \mathbf{m}^T \hat{f}(\mathbf{U}_{i,j}^n) \mathbf{J}_{\mathbf{\Lambda}}(\mathbf{U}_{i,j}^n) \delta \mathbf{U}_{i,j}^n. \quad (4.42)$$

Proposition 4.3.4 (Calcul de la Jacobienne)

La jacobienne de l'application qui aux variables conservatives associe les variables entro-

piques est

$$\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}) = \frac{(f^{(0)})^{-1}}{\xi} \begin{pmatrix} 1 - 2\frac{u}{\|\beta\|} & & -\mathbf{u}^T \\ -\mathbf{u} & \frac{\|\beta\|}{u}\xi\mathbf{I}_3 + (1 - \frac{\|\beta\|}{u}\xi)\frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} \otimes \frac{\mathbf{u}}{\|\mathbf{u}\|} \end{pmatrix}, \quad (4.43)$$

où $\xi = 1 - 2\frac{u}{\|\beta\|} - u^2$.

Démonstration : Tout d'abord, la Jacobienne de l'application réciproque $\mathbf{U} \rightarrow \Lambda(\mathbf{U})$ est

$$\mathbf{J}_\mathbf{U}(\Lambda) = \begin{pmatrix} f^{(0)} & (\mathbf{f}^{(1)})^T \\ \mathbf{f}^{(1)} & \mathbf{f}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

Soit $\mathbf{R} \in M_3(\mathbb{R})$ une matrice de rotation telle que $\mathbf{R}\beta = \|\beta\|\mathbf{e}_z$. Pour poursuivre le calcul, les moments f_1 et f_2 sont écrits en fonction de celle-ci. Une simple factorisation permet de montrer que :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_\mathbf{U}(\Lambda) &= f^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & (\mathbf{R}\mathbf{u})^T \\ \mathbf{R}\mathbf{u} & \frac{u}{\|\beta\|}\mathbf{I}_3 + (1 - 3\frac{u}{\|\beta\|})\mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{pmatrix} \\ &= f^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & u \\ 0 & \frac{u}{\|\beta\|} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{u}{\|\beta\|} & 0 \\ u & 0 & 0 & 1 - 2\frac{u}{\|\beta\|} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

La Jacobienne de l'application initiale est l'inverse de la Jacobienne de l'application réciproque :

$$\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}) = \frac{(f^{(0)})^{-1}}{\xi} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - 2\frac{u}{\|\beta\|} & 0 & 0 & -u \\ 0 & \xi\frac{\|\beta\|}{u} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \xi\frac{\|\beta\|}{u} & 0 \\ -u & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}^T \end{pmatrix}. \quad (4.45)$$

où le déterminant de la matrice externe est $\xi = 1 - 2\frac{u}{\|\beta\|} - u^2$. Le résultat final est obtenu en ré-applicant les rotations à gauche et à droite. \blacksquare

Les flux d'ordre 2 sont alors obtenus en intégrant les flux d'ordre 2 d'UGKS dans lequel les pentes des fonctions de distribution sont calculées à partir de (4.42). Cette modification induit deux nouveaux termes dans les flux mésoscopiques (4.35) :

$$\begin{aligned} &A_{i+1/2,j}^n v \frac{\Delta x}{2} \left\langle \Omega_x \mathbf{m}(\Omega) \delta_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} - \Omega_x \mathbf{m}(\Omega) \delta_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \\ &+ B_{i+1/2}^n v^2 \left\langle \Omega_x^2 \mathbf{m}(\Omega) \delta_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \Omega_x^2 \mathbf{m}(\Omega) \delta_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.46)$$

et deux autres dans le vecteur des flux macroscopiques (4.36) :

$$\begin{aligned} &A_{i+1/2,j}^n \frac{\Delta x}{2} \left\langle \left\langle v \Psi(v) \Omega_x \delta_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} - v \Psi(v) \Omega_x \delta_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ &+ B_{i+1/2}^n \left\langle \left\langle v^2 \Psi(v) \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^2 \Psi(v) \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Dans ces nouveaux flux, des moments d'ordre supérieur des fonctions de distribution M1 apparaissent. Ceux-ci peuvent être calculés numériquement en suivant la même démarche que celle exposée dans la section (4.3.2). Leurs expressions sont dans l'annexe F. Ces demi-moments peuvent aussi être renormalisés pour assurer la consistance du schéma numérique. Néanmoins, en pratique cette modification ne semble pas modifier les solutions. Dans les faits, cette étape n'est donc pas réalisée puisqu'elle augmente significativement le coût de calcul et la complexité de mise en oeuvre (du fait de l'évaluation de \mathbf{f}_3 et \mathbf{f}_4 , qui sont aussi analytiques). L'expression globale des flux complets peut être trouvée dans l'annexe G.

4.4 Extension aux maillages non structurés

Dans cette section, une extension à UGKS-M1 est proposée pour traiter des maillages non structurés. Le formalisme introduit dans la section 2.4.2 du chapitre 2 est repris. Il est désormais supposé que le domaine \mathcal{D} est représenté par un maillage \mathcal{T} conforme au sens des volumes finis et que chacune des mailles sont des polygones.

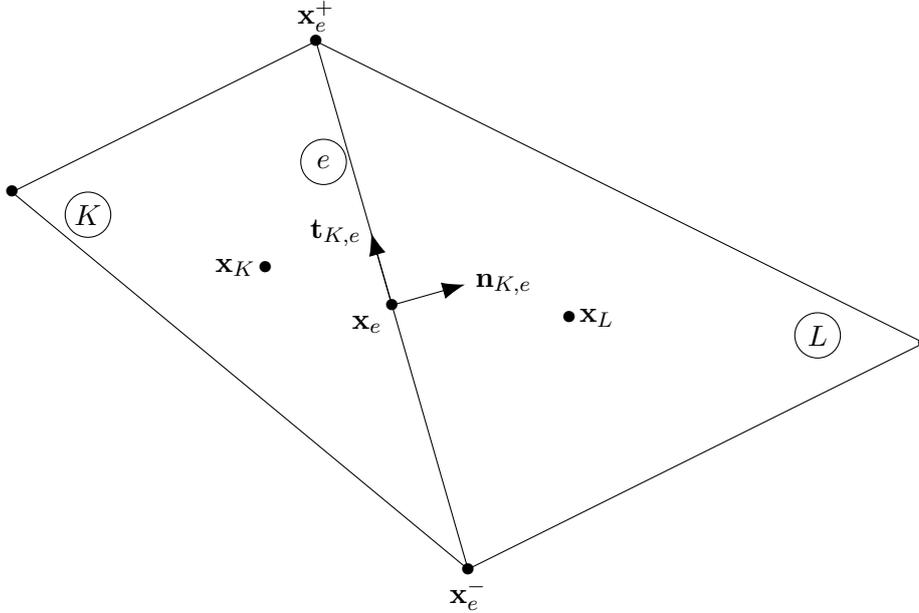


FIGURE 4.1 – Deux mailles d'un maillage non structuré triangulaire

En pratique, les maillages considérés sont triangulaires mais les développements sont valables sur des maillages plus généraux formés de polygones.

4.4.1 UGKS

Tout d'abord, le développement d'UGKS est brièvement repris sur un maillage non structuré. La formulation volumes finis de l'équation du transport électronique sur ce nouveau maillage est pour toute maille $K \in \mathcal{T}$:

$$\frac{f_K^{n+1} - f_K^n}{\Delta t} + \sum_{e \in \mathcal{F}_K} \frac{|e|}{|K|} \phi_{K,e} = \nu(\mathbf{W}_K^{n+1}) (M[\mathbf{W}_K^{n+1}] - f_K^{n+1}), \quad (4.48)$$

où f_K^n est la moyenne de la fonction de distribution dans la maille K à l'instant t_n et $\phi_{K,e}$ est le flux moyen à travers la face e sortant de la maille K vers une autre maille $L \in \mathcal{T}$:

$$\phi_{K,e} = \frac{1}{\eta \Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} v \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_{K,e} f(t, \mathbf{x}_e, v, \boldsymbol{\Omega}) dt. \quad (4.49)$$

D'un point de vue algorithmique, les variables macroscopiques sont toujours calculées au préalable avec la formulation volumes finis macroscopique associée. Par rapport au développement précédent sur maillage cartésien, le flux numérique doit désormais être établi dans une direction $\mathbf{n}_{K,e}$ arbitraire. De plus, les reconstructions doivent être adaptées avant de les employer dans la formule de Duhamel (4.8) (écrite cette fois au centre de la face \mathbf{x}_e). Par soucis de simplicité, le schéma ne sera développé qu'à l'ordre 1 en espace. De ce fait, une reconstruction constante par maille de la fonction de distribution est adoptée :

$$\tilde{f}(t_n, \mathbf{x}, \cdot, \cdot) = \begin{cases} f_K^n & \text{si } (\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) \cdot \mathbf{n}_{K,e} \leq 0 \\ f_L^n & \text{si } (\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) \cdot \mathbf{n}_{K,e} \geq 0 \end{cases}. \quad (4.50)$$

La reconstruction de la maxwellienne est toujours choisie continue au niveau de l'interface :

$$\tilde{M}(t, \mathbf{x}, \cdot) = M[\mathbf{W}_e^n] + \begin{cases} \nabla_{\mathbf{x}}^- M_e^n \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) & \text{si } (\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) \cdot \mathbf{n}_{K,e} \leq 0 \\ \nabla_{\mathbf{x}}^+ M_e^n \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) & \text{si } (\mathbf{x} - \mathbf{x}_e) \cdot \mathbf{n}_{K,e} \geq 0 \end{cases}. \quad (4.51)$$

Tout comme sur maillage cartésien, les pentes de la maxwellienne sont tout d'abord reliées aux pentes des grandeurs macroscopiques.

Proposition 4.4.1 (Gradient Maxwellienne)

Les pentes de la maxwellienne de part et d'autre de la face, s'écrivent sous la forme :

$$\nabla_{\mathbf{x}}^{\pm} M_e^n = \begin{pmatrix} \partial_n^{\pm} M_e^n \\ \partial_t^{\pm} M_e^n \end{pmatrix} = (\mathbf{K}(\mathbf{W}_e^n) \nabla_{\mathbf{x}}^{\pm} \mathbf{W}_e^n)^T \boldsymbol{\Psi}, \quad (4.52)$$

où \mathbf{K} est la matrice définie par (4.14) et où les gradients du vecteur des variables macroscopiques sont dans la base $(\mathbf{n}_e, \mathbf{t}_e)$:

$$\nabla_{\mathbf{x}}^{\pm} \mathbf{W}_e^n = \begin{pmatrix} \partial_n^{\pm} \rho_e^n & \partial_t^{\pm} \rho_e^n \\ \partial_n^{\pm} q_e^n & \partial_t^{\pm} q_e^n \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

Démonstration : La preuve de ce résultat est similaire est celle de la proposition 4.2.1. La formule de la chaîne est utilisée pour exprimer les gradients dans les deux directions puis le résultat est réécrit sous forme matricielle. ■

Les flux d'UGKS peuvent alors être établis à partir des deux reconstructions (4.50)-(4.51) et de pentes spatiales génériques.

Proposition 4.4.2 (UGKS)

Le flux microscopique d'UGKS est

$$\begin{aligned} \phi_{K,e}(v, \boldsymbol{\Omega}) &= A_e^n v \Omega_n (f_K^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + f_L^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0}) \\ &\quad + C_e^n v \Omega_n M[\mathbf{W}_e^n] \\ &\quad + D_e^n v^2 \Omega_n^2 (\delta_n^- M_e^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + \delta_n^+ M_e^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0}) \\ &\quad + D_e^n v^2 \Omega_n \Omega_t (\delta_t^- M_e^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + \delta_t^+ M_e^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0}), \end{aligned} \quad (4.54)$$

où $\Omega_n = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}_{K,e}$ et où les coefficients d'intégrations sont définis à partir des fonctions

correspondantes (3.15), évaluées en $\nu_e^n = \frac{1}{2}(\nu_K^n + \nu_L^n)$. De plus, les deux composantes du flux macroscopique d'UGKS sont

$$\begin{aligned} \Phi_{K,e}^\rho &= A_e^n \langle \langle v \Omega_n f_k^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + v \Omega_n f_L^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0} \rangle \rangle \\ &\quad + \frac{2D_e^n}{3} \frac{\delta_n^- q_e + \delta_n^+ q_e}{2}, \end{aligned} \quad (4.55a)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{K,e}^q &= \frac{A_e^n}{2} \langle \langle v^3 \Omega_n f_k^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + v^3 \Omega_n f_L^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0} \rangle \rangle \\ &\quad + \frac{2D_e^n}{3} \frac{5(q_e^n)^2}{3\rho_e^n} \left(-\frac{\delta_n^- \rho_e + \delta_n^+ \rho_e}{2\rho_e^n} + 2\frac{\delta_n^- q_e + \delta_n^+ q_e}{2q_e^n} \right). \end{aligned} \quad (4.55b)$$

Il reste désormais à fournir une définition de \mathbf{W}_e ainsi qu'une approximation des dérivées normales et tangentielles des grandeurs macroscopiques de part et d'autre de la face. Ces questions sont discutées dans la section suivante.

Remarque 4.4.1

La partie tangentielle de la reconstruction de la maxwellienne n'intervient pas dans le flux macroscopique et n'altère donc pas le régime asymptotique.

4.4.2 Définition des états macroscopiques

Dans les flux macroscopiques, les termes en D_e^n conditionnent totalement les flux de diffusion dans la limite. La définition des pentes de la maxwellienne (de part et d'autre de la face) est donc cruciale pour obtenir les bons flux limites. Dans leur forme générique, leurs limites sont :

$$\Phi_{K,e}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \frac{\delta_n^- q_e + \delta_n^+ q_e}{2}, \quad (4.56a)$$

$$\Phi_{K,e}^q \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \frac{5(q_e^n)^2}{3\rho_e^n} \left(-\frac{\delta_n^- \rho_e + \delta_n^+ \rho_e}{2\rho_e^n} + 2\frac{\delta_n^- q_e + \delta_n^+ q_e}{2q_e^n} \right). \quad (4.56b)$$

Il apparaît alors qu'une condition suffisante pour obtenir un bon flux est que les demi-pentes doivent vérifier une propriété de consistance avec la pente totale. Autrement dit, la moyenne des deux demi-pentes doit correctement approcher le gradient normal entre les mailles K et L. Cette propriété s'écrit sous la forme :

$$\frac{1}{2} (\delta_n^- \mathbf{W}_e^n + \delta_n^+ \mathbf{W}_e^n) = \delta_n \mathbf{W}_e^n, \quad (4.57)$$

où $\delta_n \mathbf{W}_e^n$ est une approximation du gradient normal. L'objectif est donc de correctement définir les demi-pentes pour retrouver une approximation donnée de ce gradient (par exemple celle du schéma diamant (2.60)). Différentes approches sont proposées pour obtenir cette propriété et ainsi obtenir un bon schéma de diffusion dans la limite.

Remarque 4.4.2 (*Schémas de diffusion alternatifs*)

Lorsqu'un autre jeu de variables est utilisé pour reconstruire la Maxwellienne, le schéma macroscopique change en conséquence. Dans le cas général, la condition suffisante pour obtenir un bon flux porte sur la consistance du demi-gradient de chacune des grandeurs choisies (dans la reconstruction) avec le gradient total associé.

4.4.2.1 Schéma de diffusion naïf

Tout d'abord, par soucis de simplicité, essayons d'obtenir le schéma limite naïf (2.59) qui consiste à approcher le gradient normal par le gradient entre le centre des deux mailles. Cette

approche n'est évidemment pas très bonne puisqu'elle suppose que cette direction est colinéaire avec la normale à l'interface $\mathbf{n}_{K,e}$ (ce qui n'est pas le cas pour des maillages déformés). Une première définition naturelle des demi-pentes est

$$\delta_n^- \mathbf{W}_e^n = \frac{\mathbf{W}_e^n - \mathbf{W}_K^n}{l^-}, \quad (4.58a)$$

$$\delta_n^+ \mathbf{W}_e^n = \frac{\mathbf{W}_L^n - \mathbf{W}_e^n}{l^+}, \quad (4.58b)$$

où $l^- = \|\mathbf{x}_e^* - \mathbf{x}_k\|$ et $l^+ = \|\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_e^*\|$. Dans le cas où ces deux longueurs sont égales, la pente totale est

$$\delta_n \mathbf{W}_e^n = \frac{\mathbf{W}_L^n - \mathbf{W}_K^n}{\|\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K\|}, \quad (4.59)$$

qui est bien la (mauvaise) approximation d'ordre 1 du gradient normal $\delta_n \mathbf{W}(t_n, \mathbf{x}_e)$ obtenue par différences finies. La propriété (4.57) est alors vérifiée et ce, quelque soit la définition de l'état macroscopique à l'interface \mathbf{W}_e^n . Cependant, si les longueurs sont différentes, la moyenne des deux pentes ne donne *a priori* pas la bonne pente (4.59). Dans le cas cartésien, ce problème apparaît déjà dans le cas où le maillage n'est pas régulier. Une manière de contourner cette difficulté est de définir l'état macroscopique à l'interface \mathbf{W}_e^n de telle manière que la propriété de consistance (4.57) soit vérifiée.

Proposition 4.4.3 (Etat macroscopique à l'interface)

Supposons $l^+ \neq l^-$, la propriété (4.57) est vérifiée si et seulement si l'état macroscopique à l'interface est

$$\mathbf{W}_e^n = -\frac{l^+ - l^-}{2(l^+ + l^-)}(\mathbf{W}_L^n - \mathbf{W}_K^n) + \frac{1}{2}(\mathbf{W}_K^n + \mathbf{W}_L^n). \quad (4.60)$$

Démonstration : La propriété (4.57) est vérifiée si et seulement si l'état macroscopique vérifie l'équation :

$$\mathbf{W}_e^n = 2l^+l^- \frac{\mathbf{W}_L^n - \mathbf{W}_K^n}{(l^+ - l^-)(l^+ + l^-)} + \frac{l^+ \mathbf{W}_K^n - l^- \mathbf{W}_L^n}{l^+ - l^-}.$$

Soit $x = \frac{l^+ - l^-}{2}$, alors \mathbf{W}_e^n s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{W}_e^n = \frac{1}{2x(l^+ + l^-)} \left[\left(\frac{l^2}{4} - x^2 \right) (\mathbf{W}_L^n - \mathbf{W}_K^n) - \left(\frac{l}{2} - x \right)^2 \mathbf{W}_L^n + \left(\frac{l}{2} + x \right)^2 \mathbf{W}_K^n \right].$$

Le résultat final est alors obtenu en développant et en simplifiant le polynôme en x . ■

Remarque 4.4.3 (Cas d'égalité)

Si $l^+ = l^-$, alors n'importe quel état macroscopique convient pour vérifier la propriété. Cette situation est analogue à celle rencontrée dans le cadre des maillages structurés réguliers, où l'état macroscopique se simplifie dans le flux macroscopique. Dans ce cas, il est donc possible de conserver la définition (4.60), qui correspond alors simplement à la moyenne arithmétique entre les états gauches et droits.

Cette définition *ad hoc* de l'état à l'interface semble raisonnable d'un point de vue physique. En effet, celle-ci correspond à une moyenne pondérée entre les états de part et d'autre de la face. Finalement, l'utilisation des demi-pentes (4.58) avec (4.60) dans la reconstruction de la maxwellienne permet d'obtenir les flux voulus pour le système de diffusion dans la limite :

$$\begin{aligned} \Phi_{K,e}^\rho &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \frac{q_L^n - q_k^n}{l^+ + l^-}, \\ \Phi_{K,e}^\rho &\xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \frac{5(q_e^n)^2}{3\rho_e^n} \left(-\frac{\rho_L^n - \rho_k^n}{(l^+ + l^-)\rho_e^n} + 2 \frac{q_L^n - q_k^n}{(l^+ + l^-)q_e^n} \right), \end{aligned}$$

qui sont bien des approximations d'ordre 2 du flux du système de diffusion écrit en fonction du gradient des grandeurs conservatives (le flux numérique est analogue au cas cartésien (2.54)). Ce schéma limite pour le système de diffusion n'est pas utilisable dans les faits puisque nécessitant une hypothèse trop forte sur la forme du maillage. Cependant, l'idée présentée ici peut être réemployée afin d'obtenir un bon schéma limite.

4.4.2.2 Schéma diamant

Dans cette partie, une méthode est proposée pour obtenir le schéma diamant (présenté dans la section 2.4.2.3) dans la limite de diffusion. Pour le système de diffusion, ce schéma consiste en l'approximation de chacun des gradients normaux des grandeurs macroscopiques (intervenant dans les flux) par la moyenne des gradients reconstruits sur le diamant. Par rapport au schéma précédent, cette méthode propose une approximation consistante des gradients dans le cas où le maillage est déformé.

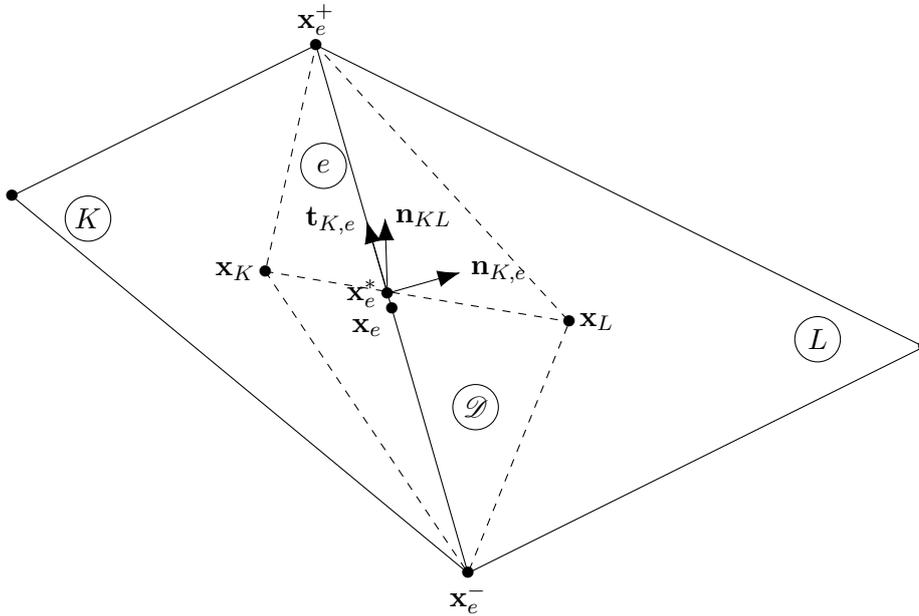


FIGURE 4.2 – Deux mailles d'un maillage non structuré triangulaire

Pour obtenir ce schéma dans la limite, les demi-pentes spatiales de la maxwellienne doivent être définies de telle manière qu'elles vérifient la propriété (4.57), où $\delta_n \mathbf{W}_e^n$ est une approximation du gradient normal obtenue dans ce cas avec le schéma diamant. Une première idée naturelle pour définir les demi-pentes est d'utiliser la moyenne du gradient reconstruit sur les demi-diamants (qui sont des triangles) $\mathcal{D}^- = (\mathbf{x}_K, \mathbf{x}_e^-, \mathbf{x}_e^+)$ et $\mathcal{D}^+ = (\mathbf{x}_L, \mathbf{x}_e^+, \mathbf{x}_e^-)$ (voir figure 4.2). De manière similaire à l'approche originale, les grandeurs macroscopiques sont reconstruites de manière affine sur les faces des demi-diamants, de telle manière que les reconstructions soient exactes sur les sommets. Il est ensuite possible d'exprimer le gradient moyen $\mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^\pm$ sur les demi-diamants à partir de celles-ci.

Proposition 4.4.4 (*Demi-diamant*)

Si $\mathbf{W}(t_n, \cdot)$ est reconstruit de manière affine par maille sur les faces des demi-diamants alors les moyennes du gradient reconstruit du vecteur des grandeurs macroscopiques sur les demi-diamants \mathcal{D}^\pm sont

$$\mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^- = \left(\frac{\mathbf{W}_e^n - \mathbf{W}_K^n}{h^-} - \kappa \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \right) \otimes \mathbf{n}_{K,e} + \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \otimes \mathbf{t}_{K,e}, \quad (4.61a)$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^+ = \left(\frac{\mathbf{W}_L^n - \mathbf{W}_e^n}{h^+} - \kappa \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \right) \otimes \mathbf{n}_{K,e} + \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \otimes \mathbf{t}_{K,e}, \quad (4.61b)$$

où $h^- = (\mathbf{x}_e^* - \mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{n}_{K,e}$ et $h^+ = (\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_e^*) \cdot \mathbf{n}_{K,e}$ sont les distances projetées, $\kappa = \frac{(\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{t}_{K,e}}{(\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K) \cdot \mathbf{n}_{K,e}}$ est la tangente de l'angle formé entre la normale et $\mathbf{x}_L - \mathbf{x}_K$ et $\mathbf{W}_e^{n,\pm}$ sont les valeurs reconstruites de $\mathbf{W}(t_n, \cdot)$ aux sommets \mathbf{x}_e^\pm .

Démonstration : De la même manière que dans la preuve de la proposition 2.4.1, il est possible de montrer (par exemple sur le diamant \mathcal{D}^-) que :

$$\mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^- = \frac{|e|}{2|\mathcal{D}^-|} (\mathbf{W}_e^n - \mathbf{W}_K^n) \otimes \mathbf{n}_{K,e} + \frac{h^-}{2|\mathcal{D}^-|} (\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}) \otimes \mathbf{n}_{KL}.$$

Ensuite, le résultat final est obtenu en remarquant que le gradient approché est l'unique solution du système :

$$\begin{cases} \mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^-(\mathbf{x}_e^* - \mathbf{x}_K) &= \mathbf{W}_e^n - \mathbf{W}_K^n, \\ \mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^-(\mathbf{x}_e^+ - \mathbf{x}_e^-) &= \mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}. \end{cases} \quad \blacksquare$$

Enfin, les pentes de la maxwellienne sont définies de la manière suivante :

$$\nabla_{\mathbf{x}}^\pm \mathbf{W}_e^n = \mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^\pm. \quad (4.62)$$

Dans ce cas, la partie tangentielle de la reconstruction est prise en compte dans la maxwellienne (bien que ne contribuant pas aux flux macroscopiques). Avec ces définitions des demi-pentes, la propriété de consistence (4.57) n'est pas assurée dans le cas général. La même idée que précédemment peut être utilisée en définissant correctement l'état macroscopique à l'interface. Un calcul similaire permet de montrer que la définition suivante :

$$\mathbf{W}_e^n = -\frac{h^+ - h^-}{2(h^+ + h^-)} (\mathbf{W}_L^n - \mathbf{W}_K^n) + \frac{1}{2} (\mathbf{W}_K^n + \mathbf{W}_L^n), \quad (4.63)$$

permet d'obtenir les flux du schéma diamant dans la limite de diffusion. Ceux-ci sont

$$\Phi_{K,e}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \left(\frac{q_L^n - q_K^n}{h^+ + h^-} - \kappa \frac{q_e^{n,+} - q_e^{n,-}}{|e|} \right), \quad (4.64a)$$

$$\Phi_{K,e}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \frac{5(q_e^n)^2}{3\rho_e^n} \left[-\frac{1}{\rho_e^n} \left(\frac{\rho_L^n - \rho_K^n}{h^+ + h^-} - \kappa \frac{\rho_e^{n,+} - \rho_e^{n,-}}{|e|} \right) + \frac{2}{q_e^n} \left(\frac{q_L^n - q_K^n}{h^+ + h^-} - \kappa \frac{q_e^{n,+} - q_e^{n,-}}{|e|} \right) \right]. \quad (4.64b)$$

Ces flux sont ceux du schéma diamant pour le système de diffusion. Chacun des gradients normaux sont approchés par la moyenne des gradients reconstruit sur le diamant. Les grandeurs macroscopiques aux noeuds du maillage $\mathbf{W}_e^{n,\pm}$ sont calculées avec la méthode basée sur les moindres carrés présentée dans la proposition 2.4.2.

4.4.2.3 Schéma diamant modifié

Les deux approches précédentes nécessitent la modification de la définition de l'état macroscopique à l'interface en fonction de la position de la face par rapport au centre des deux

mailles. Dans cette section, une méthode alternative est proposée permettant d'utiliser la définition cinétique habituelle : $\mathbf{W}_e^n = \langle \langle f_K^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + f_L^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0} \rangle \rangle$.

L'idée principale de cette section part du constat que la définition de l'état à l'interface n'importe pas lorsque les deux centres sont à équidistance de la face. De ce fait, il semble pertinent d'introduire un nouveau point \mathbf{x}_K^* ou \mathbf{x}_L^* qui est le symétrique du centre le plus proche de la face par rapport à \mathbf{x}_e^* (voir figure 4.3). Ce nouveau point est à une distance $l_0 = \min(l^-, l^+)$ de \mathbf{x}_e^* . Celui-ci permet de définir un nouveau diamant \mathcal{D}^* ayant la bonne propriété géométrique.

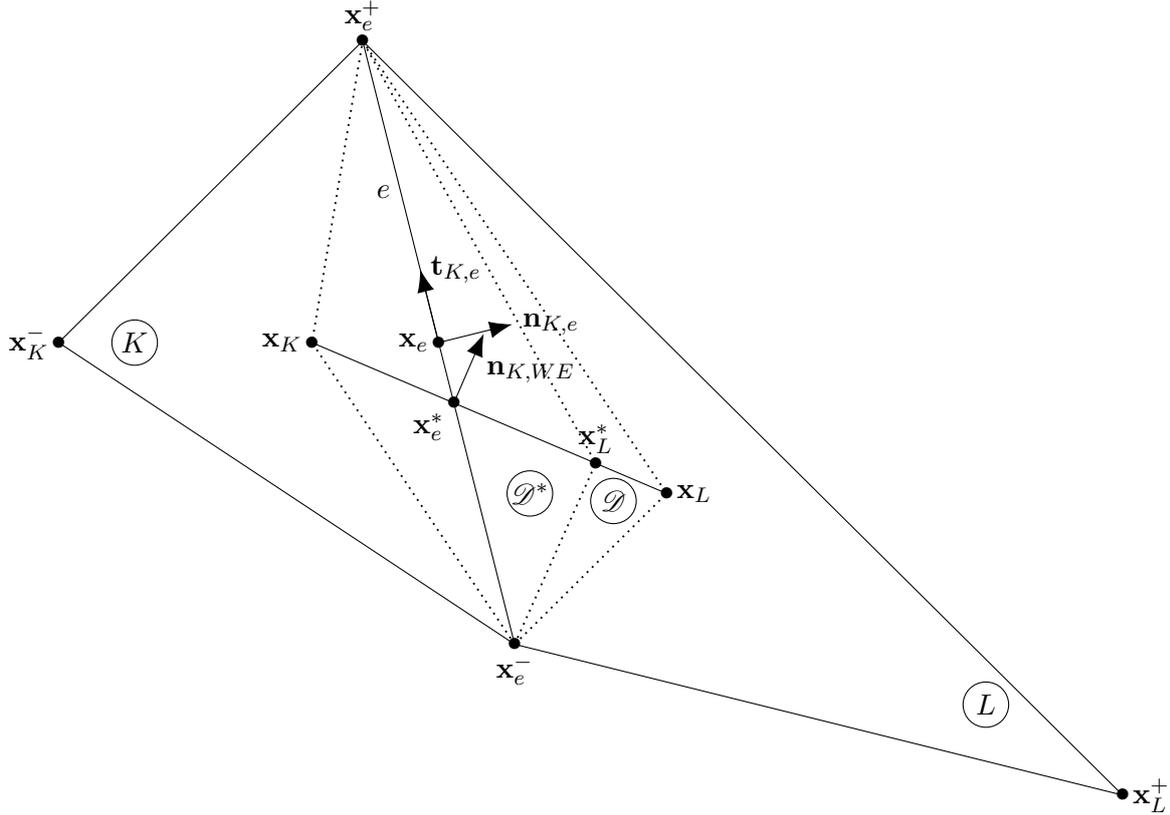


FIGURE 4.3 – Représentation du diamant et du diamant modifié \mathcal{D}^* dans un maillage non structuré. Dans ce cas, le point \mathbf{x}_L^* est tel que $\|\mathbf{x}_L^* - \mathbf{x}_e^*\| = \|\mathbf{x}_e^* - \mathbf{x}_K\|$ et $\mathbf{x}_K^* = \mathbf{x}_K$.

Soient \mathbf{x}_K^* et \mathbf{x}_L^* , les nouveaux sommets Est et Ouest du diamant après cette modification et soient $\mathbf{W}_K^{n,*}$ et $\mathbf{W}_L^{n,*}$ leur valeur correspondante. Les gradients reconstruits sur les demi-diamants sont

$$\mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^- = \left(\frac{\mathbf{W}_e^n - \mathbf{W}_K^{n,*}}{h_0} - \kappa \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \right) \otimes \mathbf{n}_{K,e} + \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \otimes \mathbf{t}_{K,e}, \quad (4.65a)$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{W}_e}^+ = \left(\frac{\mathbf{W}_L^{n,*} - \mathbf{W}_e^n}{h_0} - \kappa \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \right) \otimes \mathbf{n}_{K,e} + \frac{\mathbf{W}_e^{n,+} - \mathbf{W}_e^{n,-}}{|e|} \otimes \mathbf{t}_{K,e}, \quad (4.65b)$$

où $h_0 = \min(h^+, h^-)$ est le minimum des distances projetées entre les sommets Est et Ouest du diamant \mathcal{D} et la face. Les demi-pentes de la maxwellienne sont toujours définies avec (4.62). Dans ce cas, la propriété (4.57) est obtenue pour n'importe quel état macroscopique à

l'interface. Les nouveaux flux macroscopiques limite sont

$$\Phi_{K,e}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \left(\frac{q_L^{n,*} - q_k^{n,*}}{2h_0} - \kappa \frac{q_e^{n,+} - q_e^{n,-}}{|e|} \right), \quad (4.66a)$$

$$\Phi_{K,e}^\rho \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} -\frac{2}{3\sigma_e^n} \frac{5(q_e^n)^2}{3\rho_e^n} \left[-\frac{1}{\rho_e^n} \left(\frac{\rho_L^{n,*} - \rho_k^{n,*}}{2h_0} - \kappa \frac{\rho_e^{n,+} - \rho_e^{n,-}}{|e|} \right) + \frac{2}{q_e^n} \left(\frac{q_L^{n,*} - q_k^{n,*}}{2h_0} - \kappa \frac{q_e^{n,+} - q_e^{n,-}}{|e|} \right) \right]. \quad (4.66b)$$

Les flux limites ne correspondent alors plus exactement à ceux du schéma diamant (4.64), puisque faisant intervenir la valeur au nouveau point \mathbf{W}_{KL}^* . Pour rendre ce schéma utilisable en pratique, il est nécessaire d'exprimer la valeur en ce point en fonction des inconnues du problème. Il est proposé ici d'utiliser la même méthode que pour les reconstructions aux sommets du maillage, basée sur les moindres carrés.

Proposition 4.4.5 (*Moindres carrés*)

Soient $K \in \mathcal{T}$ une maille, $u_K \in \mathbb{R}$ la moyenne d'une des grandeurs macroscopiques dans celle-ci, $(u_i)_{i \in \mathcal{N}_K}$ les valeurs aux sommets de cette maille et $\tilde{u}(\mathbf{x}) = u_K + \mathbf{a} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_K)$ une reconstruction affine de u au centre de cette maille. L'erreur quadratique $E = \frac{1}{2} \sum_{i \in \mathcal{N}_K} |\tilde{u}(\mathbf{x}_K) - u_i|^2$ est minimale si et seulement si $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^2$ vérifie le système des équations normales :

$$\left(\sum (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_K) \otimes (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_K) \right) \mathbf{a} = \sum (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_K) (u_i - u_K). \quad (4.67)$$

Démonstration : La preuve est similaire à celle de la proposition 2.4.2. Sur chaque sommet de la maille, une équation est écrite : $\tilde{u}(\mathbf{x}_i) = u_K + \mathbf{a} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$. Le système obtenu est surdéterminé et le système aux équations normales est établi en multipliant par la matrice transposée. ■

Étant donné une de ces reconstructions, la valeur de l'une des variables macroscopiques u en \mathbf{x}_K^* est alors

$$u_K^* = u_K + \mathbf{a} \cdot (\mathbf{x}_{k^*} - \mathbf{x}_K),$$

où \mathbf{a} est définie en résolvant le système (4.67). En pratique, les mailles considérées sont des triangles. Le système est donc de petite taille et peut être résolu à partir d'une factorisation de Cholesky (puisque la matrice du système est symétrique et définie positive). Par ailleurs, si les mailles sont régulières et que les deux points coïncident alors la reconstruction n'a pas d'effet et $u_K = u_K^*$.

4.4.3 UGKS-M1

Maintenant qu'UGKS a été établi sur maillage non structuré, la mise en oeuvre d'UGKS-M1 est assez directe dans ce contexte. Tout d'abord, la nouvelle formulation volumes finis est

$$\frac{\mathbf{U}_K^{n+1} - \mathbf{U}_K^n}{\Delta t} + \sum_{e \in \mathcal{F}_K} \frac{|e|}{|K|} \boldsymbol{\chi}_{K,e} = \nu (\mathbf{W}_K^{n+1}) \mathbf{S}(\mathbf{U}_K^{n+1}), \quad (4.68)$$

où \mathbf{U}_K^n est la moyenne des variables M1 dans la maille K au temps t_n , $\boldsymbol{\chi}_{K,e} = \langle \mathbf{m} \phi_{K,e} \rangle$ est le vecteur des flux mésoscopiques dans la direction $\mathbf{n}_{K,e}$. Celui-ci est toujours défini comme étant l'intégrale du flux microscopique (4.54), calculé avec $\hat{f}_k^n = \hat{f}(\mathbf{U}_k^n)$, contre le vecteur \mathbf{m} de la hiérarchie.

Proposition 4.4.6 (UGKS-M1)

Les flux mésoscopiques d'UGKS-M1 sont

$$\begin{aligned} \chi_{i+1/2,j}^0(v) &= A_e^n v \left\langle \Omega_n \hat{f}_K^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + \Omega_n \hat{f}_L^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0} \right\rangle \\ &\quad + \frac{D_e^n}{6} v^2 \mathbf{K}_0(\mathbf{W}_e^n) (\delta_n^- \mathbf{W}_e^n + \delta_n^+ \mathbf{W}_e^n) \cdot \Psi, \end{aligned} \quad (4.69a)$$

$$\begin{aligned} \chi_{i+1/2,j}^1(v) &= A_e^n v \left\langle \Omega_n \Omega \hat{f}_K^n \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} + \Omega_n \Omega \hat{f}_L^n \mathbb{1}_{\Omega_n < 0} \right\rangle \\ &\quad + \frac{C_e^n}{3} v M_0[\mathbf{W}_e^n] \mathbf{n}_{K,e} \\ &\quad + \frac{D_e^n}{8} v^2 \mathbf{K}_0(\mathbf{W}_e^n) (\delta_n^- \mathbf{W}_e^n - \delta_n^+ \mathbf{W}_e^n) \cdot \Psi \mathbf{n}_{K,e}. \end{aligned} \quad (4.69b)$$

De plus, les flux macroscopiques sont identiques à ceux d'UGKS (4.55), dans lesquels $f_K^n = \hat{f}_K^n$ et $f_L^n = \hat{f}_L^n$.

Les pentes $\delta_n^\pm \mathbf{W}_e^n$ sont alors choisies en fonction du schéma limite souhaité. La seule difficulté supplémentaire par rapport aux maillages cartésiens, est le calcul des demi-moments de la fonction de distribution M1 contre les composantes de $\Omega_n \Omega$. En effet, il est désormais nécessaire de pouvoir calculer les quantités dans des directions arbitraires et une simple permutation entre les composantes ne permet plus de trouver le résultat. Soient \mathbf{R} la matrice de rotation telle que $\mathbf{R} \mathbf{n}_{K,e} = \mathbf{e}_z$ et $\Omega' = \mathbf{R} \Omega$ le changement de variable associé. Les demi-moments à calculer (nécessaire pour l'ordre 1) s'écrivent alors sous la forme (avec $i \in \{x, y, z\}$) :

$$\begin{aligned} \left\langle \Omega_n \Omega_i \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_n} \right\rangle &= \int_{\mathcal{S}^2} \Omega_n \Omega_i e^{\alpha + \beta \cdot \Omega} \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} d\Omega \\ &= \int_{\mathcal{S}^2} \Omega'_z (\Omega' \cdot \mathbf{R} \mathbf{e}_i) e^{\alpha + \mathbf{R} \beta \cdot \Omega'} \mathbb{1}_{\Omega'_z > 0} d\Omega'. \end{aligned}$$

Après le changement de variable, les bornes d'intégration s'expriment facilement dans le système de coordonnées sphériques. La matrice de rotation \mathbf{R} doit cependant être explicitée pour calculer les composantes de β et de \mathbf{e}_i dans la nouvelle base. Celle-ci peut s'écrire comme la composition d'une rotation \mathbf{R}_z autour de l'axe \mathbf{e}_z (pour annuler la composante suivant \mathbf{e}_y de \mathbf{n}) et d'une rotation \mathbf{R}_y autour de l'axe \mathbf{e}_y (pour annuler la composante suivante \mathbf{e}_x) :

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_y \mathbf{R}_z = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.70)$$

où (θ, ϕ) sont simplement les composantes de $\mathbf{n}_{K,e}$ dans le système des coordonnées sphériques. Les demi-moments sont alors

$$\begin{aligned} \left\langle \Omega_n \Omega_i \hat{f} \mathbb{1}_{\Omega_n > 0} \right\rangle &= \int_{\mathcal{S}^2} \Omega_z (\mathbf{v}_i \cdot \Omega) e^{\alpha + \beta' \cdot \Omega} \mathbb{1}_{\Omega_z > 0} d\Omega \\ &= (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_x) \int_{\mathcal{S}^2} \Omega_z \Omega_x e^{\alpha + \beta' \cdot \Omega} \mathbb{1}_{\Omega_z > 0} d\Omega \\ &\quad + (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_y) \int_{\mathcal{S}^2} \Omega_z \Omega_y e^{\alpha + \beta' \cdot \Omega} \mathbb{1}_{\Omega_z > 0} d\Omega \\ &\quad + (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{e}_z) \int_{\mathcal{S}^2} \Omega_z \Omega_z e^{\alpha + \beta' \cdot \Omega} \mathbb{1}_{\Omega_z > 0} d\Omega, \end{aligned} \quad (4.71)$$

où $\mathbf{v}_i = \mathbf{R} \mathbf{e}_i$ et $\beta' = \mathbf{R} \beta$. Chacune de ces trois intégrales peuvent être calculées avec la méthode proposée dans la section 4.3.2.

4.5 Résultats

Dans cette section, des résultats numériques sont présentés pour UGKS-M1, dans un premier temps sur maillage structuré cartésien puis sur maillage non structuré triangulaire. Les résultats sont comparés avec la solution cinétique donnée par UGKS et par un schéma HLL standard (sans correction pour la préservation de l'asymptotique). Les différents paramètres des cas de test sont regroupés dans le tableau 4.5. Ceux-ci sont choisis pour à la fois vérifier les propriétés numériques du schéma (ordre de convergence, préservation de l'asymptotique) et pour valider les solutions d'un point de vue physique.

	η	ϵ	Condition initiale	Conditions aux bords
Convergence	1	1	$\rho(\mathbf{x}) = 1$ $T(\mathbf{x}) = 1 + 0.25 \sin(2\pi x)$ $\mathbf{f}_1(\mathbf{x}, v) = 0.5 f_0 \mathbf{e}_x$	Périodique
Cinétique	1	1	$\rho(\mathbf{x}) = 1$ $T(\mathbf{x}) = H(x, 0.5, 1, 2, 0.001)$ $\mathbf{f}_1(\mathbf{x}, v) = 0$	Neumann
Intermédiaire	10^{-2}	10^{-2}	$\rho(\mathbf{x}) = 1$ $T(\mathbf{x}) = H(x, 0.5, 1, 2, 0.001)$ $\mathbf{f}_1(\mathbf{x}, v) = 0$	Neumann
Diffusion	10^{-8}	10^{-8}	$\rho(\mathbf{x}) = 1$ $T(\mathbf{x}) = H(x, 0.5, 1, 2, 0.001)$ $\mathbf{f}_1(\mathbf{x}, v) = 0$	Neumann
Dépot d'énergie	1	1	$\rho(\mathbf{x}) = H(\ \mathbf{x} - \mathbf{1}\ ^2, \frac{\sqrt{2}}{2}, 5, 100, 0.01)$ $T(\mathbf{x}) = 0.5$ $\mathbf{f}_1(\mathbf{x}, v) = 0$	Neumann : N,E Dirichlet : S,W
Non-local 1D	1	1	$\rho(\mathbf{x}) = 1$ $T(\mathbf{x}) = T^{NL}(x)$ $\mathbf{f}_1(\mathbf{x}, v) = 0$	Neumann
Non-local 2D	1	1	$\rho(\mathbf{x}) = 1$ $T(\mathbf{x}) = T^{NL}(x)e^{-y^4}$ $\mathbf{f}_1(\mathbf{x}, v) = 0$	Neumann

TABLE 4.1 – Paramètres de simulation.

Tout comme pour le transport linéaire, les codes de calculs sont réalisés en fortran 90 et l'interface de programmation OpenMP est utilisée pour le parallélisme. Les boucles en vitesse sont parallélisées dans UGKS et dans UGKS-M1. En pratique, la quadrature de Lebedev [43] avec 110 directions (d'ordre 17) est utilisée pour calculer les intégrales sur la sphère dans UGKS (pour les solutions de référence cinétiques). Dans UGKS-M1, les demi-moments de la fonction de distribution M1 sur la sphère sont calculés avec une formule de quadrature de Gauss-Legendre à 10 points. Enfin pour les intégrales en vitesse, la formule de quadrature des trapèzes est employée avec 25 points et une vitesse maximale de 10. La densité à l'interface est calculée avec une simple moyenne arithmétique. Enfin, les pentes de la maxwellienne sont choisies de telle manière que le schéma de diffusion limite correspond au système écrit sous forme développée.

Le domaine spatial est $\mathcal{D} = [0, 1] \times [0, 1]$. Pour les tests mono-dimensionnels, 200 points sont employés dans la direction horizontale et seulement 4 dans la direction verticale. Pour les tests pleinement bidimensionnels, 50 points sont utilisés dans les deux directions. Le pas

de temps est donné par la condition CFL (4.23) dans laquelle le nombre CFL est 0.3.

Dans tous les cas de test présentés ici, l'état microscopique du domaine à l'instant initial est soit maxwellien et défini par un état macroscopique $\mathbf{W}(0, \mathbf{x})$ donné ou soit est défini à partir d'une distribution M1 dont la répartition en vitesse est une maxwellienne dans chacune des directions. Dans tous les cas, les variables M1 associées sont

$$\mathbf{U}(0, \mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 4\pi M[\mathbf{W}(0, \mathbf{x})] \\ 4\pi M[\mathbf{W}(0, \mathbf{x})]u\mathbf{d} \end{pmatrix}, \quad (4.72)$$

où $u \in [0, 1]$ est le facteur d'anisotropie et $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^3$ est la direction de propagation privilégiée. Si la donnée initiale est à l'équilibre alors $u = 0$. Par ailleurs dans les cas de tests, les sauts sont régularisés et modélisés par une fonction arctan modifiée :

$$\forall x \in \mathbb{R}, H(x, x_0, T_0, T_1, e) = T_0 + \frac{T_1 - T_0}{2} \left(\frac{2}{\pi} \arctan \left(\frac{x - x_0}{e} \right) + 1 \right), \quad (4.73)$$

où x_0 est la position du saut, $e \in \mathbb{R}_+$ est sa raideur, et $(T_0, T_1) \in \mathbb{R}^2$ sont les valeurs avant et après le saut. Une version modifiée de cette fonction est aussi introduite pour mettre en avant certains phénomènes non-locaux. Celle-ci correspond à un saut suivi d'une légère décroissance qui engendre une réduction de l'amplitude de l'ordre de 5% :

$$\forall x \in [0, 1], T^{NL}(x) = H(x, 0.5, 1, 4, 0.01) \left(\mathbb{1}_{x < 0.5} + \left(\frac{0.05}{(x + 0.5)^6} + 0.95 \right) \mathbb{1}_{x > 0.5} \right). \quad (4.74)$$

4.5.1 Maillage Cartésien

Advection de particules avec une température sinusoïdale dans un domaine infini

Le tout premier cas de test a été conçu pour étudier l'ordre de convergence du schéma en fonction des différents pas de discrétisation intervenant dans UGKS-M1. L'état initial est constitué de particules avec une densité constante dans le domaine et une température évoluant sinusoïdalement dans la direction horizontale. Pour simuler le transport de ces particules dans cette même direction, l'état microscopique n'est pas maxwellien et le facteur d'anisotropie est non nul. Des conditions périodiques sont employées pour modéliser un domaine infini.

Sur la figure 4.4, la norme L^2 de l'erreur est représentée en fonction du pas d'espace, du pas de vitesse et du pas de la quadrature sur la demi-sphère. Cette erreur est évaluée à partir d'une solution de référence calculée sur un maillage suffisamment fin pour supposer que l'erreur par rapport à la solution exacte est négligeable dans l'analyse. Les ordres de convergences sont obtenus grâce à des régressions linéaires. Pour UGKS-M1 d'ordre 2, le limiteur de Van Leer est utilisé.

Tout d'abord, la version d'ordre 1 d'UGKS-M1 a bien l'ordre de convergence attendu en espace. La version d'ordre 2 a un ordre dégradé comme dans le cas du transport linéaire. Cet écart peut s'expliquer par le traitement des reconstructions pour les basses vitesses qui peut se révéler raide numériquement (du fait des moments d'ordre plus élevé de la distribution M1). L'ordre de convergence en vitesse est de 4 et celui de la quadrature sur la demi-sphère de 1.9. En valeur absolu, les erreurs associées à ces deux quadratures sont faibles par rapport à celle en espace. Ceci démontre qu'il n'est pas nécessaire d'utiliser beaucoup de points en vitesse et pour la quadrature, pour que les erreurs commises par celles-ci soient du même ordre de grandeur que celle en espace.

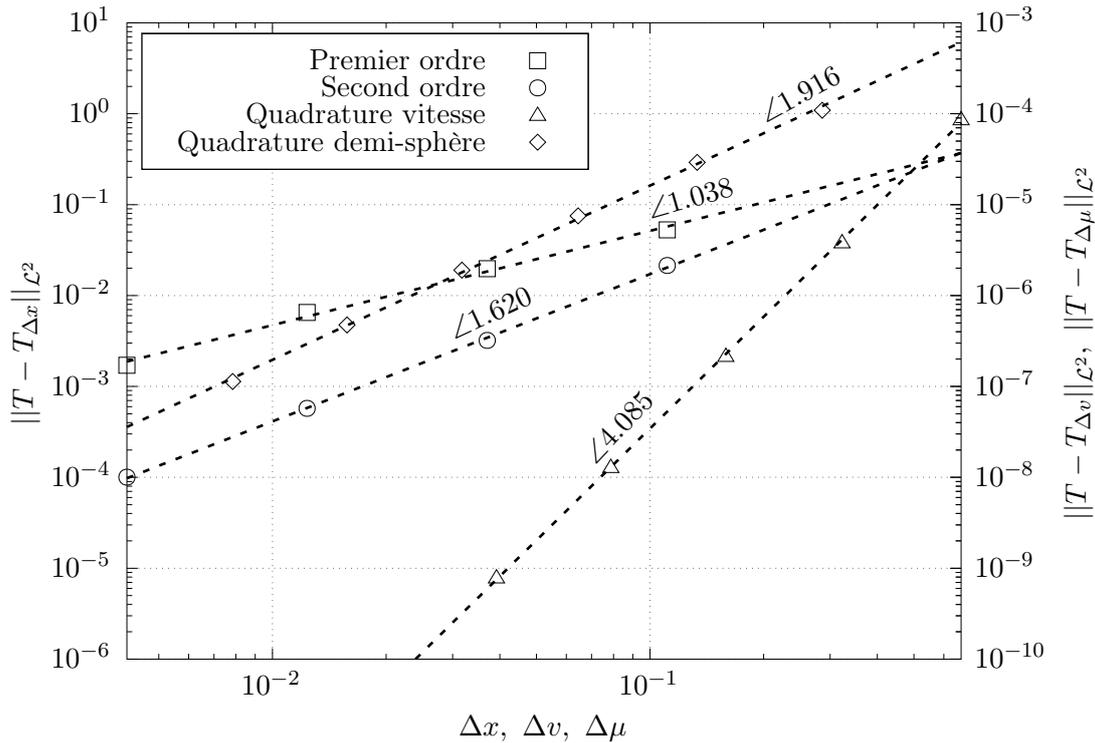


FIGURE 4.4 – Test n°1 : Convergence. Erreur sur la température d’UGKS M1 en fonction du pas du maillage, du pas de vitesse et du pas de la quadrature sur la demi-sphère

Régime cinétique avec des conditions de Neumann homogènes

L’objectif de ce cas de test mono-dimensionnel est d’évaluer UGKS-M1 en régime cinétique lors de la relaxation d’un saut de température horizontal. Des conditions aux limites de Neumann homogènes sont employées. Pour calculer les flux aux bords, des cellules fantômes sont donc introduites à droite à gauche avec le même état que celui de la dernière maille en contact avec le bord. Sur la figure 4.5, la densité et la température sont représentées dans une coupe horizontale du domaine et à différents instants pour l’équation cinétique (avec UGKS) et le modèle M1 (avec UGKS-M1 et HLL). Au cours du temps, le saut de température est relaxé et une augmentation (respectivement diminution) de la densité est observée en aval (respectivement amont) du saut. La solution cinétique est significativement différente de la solution du modèle M1. Cette observation est une conséquence du fait que le modèle aux moments est généralement peu précis lorsque les fonctions de distribution sont fortement hors équilibre. Les projections des fonctions de distribution sur l’espace M1 sont éloignées des fonctions de distribution initiales.

D’un point de vue numérique, les deux solutions du modèle M1 sont similaires. Le schéma HLL est significativement plus diffusif en particulier au niveaux des extrema de la densité. Cela s’explique de la même manière que pour le transport linéaire (voir paragraphe 3.5.1).

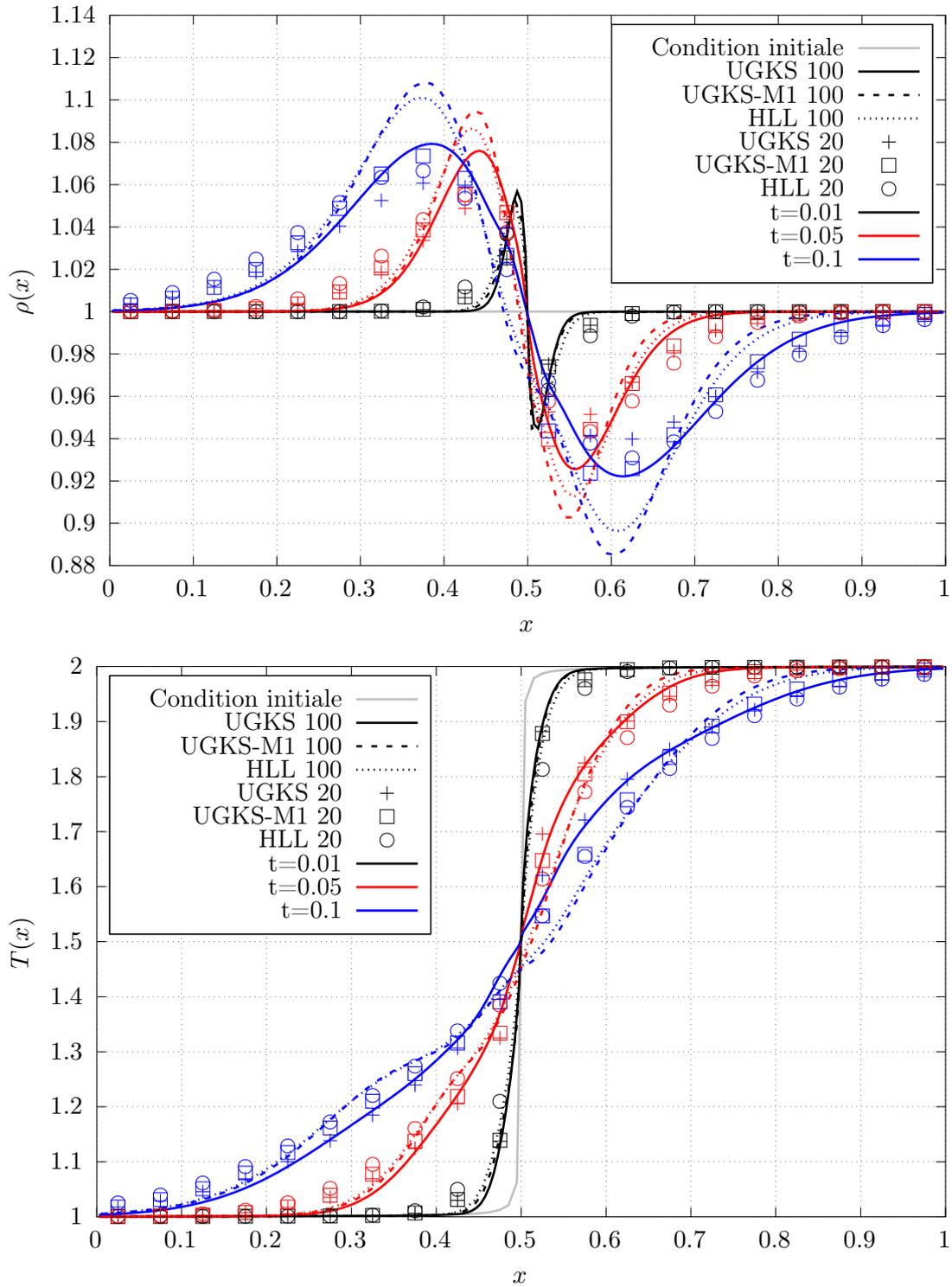


FIGURE 4.5 – Test n°2 : Régime cinétique. Densité et température dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

Régime intermédiaire avec des conditions de Neumann homogènes

Le même cas de test que précédemment est repris dans un régime intermédiaire avec un nombre de Knudsen plus faible ($\epsilon = 10^{-2}$). Dans ce cas, les fonctions de distributions sont plus proches de l'équilibre. De ce fait le modèle M1 est censé être plus précis que dans le régime cinétique. Sur la figure 4.6, il apparaît effectivement que les deux solutions du modèle M1 sont bien plus proches de la solution cinétique. L'écart entre les solutions semble se réduire au cours du temps, à mesure que les fonctions de distribution deviennent isotropes. La solution d'HLL a toujours plus de diffusion numérique qu'UGKS-M1.

Régime de diffusion avec des conditions de Neumann homogènes

Enfin, le cas de test est repris une dernière fois dans le régime de diffusion. La solution d'UGKS-M1 est cette fois comparée avec celle d'UGKS et celle obtenue avec un schéma standard pour le système de diffusion limite. Ce schéma est celui obtenu sans le développement des gradients (4.33). Dans UGKS, le schéma limite est celui où les gradients sont développés. Sur la figure 4.7, la densité et la température sont identiques à tous les instants et pour tous les schémas. Cela démontre qu'UGKS-M1 préserve bien l'asymptotique. Par ailleurs, l'influence du type de schéma limite semble négligeable dans ce cas (présentant des données régulières).

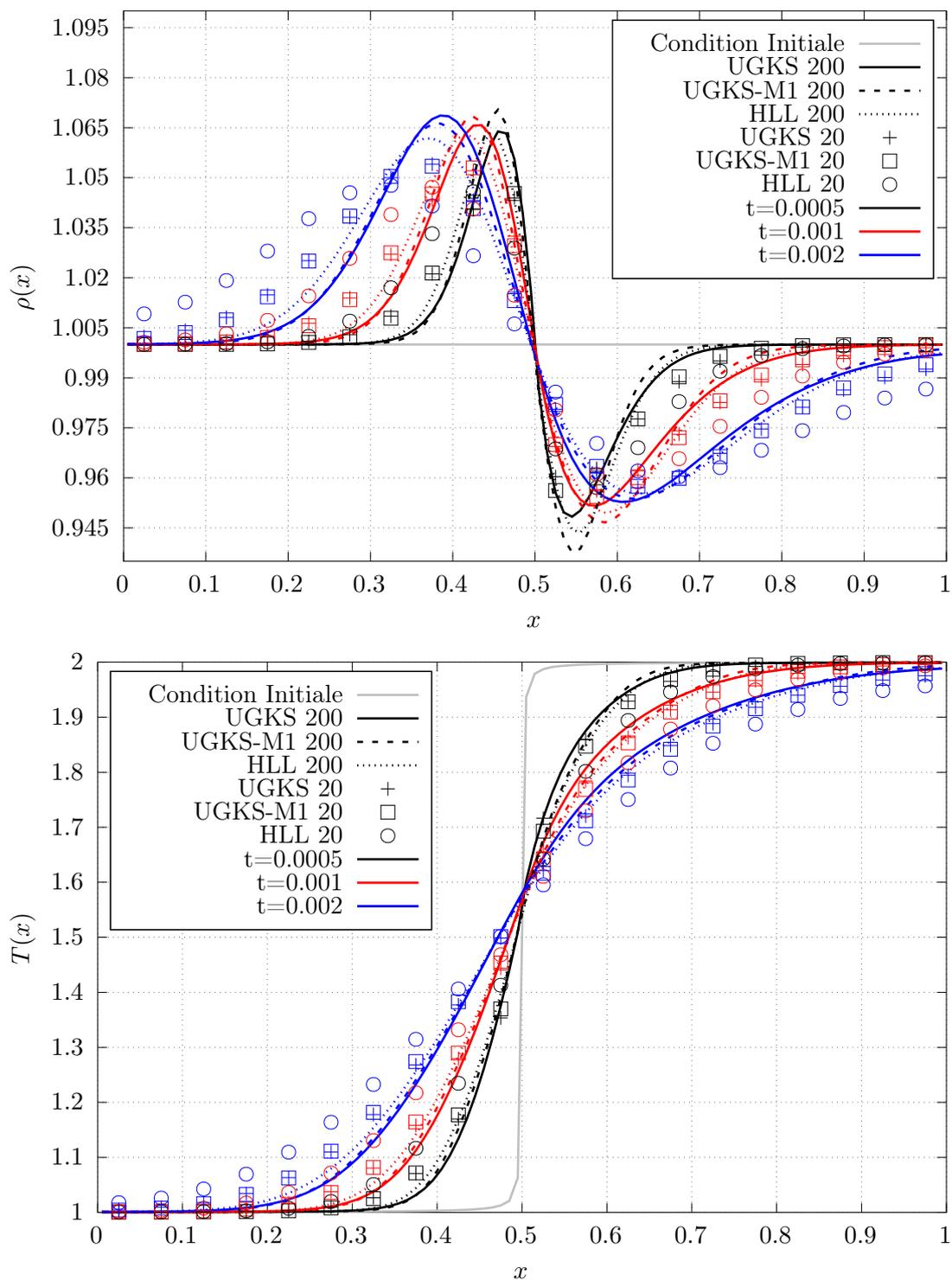


FIGURE 4.6 – Test n°3 : Régime intermédiaire. Densité et température dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

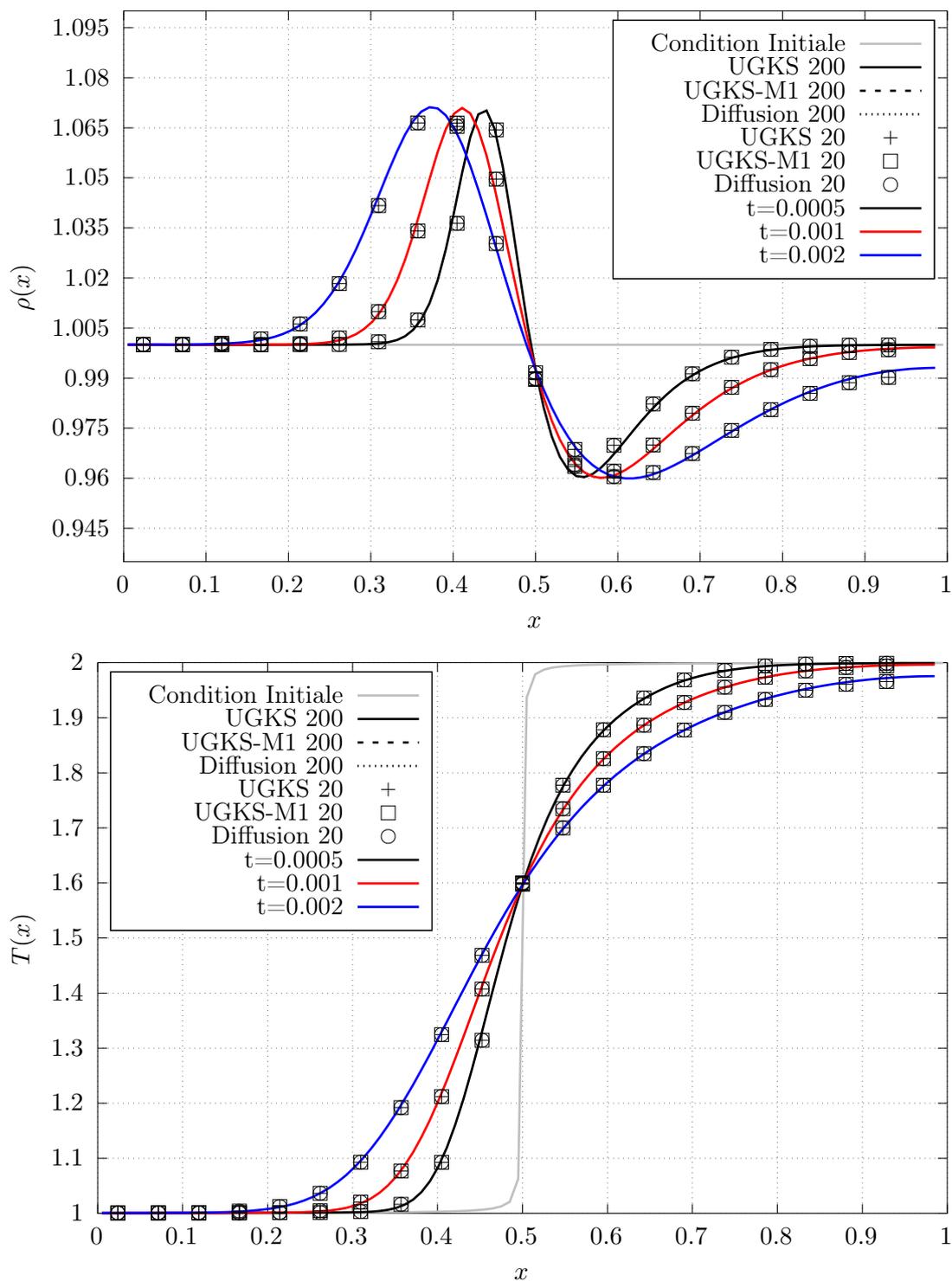


FIGURE 4.7 – Test n°4 : Régime de diffusion. Densité et température dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

Dépôt d'énergie dans une zone de forte densité

Dans ce cas de test, UGKS-M1 est évalué dans une situation bi-dimensionnelle présentant des changements de régime. A l'état initial, le domaine est composé d'une zone de faible et de haute densité (de forme circulaire et sur le coin supérieur gauche), à une température globale faible et uniforme. Aux bords ouest et sud, une condition de Dirichlet est imposée :

$$\forall z \in [0, 1], \mathbf{U}_O^n(z) = \mathbf{U}_S^n(z) = \begin{pmatrix} 5 \\ 3.75 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 4\pi M[\mathbf{W}_b(z)] \\ 4\pi M[\mathbf{W}_b(z)]u\mathbf{d} \end{pmatrix}, \quad (4.75)$$

où le facteur d'anisotropie est $u = 0.95$ et $\mathbf{d} = \frac{\sqrt{2}}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)$ est la direction de propagation. Les vecteurs des variables macroscopiques suivent une distribution normale le long de l'interface dont l'écart type est $\sigma_b = 0.05$:

$$\forall z \in [0, 1], \mathbf{W}_b(z) = \begin{pmatrix} \rho_b(z) \\ q_b(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ 1500 \end{pmatrix} e^{-\frac{z^2}{2\sigma_b}}. \quad (4.76)$$

Cette condition permet de modéliser un jet entrant de particules de diamètre $\frac{\sqrt{2}}{2}$ à forte énergie (la température maximale est de $T_b = 100$). Le fort facteur d'anisotropie indique que les particules sont très directionnelles. Sur les figures 4.8 et 4.9, il peut être constaté que le jet de particule est transporté dans la zone de faible densité avec peu d'interactions. En effet, la densité n'est pas affectée et l'énergie augmente peu puisque les particules interagissent peu. En entrant dans la zone de forte densité, le mécanisme de collision prédomine devant celui du transport ce qui induit un dépôt d'énergie. Le faisceau provoque aussi une réduction de la densité par ablation au niveau du front. Ce cas de test met en évidence un changement radical de régime au sein même du domaine.

D'un point de vue numérique, les solutions d'UGKS-M1 sont similaires à celles données par HLL. De même que pour les cas mono-dimensionnels, la diffusion numérique est marquée pour ce dernier. Ce phénomène est particulièrement visible sur la forme et le nombre d'isolignes en énergie. De plus, la version d'ordre 2 d'UGKS-M1 arrive à obtenir une solution de qualité similaire à HLL avec 4 fois moins de points dans chaque direction. Par ailleurs, HLL nécessite d'utiliser un nombre CFL nettement plus petit pour rester stable dans ce cas.

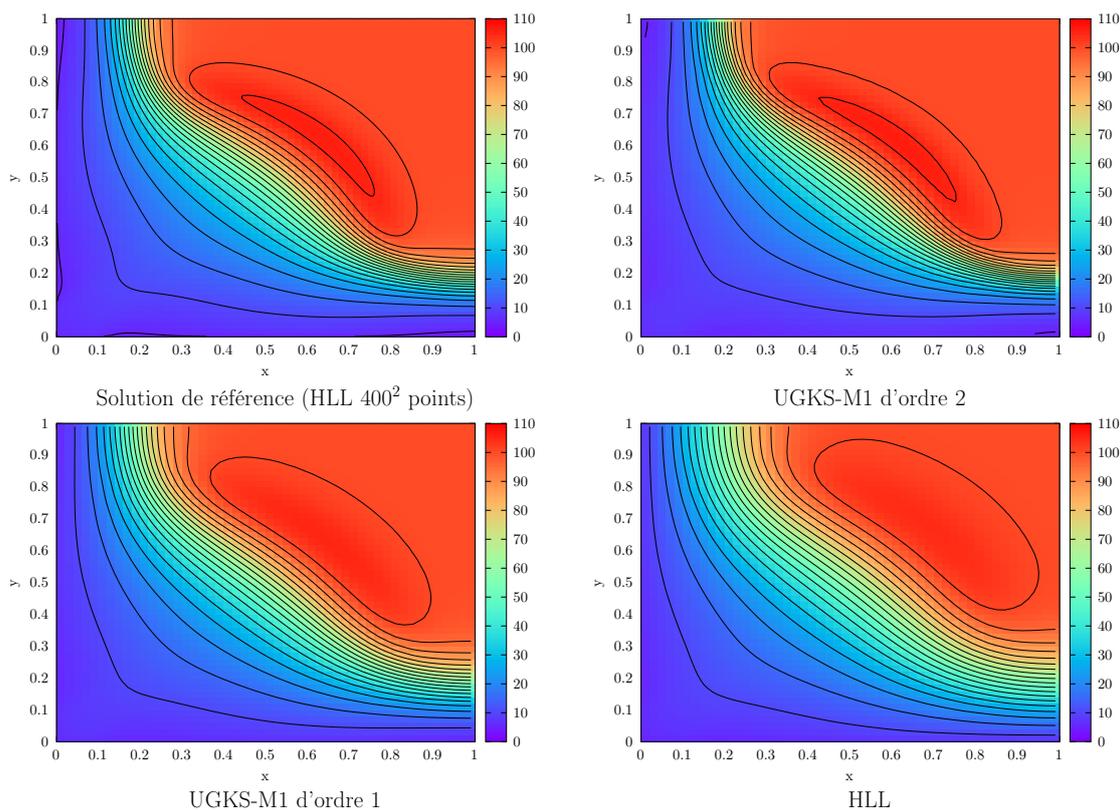


FIGURE 4.8 – Test n°5 : Dépôt d'énergie. Densité dans le domaine pour le modèle M1

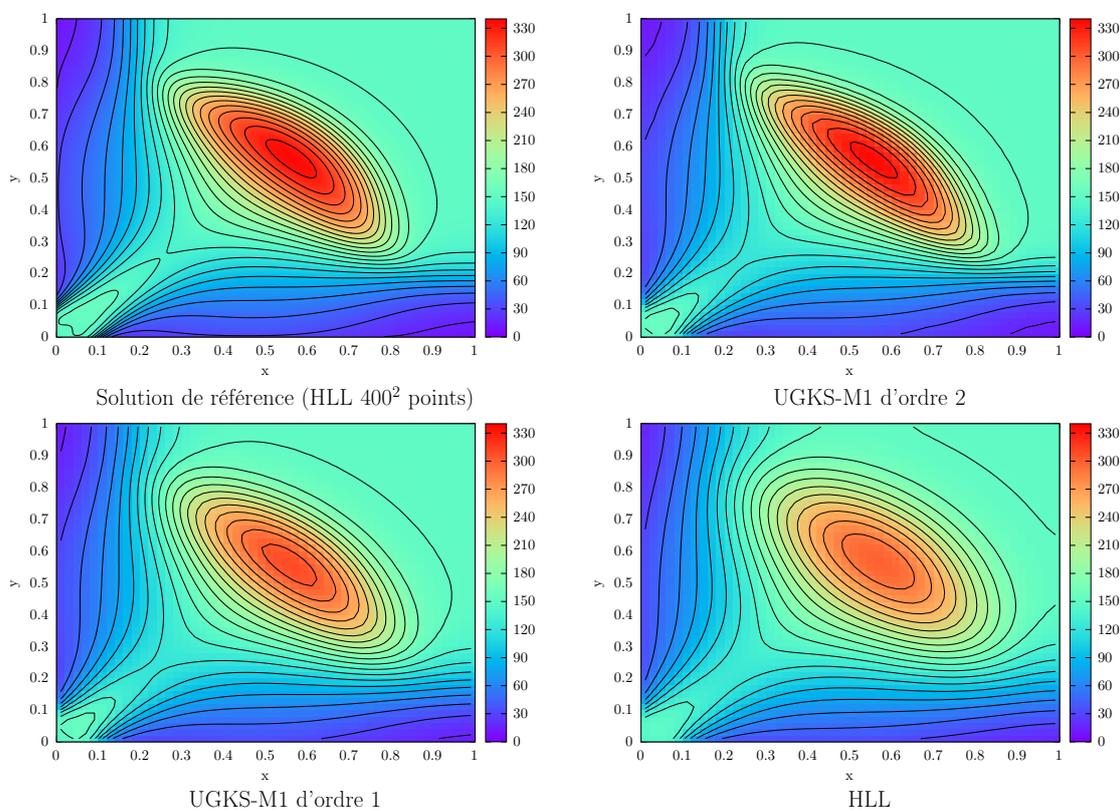


FIGURE 4.9 – Test n°5 : Dépôt d'énergie. Energie dans le domaine pour le modèle M1

Transport thermique non-local

L'objectif de ces derniers cas de test est de mettre en évidence les capacités d'UGKS-M1 à capturer les phénomènes de transport thermique non-local. Dans le contexte de la FCI (voir section 1.1), le flux de chaleur des électrons doit être calculé pour un état hydrodynamique donné $\hat{\mathbf{W}} = (\hat{\rho} \quad \hat{q})^T$. L'équation cinétique du transport électronique (et le modèle M1 associé) est donc modifiée pour traduire le fait que la relaxation s'opère vers un état hydrodynamique fixe. D'un point de vue numérique, le système est initialisé avec cet état et les flux macroscopiques sont artificiellement imposés à 0 pour traduire la non évolution de l'état macroscopique du système. Cette modification provoque l'apparition d'un état stationnaire qui permet de définir le flux de chaleur associé à cet état macroscopique. La quantité d'intérêt est alors le flux non-local d'énergie, qui est le flux cinétique. Celui-ci est défini à partir de la loi de conservation sur l'énergie :

$$\partial_t q + \frac{1}{\eta} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left\langle \left\langle \frac{1}{2} v^3 \Omega f \right\rangle \right\rangle = 0.$$

En fonction des variables M1, le flux non-local ϕ_q^{NL} est alors :

$$\phi_q^{NL} = \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{1}{2} v^3 \mathbf{f}_1 \right\rangle. \quad (4.77)$$

Le flux local ϕ_q^L est quant à lui le flux de diffusion. Il est donc défini à partir de l'équation de diffusion sur l'énergie et vaut :

$$\phi_q^L = -\frac{10}{9\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left(\frac{\hat{q}^2}{\hat{\rho}} \right) = -\frac{5}{2\sigma} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\hat{\rho} \hat{T}^2). \quad (4.78)$$

Le flux local dépend donc exclusivement de l'état macroscopique du système alors que le flux non-local prend en compte les effets cinétiques. En théorie, le flux non-local tend vers le flux local dans le régime de diffusion. En régime cinétique ou intermédiaire, un écart significatif peut être observé entre les deux.

Dans le premier cas de test mono-dimensionnel, la relaxation d'un saut de température est étudiée à densité constante. Le gradient du saut est important pour que le flux local soit aussi. De plus, une légère décroissance a été introduite en amont du saut pour que le flux local soit positif. Sur la figure 4.10, le flux local et le flux non-local (à l'état stationnaire) sont comparés dans le domaine. En aval du saut (**A**), un premier phénomène non-local peut être observé ; le flux non-local est plus grand que le flux local, c'est le préchauffage. De plus, au niveau de la zone de fort gradient (**B**), le flux non-local est fortement limité. Enfin, en amont du saut (**C**), le flux non-local reste négatif alors que le gradient de température est négatif à cet endroit. Le flux est alors qualifié d'anti-naturel puisqu'il est opposé au flux local. Ce phénomène cinétique est une conséquence du fort gradient induit par le saut, qui influence le flux à distance de celui-ci.

Dans le deuxième cas de test, une situation bi-dimensionnelle analogue est considérée. Le profil de température est de forme identique dans la direction horizontale avec une décroissance dans la direction verticale. Celle-ci a été choisie de telle manière que le gradient vertical soit négligeable par rapport au saut pour ne pas induire de phénomènes non-locaux dans cette direction. Sur la figure 4.11, les vecteurs flux de chaleurs sont représentés par dessus le profil de température. Loin du saut de température, les deux flux coïncident. Proche de la zone de fort gradient, les mêmes phénomènes que dans le cas mono-dimensionnel peuvent être observés, en particulier la limitation du flux (**B**) et le flux anti-naturel (**C**). Par ailleurs, un phénomène supplémentaire apparaît en 2D. Dans la zone de décroissance verticale en amont

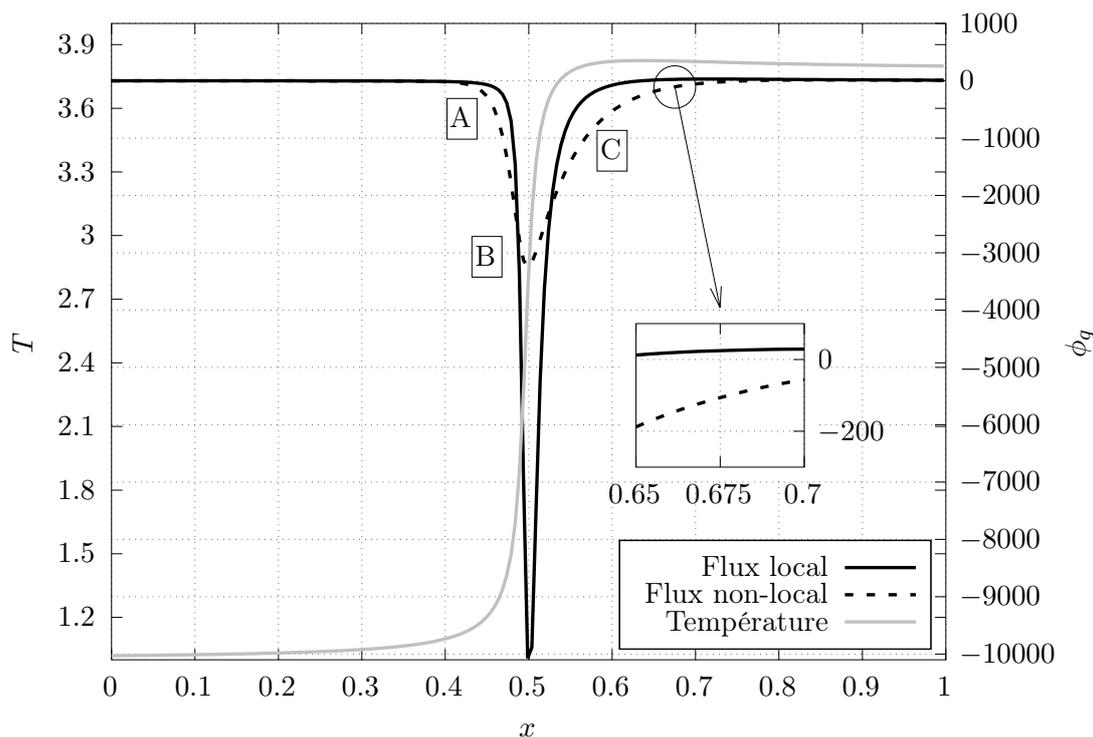


FIGURE 4.10 – Test n°6 : Transport thermique non-local mono-dimensionnel. Température, flux local et non-local dans une coupe horizontale pour le modèle M1. Les principaux effets du transport thermique non-local sont : **A**-le préchauffage, **B**-la limitation du flux et **C**-le flux anti-naturel

du saut (**D**), le flux non-local n'est pas aligné avec le flux local mais s'oriente vers la zone de fort gradient. Cet effet est la rotation du flux.

Ces deux cas de tests élémentaires ont permis de mettre en évidence les principaux effets du transport thermique non-local et les capacités du schéma à correctement les résoudre.

4.5.2 Maillage non structuré triangulaire

Dans cette dernière section, les cas de test précédents sont repris sur des maillages non structurés pour évaluer UGKS-M1 dans cette situation. La version d'UGKS-M1 retenue est celle dont le schéma limite est le schéma diamant normal. La densité à l'interface est donc donnée par (4.63).

La version d'UGKS-M1 ayant pour schéma limite le diamant modifié (voir section 4.4.2.3) donne des résultats en tous points identiques à ceux de l'autre schéma dans tous les cas de tests présentés ci-dessous. Le choix de la densité à l'interface (que permet ce schéma) n'a pas permis de montrer de différence non plus.

Cas unidimensionnels

Pour les cas de test unidimensionnels, deux maillages triangulaires différents du domaine $\mathcal{D} = [0, 1] \times [0, 1]$ sont générés avec GMSH [24]. Le maillage **A** est un maillage raffiné autour de la ligne $y = 0.5$ (voir figure 4.12). La zone centrale est suffisamment large pour que les mailles générées soient proches de triangles équilatéraux. Le maillage **B** (voir figure 4.13) est constitué de triangles déformés pour observer l'influence de la forme des mailles sur les

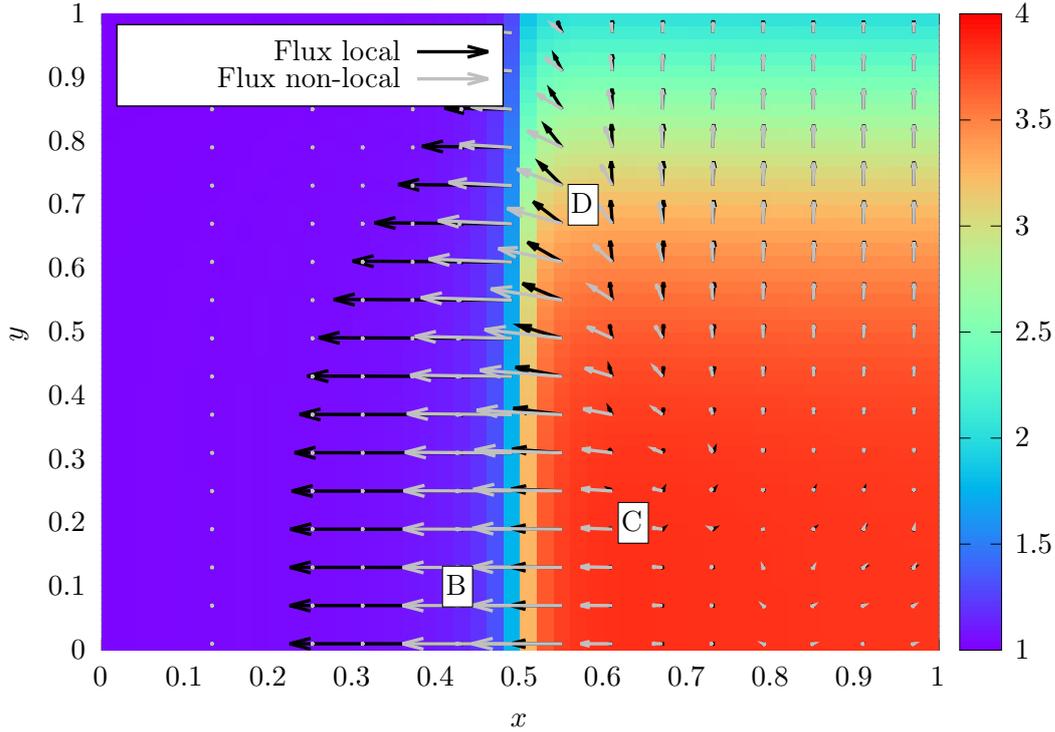


FIGURE 4.11 – Test n°6 : Transport thermique non-local bi-dimensionnel. Température, flux local et non-local dans le domaine pour le modèle M1. Une rotation du flux est mise en avant en **D**

solutions². Sur celui-ci les solutions unidimensionnelles sont extraites à partir de deux lignes de coupe horizontales ; la première (dénotée par C1) est en $y = 0.5$ et la deuxième (dénotée par C2) en $y = 0.2$. Afin de réaliser des comparaisons honnêtes avec les résultats précédents sur les maillages structurés, les paramètres des maillages sont choisis de telle manière que le nombre de triangles intersectés par les lignes de coupe soit environ de 200.

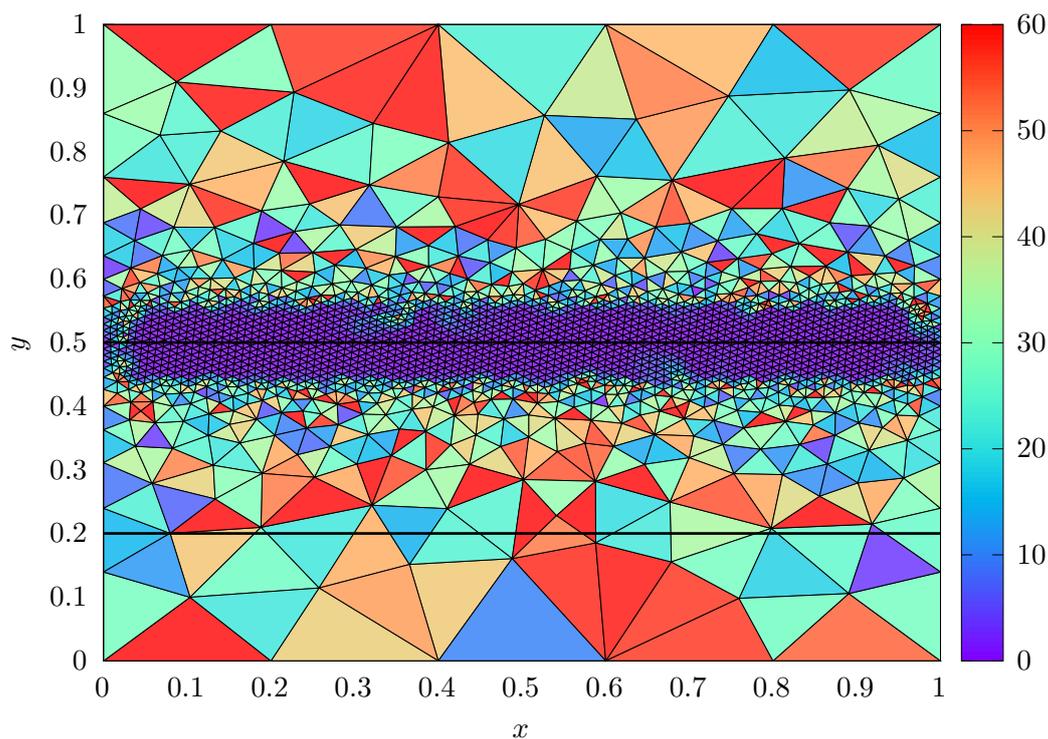
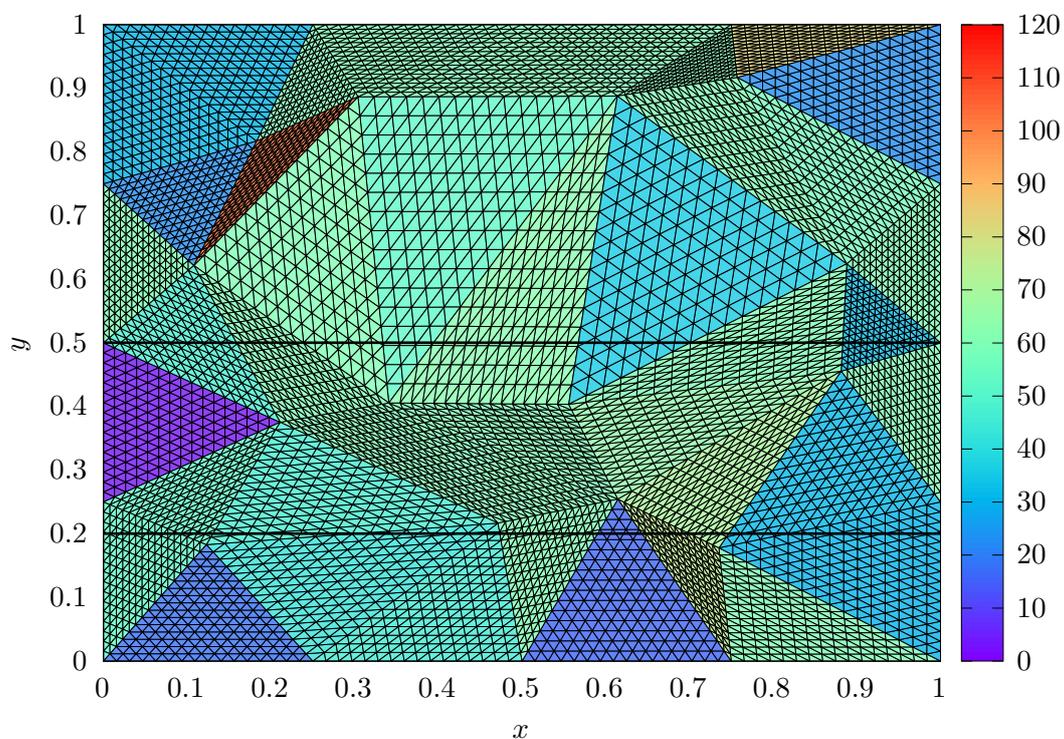
Sur les deux figures, la déformation angulaire κ est représentée. Cette quantité est une mesure de l'éloignement par rapport à un triangle équilatérale et est définie à partir des trois angles (α, β, γ) de chacune des mailles :

$$\kappa = |60^\circ - \alpha| + |60^\circ - \beta| + |60^\circ - \gamma|. \quad (4.79)$$

D'autres mesures sont possibles, comme par exemple le rapport entre le rayon du cercle circonscrit et du cercle inscrit (qui vaut 2 pour un triangle équilatéral).

Dans le régime cinétique (figure 4.14), les solutions sur maillage structuré et sur le maillage **A** (non structuré mais pas déformé) sont identiques et à tous les instants. Cependant sur les deux coupes du maillage **B**, un écart significatif peut être observé. L'amplitude des ondes de densité est trop faible et celles-ci ont un retard. Cet effet de diffusion numérique est une conséquence du choix de la reconstruction de la fonction de distribution dans UGKS. En effet avec la reconstruction naïve d'ordre 0 (4.50), le schéma de transport limite est celui de Godunov direction par direction. Bien que d'ordre 1, ce schéma est particulièrement diffusif, en particulier sur les maillages non structurés déformés. En modifiant la reconstruction de la fonction

2. Ce maillage a été généré en déformant manuellement un mauvais maillage grossier puis en raffinant celui-ci par fragmentation plusieurs fois. Ce procédé consiste à diviser chaque maille en 3 triangles à partir du centre de gravité. Les triangles ainsi obtenus conservent les déformations.

FIGURE 4.12 – Déformation angulaire du maillage **A** (4036 triangles)FIGURE 4.13 – Déformation angulaire du maillage **B** et lignes de coupe (10752 triangles)

de distribution, il pourrait être possible de retrouver l'extension purement multi-dimensionnel (voir remarque 2.4.1) du schéma de Godunov et donc d'améliorer ces résultats. En pratique, cela reviendrait à prendre en compte une composante tangentielle dans la reconstruction.

Dans le régime intermédiaire (figure 4.15), les mêmes observations peuvent être faites. Les résultats sur le maillage **A** coïncident avec ceux sur le maillage structuré mais une diffusion numérique apparaît encore significativement sur les deux solutions obtenues sur le maillage **B**. L'utilisation d'un bon schéma de transport (même d'ordre 1) se révèle tout aussi important dans ce régime.

Enfin dans le régime de diffusion (figure 4.16), les résultats sur les deux maillages **A** et **B** coïncident exactement avec ceux sur maillage structuré. Dans ce cas, le schéma limite est adapté pour prendre en compte les déformations des mailles. Sur la figure 4.17, le même cas de test est repris mais avec la version d'UGKS-M1 dégénérant vers le schéma de diffusion naïf. Sur le maillage **A**, les résultats sont toujours identiques cependant ceux sur le maillage **B** deviennent totalement aberrants. Les écarts observés ne sont plus liés à des effets de diffusion numérique (comme sur le schéma de transport) mais dus au fait que le schéma limite n'est pas consistant si les mailles sont déformées (puisque le gradient normal ne peut pas être approché par le gradient entre les centres des mailles).

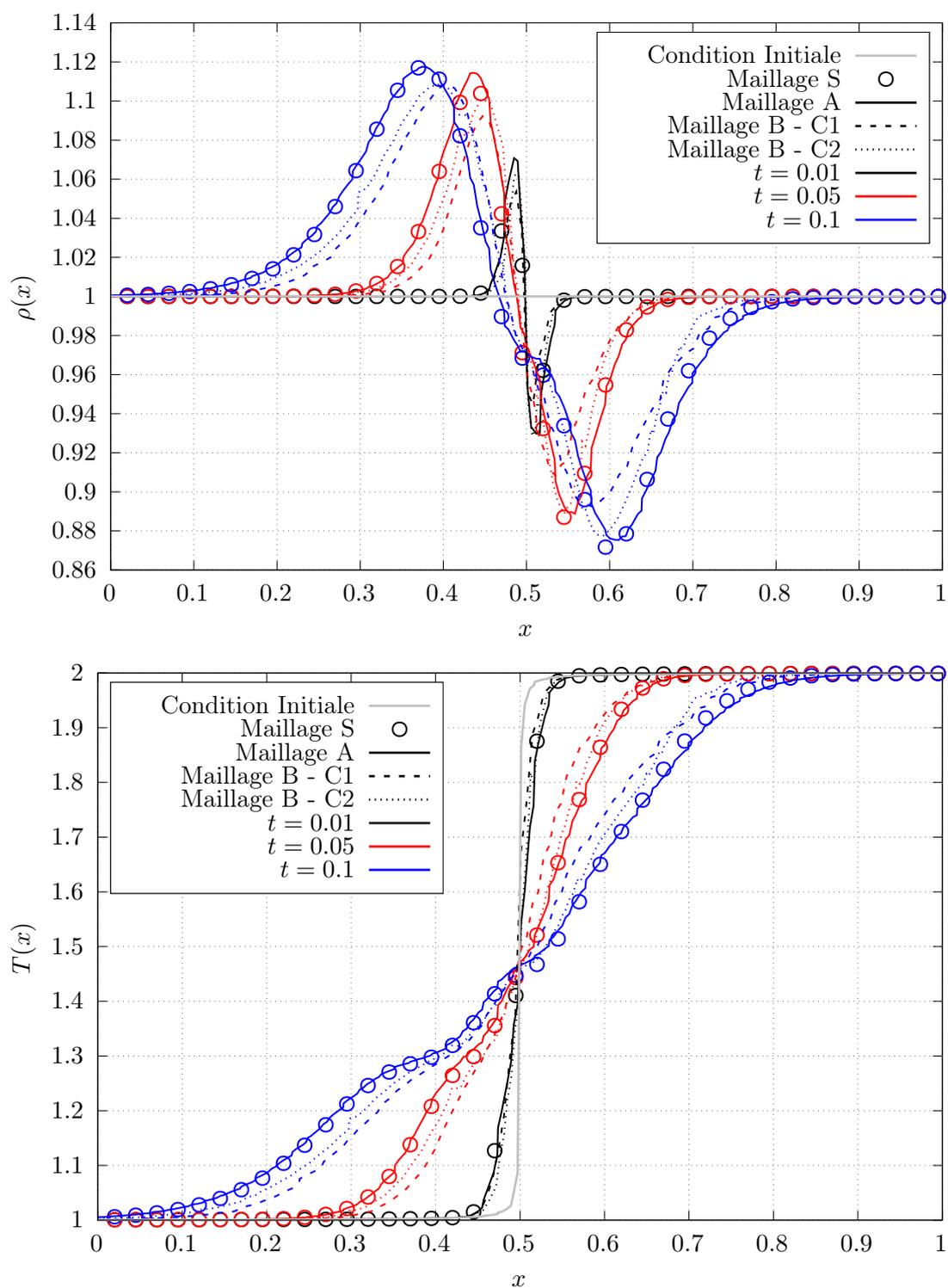


FIGURE 4.14 – Test n°2 : Régime cinétique. Densité et température dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

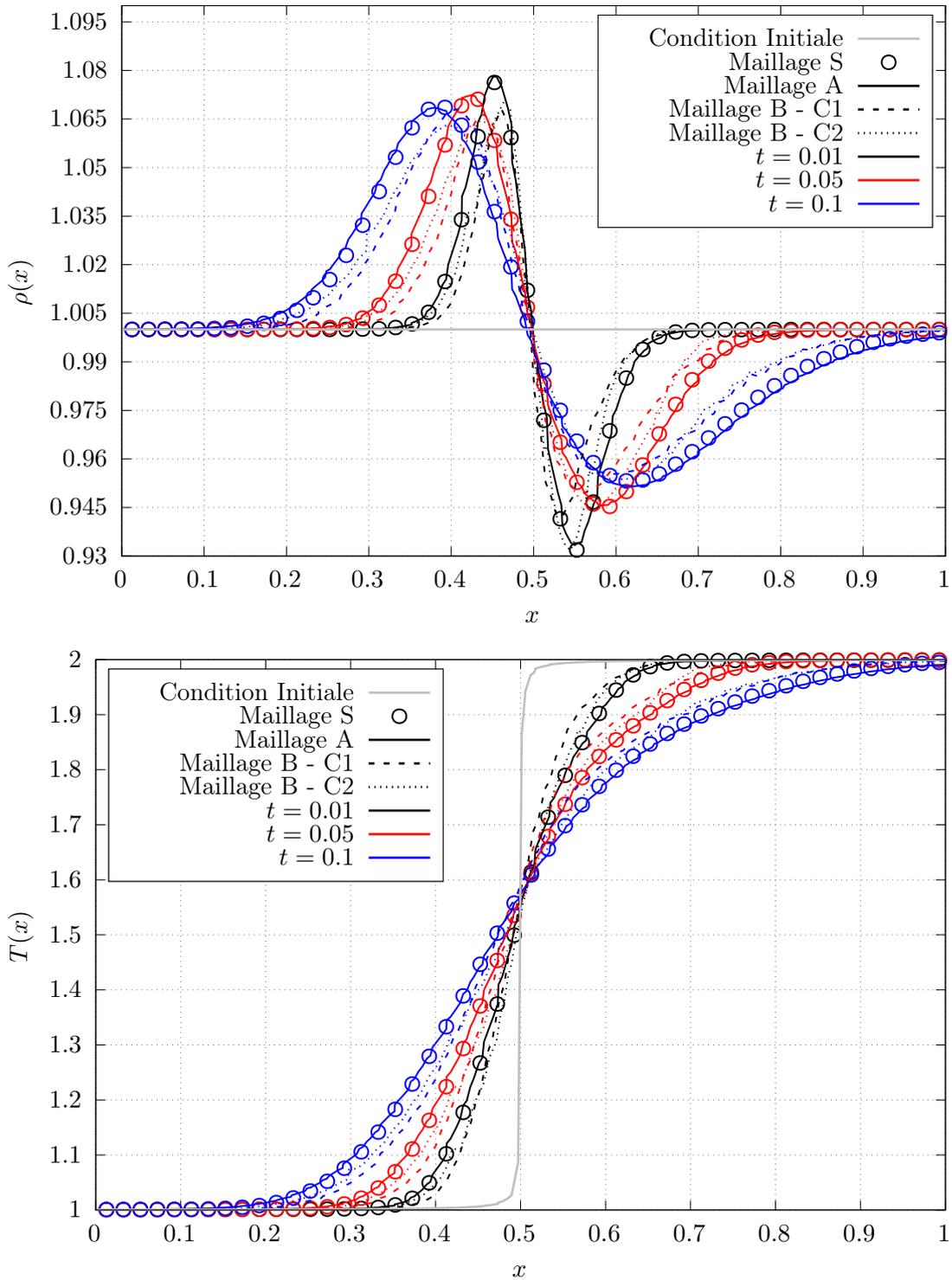


FIGURE 4.15 – Test n°2 : Régime intermédiaire. Densité et température dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1

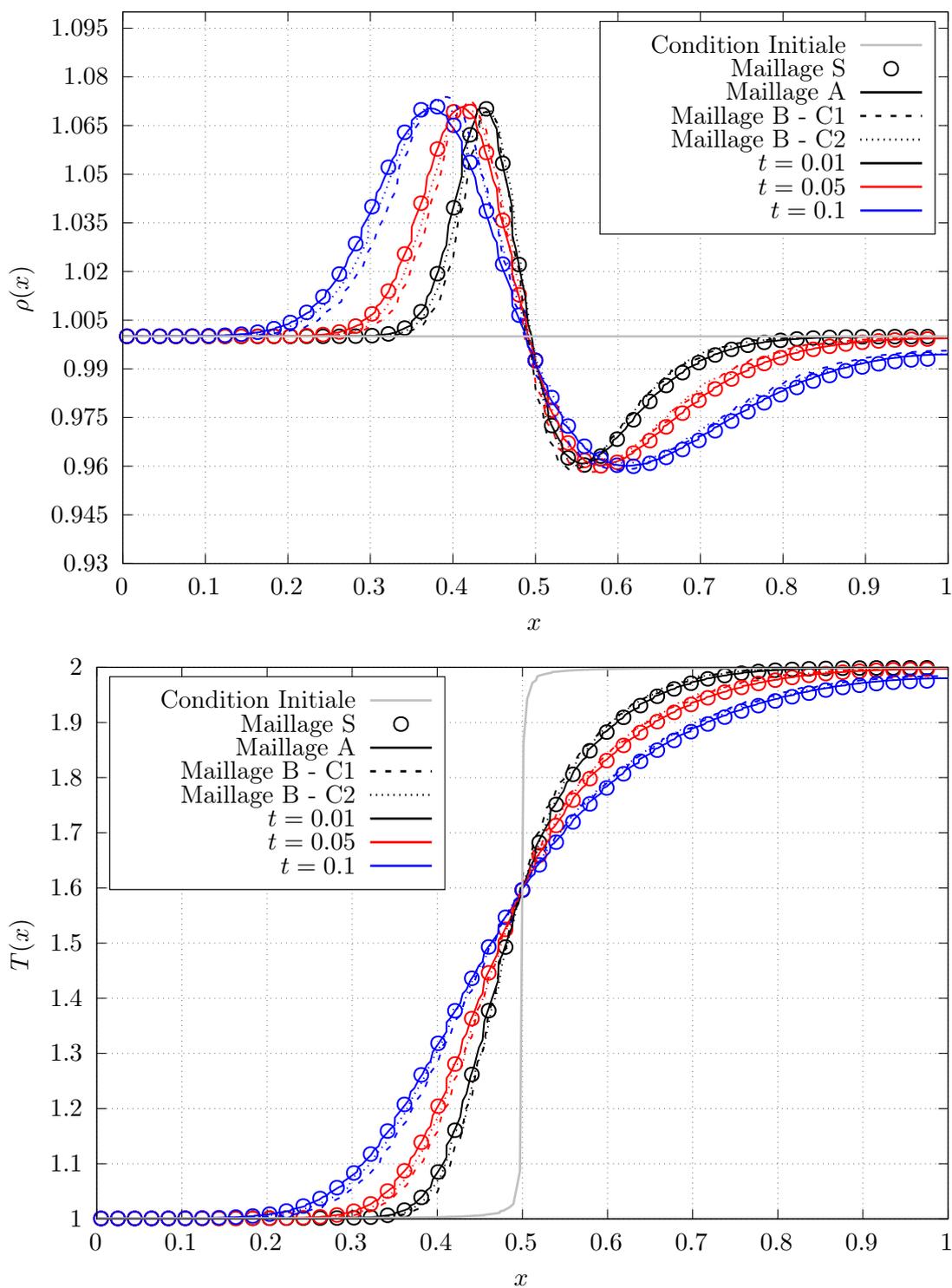


FIGURE 4.16 – Test n°2 : Régime de diffusion. Densité et température dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1 (schéma diamant)

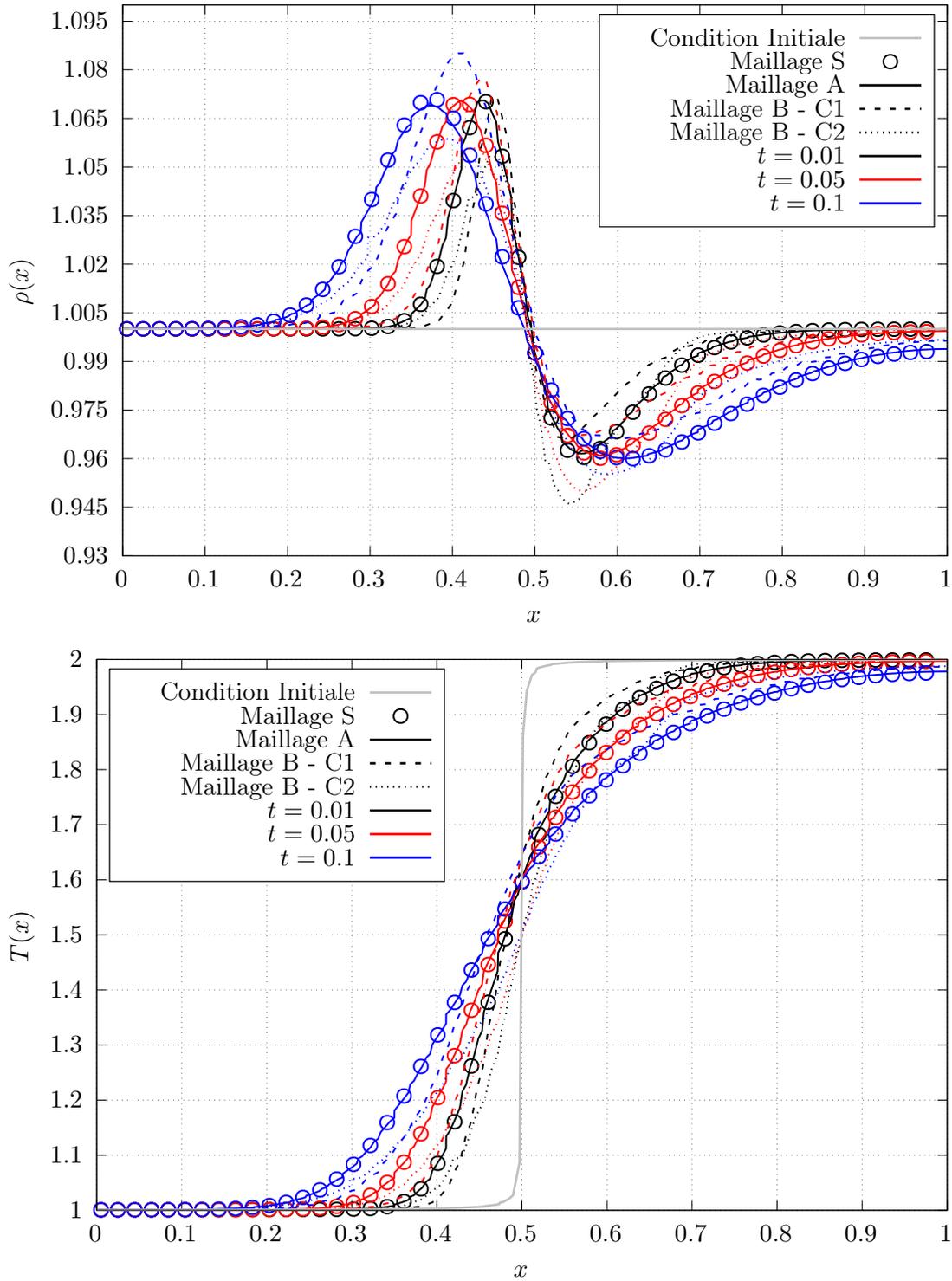


FIGURE 4.17 – Test n°2 : Régime de diffusion. Densité et température dans le domaine pour l'équation cinétique et le modèle M1 (schéma naïf)

Dépôt d'énergie

Pour le cas de test du dépôt d'énergie, deux maillages différents sont considérés. Le premier (représenté sur la figure 4.18) est un maillage régulier constitué d'une densité de mailles identique au maillage cartésien. Le deuxième (voir figure 4.19) est un maillage adapté à la situation physique. Les mailles sont raffinées le long de l'axe du rayon à partir du coin inférieur gauche. La zone du dépôt d'énergie ainsi que celle à proximité du saut de densité sont aussi raffinées.

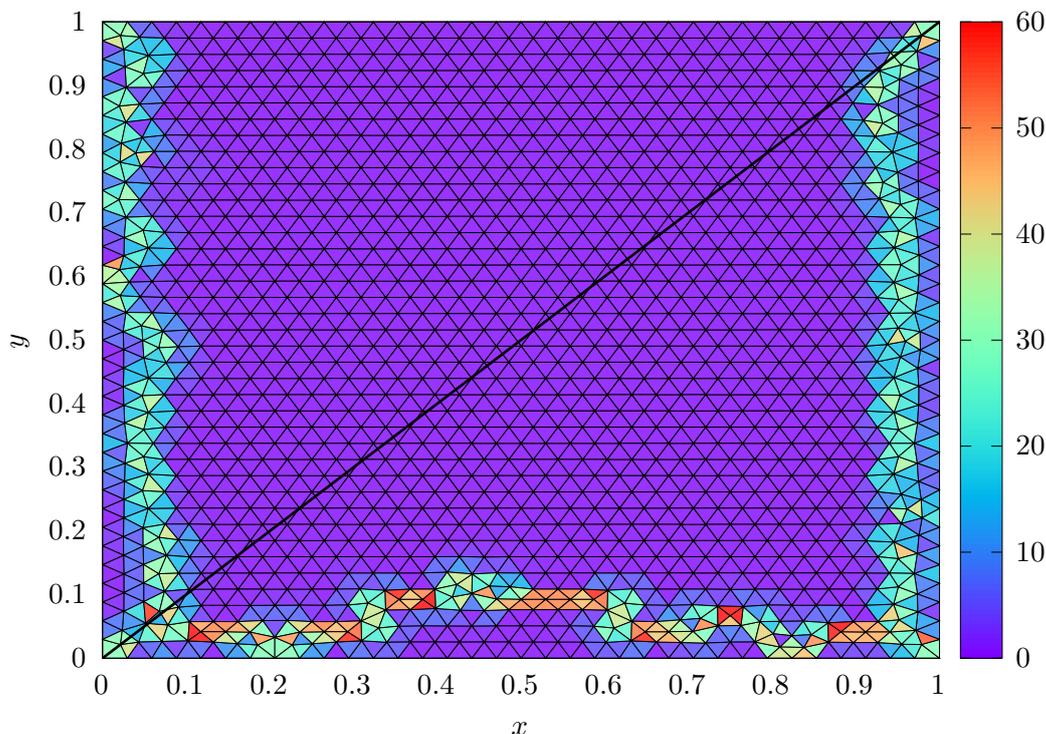


FIGURE 4.18 – Déformation angulaire du maillage C et ligne de coupe (4184 triangles)

Sur les figures 4.20 et 4.21, la densité et l'énergie dans le domaine sont représentés sur les deux maillages avec UGKS-M1. Les solutions sont semblables à celles obtenues sur maillage structuré. La zone de forte densité est bien ablatée par le faisceau incident d'électrons et de l'énergie est déposée dans cette zone. Le maillage adapté permet de mieux résoudre le front de densité ainsi que la zone de dépôt. Les mailles sont grossières dans les zones où les quantités évoluent peu ce qui permet d'économiser en temps calcul.

Afin de pouvoir réaliser des comparaisons précises, la densité et l'énergie sont extraites le long de la ligne de coupe $y = x$. Sur la figure 4.22, ces deux quantités sont comparées sur les deux maillages non structuré mais aussi avec les solutions obtenues avec UGKS-M1 d'ordre 1 et d'ordre 2 sur maillage structuré. Sur le premier graphique (portant sur la densité), toutes les solutions sont similaires. Au niveau du maximum, il apparaît que le maillage **D** (adapté) permet bien de limiter la diffusion numérique puisque la solution tend vers celle obtenue avec le schéma d'ordre 2 sur maillage structuré. La solution sur le maillage **C** (régulier non structuré) est identique à celle sur le maillage structuré ayant le même nombre de mailles. Sur le deuxième graphique (portant sur l'énergie), la même conclusion peut être tirée sur le maximum de l'énergie déposée. Cependant, les solutions diffèrent légèrement proche du bord. La solution à ce problème n'a pas encore été totalement élucidée. Dans les différents tests réalisées, il est apparu qu'avec cette donnée de bord à très haute température, la solution n'est pas totalement convergée en vitesse et un v_{max} plus important devrait être pris. Il serait

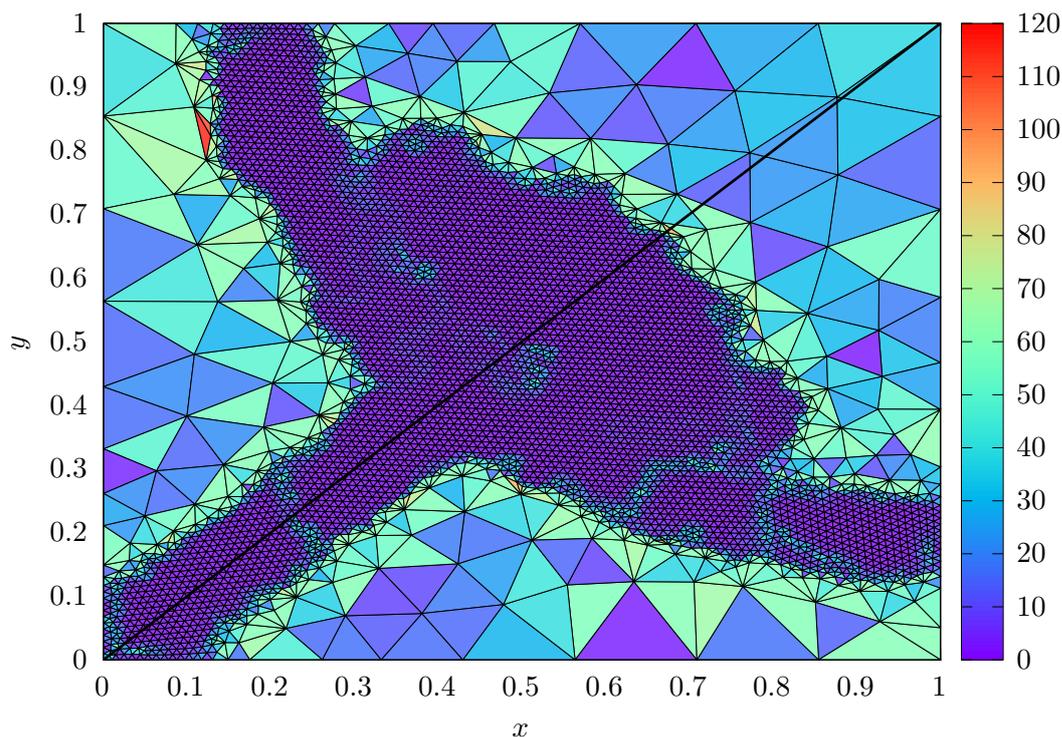


FIGURE 4.19 – Déformation angulaire du maillage D et ligne de coupe (9726 triangles)

alors possible que l'erreur commise en vitesse soit liée au maillage en espace, ce qui provoque donc cet écart. Par ailleurs, l'erreur étant commise dans la zone de transport libre, le schéma de transport pourrait être mis en cause. Cependant, les maillages non structurés utilisés sont peu déformés ce qui permet *a priori* d'écarter cette hypothèse (de part l'analyse sur les cas de test unidimensionnels). La dernière hypothèse pourrait venir du traitement de la condition de bord en non structuré. Plusieurs tests pourraient être réalisés pour par exemple écarter un éventuel problème lié au coin (en réalisant la même simulation dans la direction horizontale par exemple).

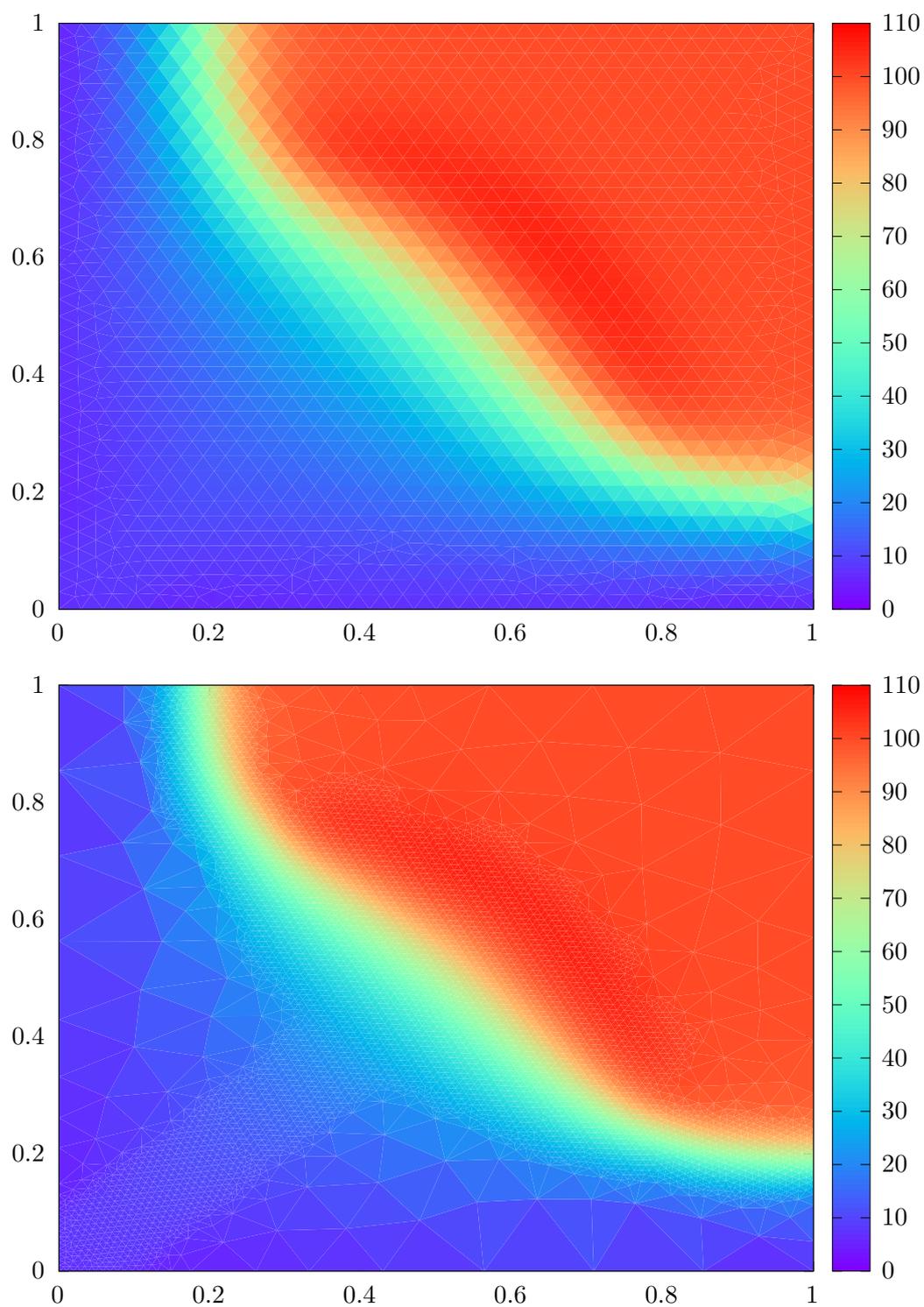


FIGURE 4.20 – Test n°5 : Dépôt d'énergie. Densité dans le domaine pour le modèle M1 sur le maillage C et D

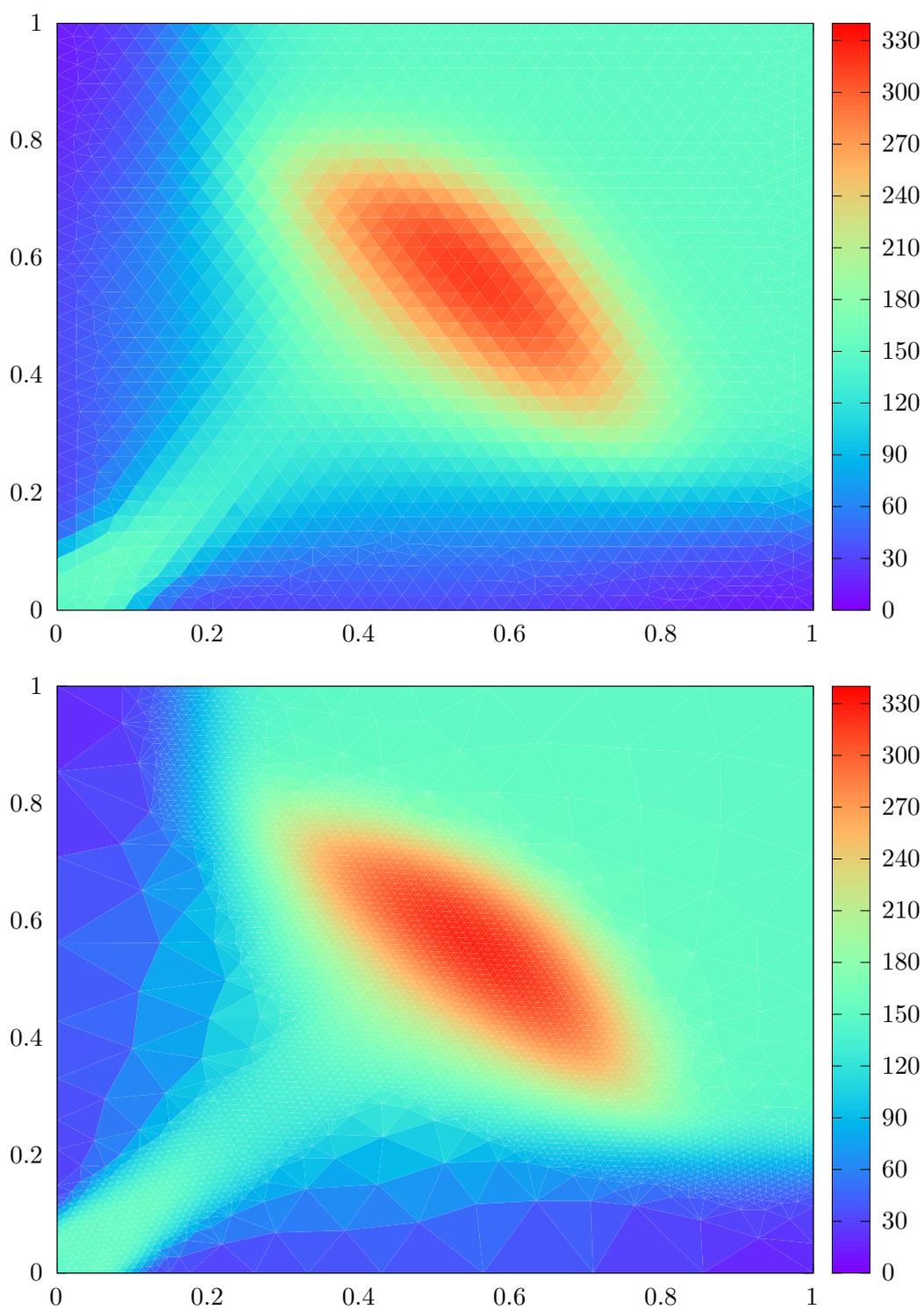


FIGURE 4.21 – Test n°5 : Dépôt d'énergie. Énergie dans le domaine pour le modèle M1 sur le maillage C et D

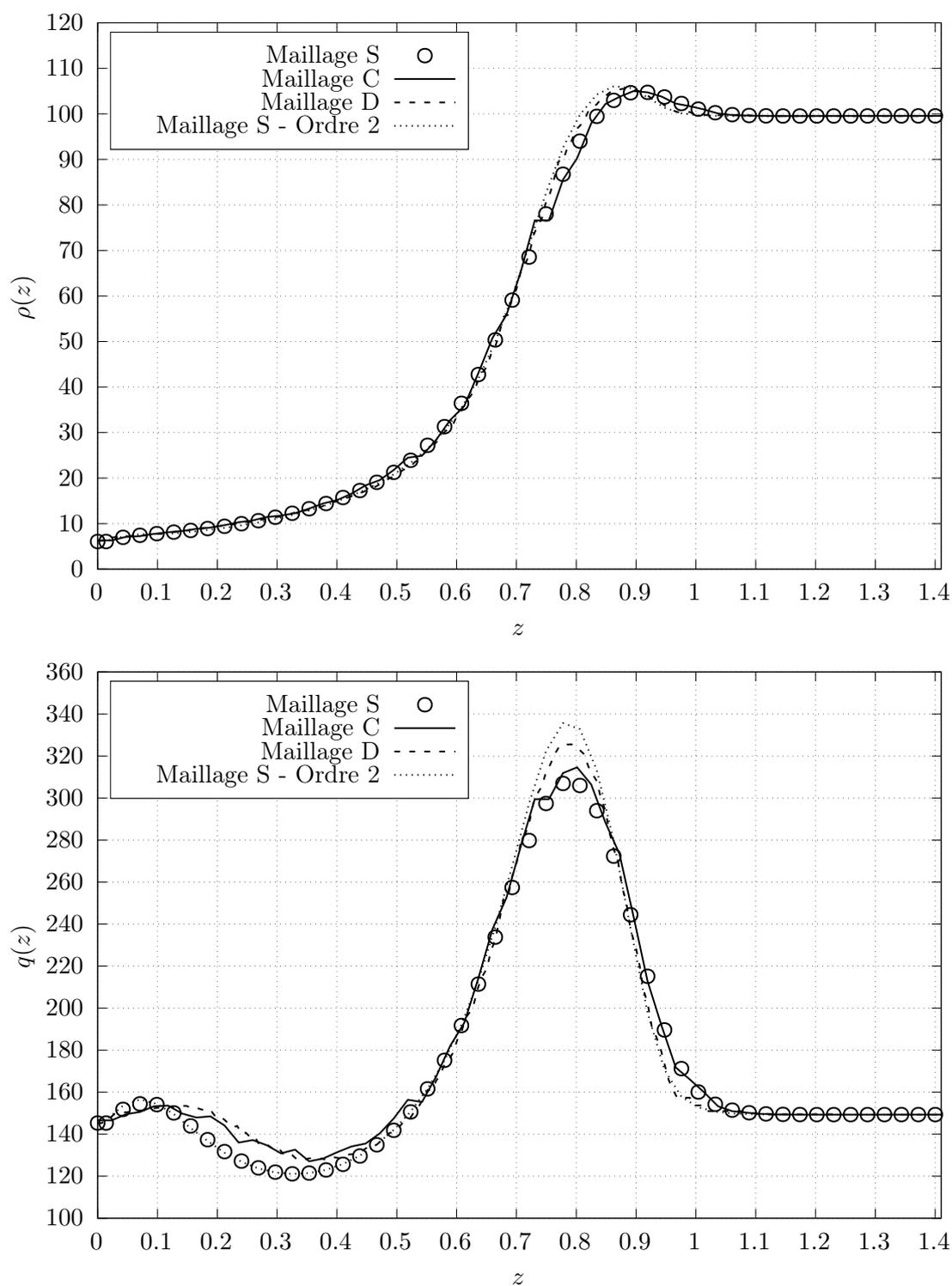


FIGURE 4.22 – Test n°5 : Dépôt d'énergie. Densité et énergie dans une coupe transversale du domaine pour le modèle M1

Conclusion et Perspectives

Conclusion générale

L'objectif principal de cette thèse était de proposer une nouvelle méthode préservant l'asymptotique pour des modèles aux moments en lien avec la physique des plasmas. Ce travail a été réalisé dans un premier temps dans le contexte simplifié du transport linéaire en une dimension d'espace puis dans le cadre du transport électronique en deux dimension sur maillage cartésien et non structuré.

Tout d'abord, le développement de l'*Unified Gas Kinetic Scheme* (UGKS) a été repris dans ce premier contexte. Un nouveau schéma pour le modèle aux moments M1 (UGKS-M1) a été obtenu en appliquant la fermeture entropique à l'échelle numérique dans UGKS. L'idée principale consistait plus précisément à projeter la fonction de distribution dans l'espace M1 à chaque pas de temps dans UGKS. Des flux ont alors pu être directement exhibés sur les variables M1. En procédant ainsi, il a été démontré que ce nouveau schéma hérite des propriétés d'UGKS en terme de préservation d'asymptotique. Une extension à l'ordre 2, qui n'altère pas cette propriété, a par ailleurs été proposée. Le caractère générique de cette démarche a ensuite été mis en avant en réalisant cette fois une fermeture angulaire dans UGKS pour obtenir un schéma pour le modèle P1. La même démarche a ensuite été suivie pour des schémas pour des modèles d'ordres élevés comme Pn et M2. Ensuite, la réalisabilité d'UGKS-M1 a été discutée. Une modification originale a été introduite dans les reconstructions d'UGKS pour permettre d'assurer cette propriété. Il a été démontré que celle-ci peut être assurée sous une condition CFL de stabilité raisonnable, qui ne dépend pas fortement du régime. Enfin, plusieurs cas de tests ont été présentés pour évaluer et mettre en avant le bon comportement des différents schémas dans chacun des régimes. UGKS-M1 a notamment été comparé à un autre schéma préservant l'asymptotique reposant sur HLL. Ce nouveau schéma se révèle particulièrement précis et peu diffusif en particulier dans les régimes intermédiaires. Une discussion sur les modèles a également été apportée en comparant le modèle M1 avec le modèle M2 et les modèles Pn dans des situations cinétiques. Les avantages des modèles entropiques et l'intérêt de l'augmentation de la taille de la hiérarchie ont alors clairement été mis en avant.

Ce travail a ensuite été poursuivi dans le contexte du transport électronique. Tout d'abord, UGKS a été construit sur maillage structuré pour l'équation cinétique et sa propriété de préservation de l'asymptotique a été démontrée. Il a été notamment mis en évidence que plusieurs schémas de diffusions peuvent être obtenus en choisissant correctement la reconstruction de la Maxwellienne. Un nouveau schéma pour le modèle M1 du transport électronique a ensuite été obtenu en appliquant la même idée que précédemment qui consiste à fermer angulairement les flux d'UGKS à l'aide de la distribution M1. Cette procédure a cette fois conduit à des flux non-analytiques; une méthode de quadrature a alors été proposée pour les évaluer à moindre

coût tout en assurant la consistance des flux et en préservant la propriété de préservation de l'asymptotique. Une extension à l'ordre 2 a aussi été suggérée.

Dans un second temps, UGKS-M1 a été étendu sur maillage non-structuré. L'un des principaux enjeux a été de modifier UGKS pour obtenir un bon schéma de diffusion dans le régime associé. Deux approches reposant sur le schéma diamant ont été proposées. La première consiste à utiliser directement l'approximation diamant dans la reconstruction de la Maxwellienne et permet d'obtenir exactement le schéma diamant dans le régime de diffusion dans UGKS-M1. La deuxième repose sur l'introduction d'un nouveau diamant plus régulier et qui permet plus de flexibilité dans UGKS.

Enfin, ce nouveau schéma a été évalué et comparé à un schéma HLL standard dans différents régimes. Tout comme dans le cadre du transport linéaire, celui-ci s'est révélé particulièrement précis et peu diffusif. Deux cas d'applications pertinents en lien avec la physique des plasmas ont notamment été étudiés et ont permis de mettre en avant la capacité du schéma à résoudre différentes échelles et à capturer les différents effets de transport thermique non-local. La version d'UGKS-M1 sur maillage non structuré a pu aussi être testée sur différents types de maillages et présente des résultats satisfaisants. Il a notamment pu être exposé que les corrections introduites dans UGKS permettent de correctement résoudre la limite de diffusion en présence de mailles déformées. L'intérêt des maillages non structuré a aussi pu être mis en avant en adaptant un maillage à la situation physique.

Perspectives

Ce travail de thèse présente plusieurs perspectives :

- Tout d'abord dans le contexte simplifié du transport linéaire, il pourrait être intéressant d'étudier en pratique la version implicite des nouveaux schémas ainsi que l'utilisation de conditions aux limites anisotropes (héritées d'UGKS). De plus, il reste à montrer que les conditions de stabilité obtenues pour garantir la réalisabilité d'UGKS-M1 dérogent bien vers une condition hyperbolique lorsque le pas d'espace tend vers 0.
- Dans le contexte du transport électronique, il semble tout d'abord important d'affiner l'extension à l'ordre 2 afin d'améliorer l'ordre actuel. Dans la version non structurée du schéma, les flux de transport sont particulièrement diffusifs (en particulier sur les maillages déformés), du fait des reconstructions choisies. Une approche purement multidimensionnelle permettrait de corriger ce défaut du schéma dans UGKS. Il pourrait aussi être intéressant d'étudier l'implémentation de schémas alternatifs au schéma diamant dans UGKS. Enfin, l'exploitation du dernier cas de test en non structuré doit être affinée.
- La limitation principale d'UGKS (et donc dans les schémas hérités pour les modèles aux moments) est sa restriction aux modèles cinétiques formés à partir d'opérateurs de type relaxation. En effet, cette forme particulière permet d'écrire la formule de Duhamel qui est à la base des flux. Afin de pouvoir prendre en compte des phénomènes physiques plus complexes, il apparaît pertinent de chercher une manière de traiter des opérateurs de collisions différents, comme celui de Boltzmann.

Bibliographie

- [1] Mounir Bennoune, Mohammed Lemou, and Luc Mieussens. Uniformly stable numerical schemes for the Boltzmann equation preserving the compressible Navier–Stokes asymptotics. Journal of Computational Physics, 227(8) :3781–3803, 2008.
- [2] Christophe Berthon and Rodolphe Turpault. Asymptotic preserving HLL schemes. Numerical methods for partial differential equations, 27(6) :1396–1422, 2011.
- [3] PL Bhatnagar, EP Gross, and ML1954PhRv Krook. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. 1954.
- [4] Florian Blachère, Christophe Chalons, and Rodolphe Turpault. Very high-order asymptotic-preserving schemes for hyperbolic systems of conservation laws with parabolic degeneracy on unstructured meshes. Computers & Mathematics with Applications, 87 :41–49, 2021.
- [5] Xavier Blanc and Emmanuel Labourasse. A positive scheme for diffusion problems on deformed meshes. ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, 96(6) :660–680, 2016.
- [6] Alberto Bressan. Hyperbolic systems of conservation laws : the one-dimensional Cauchy problem, volume 20. Oxford University Press, USA, 2000.
- [7] Christophe Buet, Stéphane Cordier, Brigitte Lucquin-Desreux, and Simona Mancini. Diffusion limit of the Lorentz model : asymptotic preserving schemes. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 36(4) :631–655, 2002.
- [8] José A Carrillo, Thierry Goudon, Pauline Lafitte, and Francesco Vecil. Numerical schemes of diffusion asymptotics and moment closures for kinetic equations. Journal of Scientific Computing, 36(1) :113–149, 2008.
- [9] José-Antonio Carrillo, Thierry Goudon, and Pauline Lafitte. Simulation of fluid and particles flows : Asymptotic preserving schemes for bubbling and flowing regimes. Journal of Computational Physics, 227(16) :7929–7951, 2008.
- [10] Christophe Chalons and Sébastien Guisset. An antidiffusive HLL scheme for the electronic M_1 model in the diffusion limit. Multiscale Modeling & Simulation, 16(2) :991–1016, 2018.
- [11] A. Chrismont, P. Loiseau, J-L Feugeas, P-E Masson-Laborde, J. Mathiaud, V. Tikhonchuk, and P. Nicolai. Analysis of a kinetic model for electron heat transport in inertial confinement fusion plasmas. Physics of Plasmas, 29(6), 2022.

- [12] Antoine Chrisment. Theoretical study of nonlocal electron transport in plasmas relevant to inertial confinement fusion. PhD thesis, Université de Bordeaux, 2024.
- [13] Antoine Chrisment, A. Debayle, J-L Feugeas, Pascal Loiseau, P-E Masson-Laborde, Julien Mathiaud, P. Nicolai, and Vladimir Tikhonchuk. A deterministic numerical scheme for an electron heat transport model. Mathematics and Computers in Simulation, 205 :78–97, 2023.
- [14] William J Cody. Algorithm 715 : Specfun—a portable fortran package of special function routines and test drivers. ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), 19(1) :22–30, 1993.
- [15] Yves Coudière. Contributions à l’analyse numérique de méthodes de volumes finis, à la modélisation et au calcul en électrocardiologie. PhD thesis, Université de Nantes, 2009.
- [16] Yves Coudière, Jean-Paul Vila, and Philippe Villedieu. Convergence rate of a finite volume scheme for a two dimensional convection-diffusion problem. ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, 33(3) :493–516, 1999.
- [17] D. Del Sorbo, J-L Feugeas, P. Nicolai, M. Olazabal-Loumé, B. Dubroca, S. Guisset, M. Touati, and V. Tikhonchuk. Reduced entropic model for studies of multidimensional nonlocal transport in high-energy-density plasmas. Physics of Plasmas, 22(8), 2015.
- [18] Dario Del Sorbo. An entropic approach to magnetized nonlocal transport and other kinetic phenomena in high-energy-density plasmas. PhD thesis, Université de Bordeaux, 2015.
- [19] Olivier Desjardins, Rodney O Fox, and Philippe Villedieu. A quadrature-based moment method for dilute fluid-particle flows. Journal of Computational Physics, 227(4) :2514–2539, 2008.
- [20] B Dubroca, J-L Feugeas, and M Frank. Angular moment model for the Fokker-Planck equation. The European Physical Journal D, 60 :301–307, 2010.
- [21] Bruno Dubroca and Jean-Luc Feugeas. Etude théorique et numérique d’une hiérarchie de modèles aux moments pour le transfert radiatif. Comptes Rendus de l’Académie des Sciences-Series I-Mathematics, 329(10) :915–920, 1999.
- [22] Bruno Dubroca and A Klar. Half-moment closure for radiative transfer equations. Journal of Computational Physics, 180(2) :584–596, 2002.
- [23] Jean-Luc Feugeas, Julien Mathiaud, Luc Mieussens, and Thomas Vigier. An asymptotic preserving kinetic scheme for the M1 model of linear transport. Mathematics and Computers in Simulation, 226 :383–398, 2024.
- [24] Christophe Geuzaine and Jean-François Remacle. Gmsh : A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. International journal for numerical methods in engineering, 79(11) :1309–1331, 2009.
- [25] Laurent Gosse. Transient radiative transfer in the grey case : Well-balanced and asymptotic-preserving schemes built on case’s elementary solutions. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 112(12) :1995–2012, 2011.
- [26] Sébastien Guisset, Stéphane Brull, Bruno Dubroca, and Rodolphe Turpault. An admissible asymptotic-preserving numerical scheme for the electronic M1 model in the diffusive limit. Communications in Computational Physics, 24(5) :1326–1354, 2018.

-
- [27] Zhaoli Guo, Ruijie Wang, and Kun Xu. Discrete unified gas kinetic scheme for all Knudsen number flows. ii. thermal compressible case. Physical Review E, 91(3) :033313, 2015.
- [28] Zhaoli Guo, Kun Xu, and Ruijie Wang. Discrete unified gas kinetic scheme for all Knudsen number flows : Low-speed isothermal case. Physical Review E—Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 88(3) :033305, 2013.
- [29] Amiram Harten, Peter D Lax, and Bram van Leer. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. SIAM review, 25(1) :35–61, 1983.
- [30] Cory D Hauck. High-order entropy-based closures for linear transport in slab geometry. Communications in Mathematical Sciences, 9(1) :187–205, 2011.
- [31] Francois Hermeline. A finite volume method for approximating 3d diffusion operators on general meshes. Journal of Computational Physics, 228(16) :5763–5786, 2009.
- [32] Juan-Chen Huang, Kun Xu, and Pubing Yu. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows ii : multi-dimensional cases. Communications in Computational Physics, 12(3) :662–690, 2012.
- [33] Shi Jin and C David Levermore. Fully-discrete numerical transfer in diffusive regimes. Transport theory and statistical physics, 22(6) :739–791, 1993.
- [34] Shi Jin and David Levermore. The discrete-ordinate method in diffusive regimes. Transport theory and statistical physics, 20(5-6) :413–439, 1991.
- [35] Shi Jin, Lorenzo Pareschi, and Giuseppe Toscani. Uniformly accurate diffusive relaxation schemes for multiscale transport equations. SIAM Journal on Numerical Analysis, 38(3) :913–936, 2000.
- [36] Axel Klar. An asymptotic-induced scheme for nonstationary transport equations in the diffusive limit. SIAM journal on numerical analysis, 35(3) :1073–1094, 1998.
- [37] Axel Klar and Christian Schmeiser. Numerical passage from radiative heat transfer to nonlinear diffusion models. Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, 11(05) :749–767, 2001.
- [38] W Kofink. Studies of the spherical harmonics method in neutron transport theory. Nuovo Cimento (Italy) Divided into Nuovo Cimento A and Nuovo Cimento B, 10, 1958.
- [39] Pauline Lafitte and Giovanni Samaey. Asymptotic-preserving projective integration schemes for kinetic equations in the diffusion limit. SIAM Journal on Scientific Computing, 34(2) :A579–A602, 2012.
- [40] A. W. Larsen and J. E. Morel. Asymptotic solutions of numerical transport problems in optically thick, diffusive regimes. II. Journal of Computational Physics, 83(1) :212–236, 1989.
- [41] A. W. Larsen, J. E. Morel, and W. F. Miller Jr. Asymptotic solutions of numerical transport problems in optically thick, diffusive regimes. Journal of Computational Physics, 69(2) :283–324, 1987.
- [42] Edward W Larsen, Jim E Morel, and Warren F Miller Jr. Asymptotic solutions of numerical transport problems in optically thick, diffusive regimes. Journal of Computational Physics, 69(2) :283–324, 1987.
-

- [43] Vyacheslav Ivanovich Lebedev and Dimitri N Laikov. A quadrature formula for the sphere of the 131st algebraic order of accuracy. In Doklady Mathematics, volume 59, pages 477–481. Pleiades Publishing, 1999.
- [44] Mohammed Lemou and Luc Mieussens. A new asymptotic preserving scheme based on micro-macro formulation for linear kinetic equations in the diffusion limit. SIAM Journal on Scientific Computing, 31(1) :334–368, 2008.
- [45] Randall J LeVeque. Numerical methods for conservation laws, volume 214. Springer, 1992.
- [46] Randall J LeVeque. Finite volume methods for hyperbolic problems, volume 31. Cambridge university press, 2002.
- [47] C David Levermore. Moment closure hierarchies for kinetic theories. Journal of Statistical Physics, 83(5) :1021–1065, 1996.
- [48] Chang Liu, Kun Xu, Quanhua Sun, and Qingdong Cai. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows iv : Full boltzmann and model equations. Journal of Computational Physics, 314 :305–340, 2016.
- [49] JF. Luciani, P. Mora, and J. Virmont. Nonlocal heat transport due to steep temperature gradients. Physical review letters, 51(18) :1664, 1983.
- [50] Luc Mieussens. On the Asymptotic Preserving property of the Unified Gas Kinetic Scheme for the diffusion limit of linear kinetic models. Journal of Computational Physics, 253 :138–156, 2013.
- [51] P. Nicolai, J-L. Feugeas, and GP. Schurtz. A practical nonlocal model for heat transport in magnetized laser plasmas. Physics of plasmas, 13(3), 2006.
- [52] Teddy Pichard, Graham W Alldredge, Stéphane Brull, Bruno Dubroca, and Martin Frank. An approximation of the m 2 closure : application to radiotherapy dose simulation. Journal of Scientific Computing, 71(1) :71–108, 2017.
- [53] Philip L Roe. Characteristic-based schemes for the euler equations. Annual review of fluid mechanics, 18(1) :337–365, 1986.
- [54] GP. Schurtz, P. Nicolai, and M. Busquet. A nonlocal electron conduction model for multidimensional radiation hydrodynamics codes. Physics of plasmas, 7(10) :4238–4249, 2000.
- [55] Wenjun Sun, Song Jiang, Kun Xu, and Shu Li. An asymptotic preserving unified gas kinetic scheme for frequency-dependent radiative transfer equations. Journal of Computational Physics, 302 :222–238, 2015.
- [56] Vladimir A. Titarev and Eleuterio F. Toro. Finite-volume weno schemes for three-dimensional conservation laws. Journal of Computational Physics, 201(1) :238–260, 2004.
- [57] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. II. monotonicity and conservation combined in a second-order scheme. Journal of Computational physics, 14(4) :361–370, 1974.
- [58] Tianbai Xiao, Kun Xu, and Qingdong Cai. A unified gas-kinetic scheme for multiscale and multicomponent flow transport. Applied Mathematics and Mechanics, 40(3) :355–372, 2019.

-
- [59] Kun Xu and Juan-Chen Huang. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. Journal of Computational Physics, 229(20) :7747–7764, 2010.
- [60] Yajun Zhu and Kun Xu. The first decade of unified gas kinetic scheme. arXiv preprint arXiv :2102.01261, 2021.

Annexes

A Coefficients d'intégration d'UGKS (Chapitres 3 et 4)

Les coefficients d'intégrations sont obtenus en intégrant en temps les différents éléments des reconstructions de la densité 3.11 et de la fonction de distribution 3.9 dans la formule de Duhamel (3.8). Chacun des termes des reconstructions donne lieu à un terme dans le flux et donc à un coefficient. Le calcul de ceux-ci est explicité. Tout d'abord, le coefficient associé à la partie constante de la reconstruction de la fonction de distribution (3.9) est

$$A = \frac{1}{\eta\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-\nu(t-t_n)} dt = \frac{1}{\eta\Delta t} \int_0^{\Delta t} e^{-\nu u} du = -\frac{1}{\eta} \frac{1 - e^w}{w}.$$

Celui associé à la partie affine est

$$B = \frac{1}{\eta\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} -\frac{1}{\eta}(t-t_n)e^{-\nu(t-t_n)} dt = \frac{\epsilon}{\sigma\eta\Delta t} \left[\Delta t e^w - \int_0^{\Delta t} e^{-\nu u} du \right] = \frac{\epsilon}{\sigma\eta} \left[e^w + \frac{1 - e^w}{w} \right].$$

Le coefficient associé à la partie constante de la reconstruction de la densité (3.11) est

$$C = \frac{\nu}{\eta\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{t_n}^t e^{-\nu(t-s)} ds dt = \frac{1}{\eta\Delta t} \int_0^{\Delta t} (1 - e^{-\nu u}) du = \frac{1}{\eta} \left[1 + \frac{1 - e^w}{w} \right].$$

Celui associé à la partie affine est

$$\begin{aligned} D &= \frac{\nu}{\eta\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{t_n}^t -\frac{1}{\eta}(t-s)e^{-\nu(t-s)} ds dt \\ &= \frac{1}{\eta^2\Delta t} \int_0^{\Delta t} \left[ue^{-\nu u} - \frac{1}{\nu}(1 - e^{-\nu u}) \right] du \\ &= \frac{\epsilon}{\sigma\eta} \left[1 + e^w + 2\frac{1 - e^w}{w} \right]. \end{aligned}$$

Le coefficient associé à la partie constante de la reconstruction modifiée de la densité (3.69) est

$$F = \frac{\nu}{\eta\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{t_n}^t e^{-\nu(s-t_n)} e^{-\nu(t-s)} ds dt = \frac{\nu}{\eta\Delta t} \int_0^{\Delta t} ue^{-\nu u} du = -\frac{1}{\eta} \left[e^w + \frac{1 - e^w}{w} \right].$$

Celui associé à la partie affine est

$$\begin{aligned} G &= \frac{\nu}{\eta\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{t_n}^t -\frac{1}{\eta}(t-s)e^{-\nu(s-t_n)} e^{-\nu(t-s)} ds dt \\ &= \frac{1}{2\eta^2\Delta t} \int_0^{\Delta t} u^2 e^{-\nu u} du \\ &= -\frac{\epsilon}{2\sigma\eta} \left[we^w - 2 \left(e^w + \frac{1 - e^w}{w} \right) \right]. \end{aligned}$$

B Demi-moments de la fonction de distribution M1 unidimensionnelle (chapitre 3)

Sous forme développée, les demi-moments à gauche et à droite de la fonction de distribution M1 sont

$$\begin{aligned}
\langle \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle &= \frac{e^{\alpha_i}}{2\beta_i} (e^{\beta_i} - 1), \\
\langle v \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle &= \frac{e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{\beta_i} \left(1 - \frac{1}{\beta_i} \right) + \frac{1}{\beta_i} \right), \\
\langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle &= \frac{e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{\beta_i} \left(1 - \frac{2}{\beta_i} + \frac{2}{\beta_i^2} \right) - \frac{2}{\beta_i^2} \right), \\
\langle v^3 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle &= \frac{e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{\beta_i} \left(1 - \frac{3}{\beta_i} + \frac{6}{\beta_i^2} - \frac{6}{\beta_i^3} \right) + \frac{6}{\beta_i^3} \right), \\
\langle v^4 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle &= \frac{e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{\beta_i} \left(1 - \frac{4}{\beta_i} + \frac{12}{\beta_i^2} - \frac{24}{\beta_i^3} + \frac{24}{\beta_i^4} \right) - \frac{24}{\beta_i^4} \right), \\
\langle \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle &= \frac{-e^{\alpha_i}}{2\beta_i} (e^{-\beta_i} - 1), \\
\langle v \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle &= \frac{e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{-\beta_i} \left(1 + \frac{1}{\beta_i} \right) - \frac{1}{\beta_i} \right), \\
\langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle &= \frac{-e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{-\beta_i} \left(1 + \frac{2}{\beta_i} + \frac{2}{\beta_i^2} \right) - \frac{2}{\beta_i^2} \right), \\
\langle v^3 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle &= \frac{e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{-\beta_i} \left(1 + \frac{3}{\beta_i} + \frac{6}{\beta_i^2} + \frac{6}{\beta_i^3} \right) - \frac{6}{\beta_i^3} \right), \\
\langle v^4 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle &= \frac{-e^{\alpha_i}}{2\beta_i} \left(e^{-\beta_i} \left(1 + \frac{4}{\beta_i} + \frac{12}{\beta_i^2} + \frac{24}{\beta_i^3} + \frac{24}{\beta_i^4} \right) - \frac{24}{\beta_i^4} \right).
\end{aligned}$$

C Flux d'UGKS-M1 d'ordre 2 pour le transport linéaire (chapitre 3)

Sous forme développée, les flux numérique d'ordre 2 d'UGKS-M1 sont

$$\begin{aligned}
\Phi_{i+1/2}^\rho &= A_{i+1/2} \left[\langle v \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle + \langle v \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \right] \\
&+ A_{i+1/2} \frac{\Delta x}{2} \left[\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_i^n) \delta \mathbf{U}_i^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \\ \langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \end{pmatrix} - \mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_{i+1}^n) \delta \mathbf{U}_{i+1}^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \\ \langle v^2 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \end{pmatrix} \right] \\
&+ B_{i+1/2} \left[\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_i^n) \delta \mathbf{U}_i^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \\ \langle v^3 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \end{pmatrix} + \mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_{i+1}^n) \delta \mathbf{U}_{i+1}^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v^2 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \\ \langle v^3 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \end{pmatrix} \right] \\
&+ \frac{D_{i+1/2}}{3\Delta x} (\rho_{i+1}^n - \rho_i^n),
\end{aligned} \tag{81a}$$

$$\begin{aligned}
\Phi_{i+1/2}^j &= A_{i+1/2} \left[\langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle + \langle v^2 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \right] \\
&+ A_{i+1/2} \frac{\Delta x}{2} \left[\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_i^n) \delta \mathbf{U}_i^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v^2 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \\ \langle v^3 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \end{pmatrix} - \mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_{i+1}^n) \delta \mathbf{U}_{i+1}^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v^2 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \\ \langle v^3 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \end{pmatrix} \right] \\
&+ B_{i+1/2} \left[\mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_i^n) \delta \mathbf{U}_i^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v^3 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \\ \langle v^4 \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle \end{pmatrix} + \mathbf{J}_\Lambda(\mathbf{U}_{i+1}^n) \delta \mathbf{U}_{i+1}^n \cdot \begin{pmatrix} \langle v^3 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \\ \langle v^4 \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \end{pmatrix} \right] \\
&+ \frac{C_{i+1/2}}{3} \left[\langle \hat{f}_i^n \mathbb{1}_{v>0} \rangle + \langle \hat{f}_{i+1}^n \mathbb{1}_{v<0} \rangle \right].
\end{aligned} \tag{81b}$$

D Moments de la Maxwellienne (chapitres 1 et 4)

La Maxwellienne est définie par :

$$M[f](v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right).$$

Tout d'abord, montrons que cette distribution a bien pour moments \mathbf{W} . La densité de la Maxwellienne est :

$$\begin{aligned} \langle\langle M[f] \rangle\rangle &= \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} \int_{\mathcal{S}^2} \int_0^{+\infty} \exp\left(-\frac{v^2}{2T}\right) v^2 dv d\Omega \\ &= \frac{2\rho}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} u^2 e^{-u^2} du \\ &= \frac{\rho}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} e^{-u^2} du \\ &= \rho, \end{aligned}$$

et l'énergie est :

$$\begin{aligned} \left\langle\left\langle \frac{1}{2} v^2 M[f] \right\rangle\right\rangle &= \frac{2\rho T}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} u^4 e^{-u^2} du \\ &= \frac{2q}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} u^2 e^{-u^2} du \\ &= q. \end{aligned}$$

Pour exprimer les flux de diffusion, il est nécessaire de calculer les deux moments pairs suivants :

$$\begin{aligned} \langle\langle v^4 M[f] \rangle\rangle &= \frac{8\rho T^2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} u^6 e^{-u^2} du = 15\rho T^2, \\ \langle\langle v^6 M[f] \rangle\rangle &= \frac{16\rho T^3}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} u^8 e^{-u^2} du = 105\rho T^3. \end{aligned}$$

Pour les conditions aux limites, deux moments impairs (associés à des flux) doivent être calculés :

$$\begin{aligned} \langle\langle v M[f] \rangle\rangle &= 2\rho \sqrt{\frac{2T}{\pi}} \int_0^{+\infty} u^3 e^{-u^2} du = \rho \sqrt{\frac{2T}{\pi}}, \\ \left\langle\left\langle \frac{1}{2} v^3 M[f] \right\rangle\right\rangle &= 2\rho T \sqrt{\frac{2T}{\pi}} \int_0^{+\infty} u^5 e^{-u^2} du = 2\rho T \sqrt{\frac{2T}{\pi}}. \end{aligned}$$

E Moments de la fonction de distribution M1 sur la sphère (chapitres 1 et 4)

La fonction de distribution M1 sur la sphère s'écrit sous la forme :

$$\forall \mathbf{\Omega} \in \mathcal{S}^2, \hat{f}(\mathbf{\Omega}) = e^{\alpha + \beta \cdot \mathbf{\Omega}},$$

où $(\alpha, \beta) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^4$ sont les variables entropiques et $\mathbf{\Omega}$ est un vecteur sur la sphère qui est dans le système des coordonnées sphériques :

$$\mathbf{\Omega} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi \\ \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi \\ \mu \end{pmatrix}, \text{ where } \begin{cases} \varphi \in [0, 2\pi], \\ \mu \in [-1, 1]. \end{cases}$$

Soit $\mathbf{R} \in M_3(\mathbb{R})$ une matrice de rotation telle que $\mathbf{R}\boldsymbol{\beta} = \|\boldsymbol{\beta}\|\mathbf{e}_z$. Les moments de la fonction de distribution M1 peuvent être calculés en utilisant le changement de variable $\boldsymbol{\Omega}' = \mathbf{R}\boldsymbol{\Omega}$. Le premier moment $\mathbf{f}^{(0)}$ est

$$f_0 = \int_{\mathbb{S}^2} e^{\alpha + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}} d\boldsymbol{\Omega} = 2\pi e^\alpha \int_{-1}^1 e^{|\boldsymbol{\beta}|\mu} d\mu = 4\pi e^\alpha \frac{\sinh \|\boldsymbol{\beta}\|}{\|\boldsymbol{\beta}\|}.$$

Cette première expression permet d'éliminer la première variable entropique α . Le deuxième moment $\mathbf{f}^{(1)}$ est

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_1 &= \int_{\mathbb{S}^2} \boldsymbol{\Omega} e^{\alpha + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}} d\boldsymbol{\Omega}, \\ &= 2\pi e^\alpha \int_{-1}^1 \mu e^{|\boldsymbol{\beta}|\mu} d\mu \mathbf{R}^T \mathbf{e}_z, \\ &= 4\pi e^\alpha \frac{\sinh \|\boldsymbol{\beta}\|}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \left(\coth \|\boldsymbol{\beta}\| - \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \right) \frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|}, \\ &= f_0 u \frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|}, \end{aligned} \tag{82}$$

où $u = \coth \|\boldsymbol{\beta}\| - \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}\|}$. Cette deuxième expression permet d'exprimer la variable d'anisotropie $\boldsymbol{\beta}$ en fonction de $\mathbf{U} = (f^{(0)} \quad \mathbf{f}^{(1)})^T$. Le troisième moment $\mathbf{f}^{(2)}$ fournit la fermeture de la hiérarchie et vaut :

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_2 &= \int_{\mathbb{S}^2} \boldsymbol{\Omega} \otimes \boldsymbol{\Omega} e^{\alpha + \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}} d\boldsymbol{\Omega}, \\ &= 2\pi e^\alpha \int_{-1}^1 \mathbf{R}^T \left(\frac{1 - \mu^2}{2} \mathbf{I}_3 + \frac{3\mu^2 - 1}{2} \mathbf{e}_z \otimes \mathbf{e}_z \right) \mathbf{R} e^{|\boldsymbol{\beta}|\mu} d\mu, \\ &= f_0 \frac{u}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \mathbf{I}_3 + f_0 \left(1 - 3 \frac{u}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \right) \frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|} \otimes \frac{\boldsymbol{\beta}}{\|\boldsymbol{\beta}\|}. \end{aligned} \tag{83}$$

F Demi-moments de la fonction de distribution M1 sur la sphère (chapitre 4)

Soient $\beta_{xy} = \sqrt{\beta_x^2 + \beta_y^2}$, $\mu_{xy} = \beta_{xy} \sqrt{1 - \mu^2}$ et I_n la fonction de Bessel modifiée de première espèce :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \forall x \in \mathbb{R}_+, I_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\phi) e^{x \cos \phi} d\phi. \tag{84}$$

Les expressions sous la forme d'intégrales unidimensionnelles des demi-moments de la fonction de distribution M1, nécessaires au calcul des flux d'ordre 2 d'UGKS-M1 sont (pour $k \geq 0$ et des demi-moments positifs) :

$$\begin{aligned} \left\langle \Omega_z^k e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \right\rangle &= 2\pi \int_0^1 \mu^k e^{\beta_z \mu} I_0(\mu_{xy}) d\mu, \\ \left\langle \Omega_z^k \Omega_x \Omega_y e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \right\rangle &= \pi \int_0^1 \mu^k (1 - \mu^2) e^{\beta_z \mu} \sin 2\phi_0 I_2(\mu_{xy}) d\mu, \\ \left\langle \Omega_z^k \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \end{pmatrix} e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \right\rangle &= 2\pi \int_0^1 \mu^k \sqrt{1 - \mu^2} e^{\beta_z \mu} \begin{pmatrix} \cos \phi_0 \\ \sin \phi_0 \end{pmatrix} I_1(\mu_{xy}) d\mu, \\ \left\langle \Omega_z^k \begin{pmatrix} \Omega_x^2 \\ \Omega_y^2 \end{pmatrix} e^{\boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\Omega}} \mathbb{1}_{\Omega_z \geq 0} \right\rangle &= \pi \int_0^1 \mu^k (1 - \mu^2) e^{\beta_z \mu} \left(I_0(\mu_{xy}) + \begin{pmatrix} \cos 2\phi_0 \\ -\cos 2\phi_0 \end{pmatrix} I_2(\mu_{xy}) \right) d\mu, \end{aligned}$$

où $\phi_0 = \arctan \frac{\beta_y}{\beta_x} - (1 - \text{sgn } \beta_x) \frac{\pi}{2}$.

G Flux d'UGKS-M1 d'ordre 2 pour le transport électronique (chapitre 4)

Les flux mésoscopiques d'UGKS-M1 d'ordre 2 sont

$$\begin{aligned}\chi_{i+1/2,j}^0(v) = & A_{i+1/2,j}^n v \left\langle \Omega_x \hat{f}_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \Omega_x \hat{f}_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \\ & + B_{i+1/2}^n v^2 \left\langle \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \\ & + \frac{D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} v^2 \mathbf{K}_0 \left(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n \right) \left(\mathbf{W}_{i+1,j}^n - \mathbf{W}_{i,j}^n \right) \cdot \Psi(v),\end{aligned}\tag{85a}$$

$$\begin{aligned}\chi_{i+1/2,j}^1(v) = & A_{i+1/2,j}^n v \left\langle \Omega_x \Omega \hat{f}_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \Omega_x \Omega \hat{f}_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \\ & + B_{i+1/2}^n v^2 \left\langle \Omega_x^2 \Omega \delta_x \hat{f}_{i,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + \Omega_x^2 \Omega \delta_x \hat{f}_{i+1,j}^n \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \\ & + \frac{C_{i+1/2,j}^n}{3} v M_0[\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n] \mathbf{e}_x \\ & - \frac{D_{i+1/2,j}^n}{4\Delta x} v^2 \mathbf{K}_0 \left(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n \right) \left(\mathbf{W}_{i+1,j}^n - 2\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n + \mathbf{W}_{i,j}^n \right) \cdot \Psi(v) \mathbf{e}_x \\ & + \frac{E_{i+1/2,j}^n}{3\Delta t} v \mathbf{K}_0 \left(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^n \right) \left(\mathbf{W}_{i+1/2,j}^{n+1} - \mathbf{W}_{i+1/2,j}^n \right) \cdot \Psi \mathbf{e}_x,\end{aligned}\tag{85b}$$

et les flux macroscopiques sont

$$\begin{aligned}\Phi_{i+1/2,j}^\rho = & A_{i+1/2,j}^n \left\langle \left\langle v \Omega_x \hat{f}_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v \Omega_x \hat{f}_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ & + B_{i+1/2}^n \left\langle \left\langle v^2 \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_{i,j}^n) \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^2 \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_{i+1,j}^n) \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ & + \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} (q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n),\end{aligned}\tag{86a}$$

$$\begin{aligned}\Phi_{i+1/2,j}^q = & \frac{A_{i+1/2,j}^n}{2} \left\langle \left\langle v^3 \Omega_x \hat{f}_{i,j}^{n(+)} \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^3 \Omega_x \hat{f}_{i+1,j}^{n(-)} \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ & + \frac{B_{i+1/2,j}^n}{2} \left\langle \left\langle v^4 \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_{i,j}^n) \mathbb{1}_{\Omega_x > 0} + v^4 \Omega_x^2 \delta_x \hat{f}(\mathbf{U}_{i+1,j}^n) \mathbb{1}_{\Omega_x < 0} \right\rangle \right\rangle \\ & + \frac{2D_{i+1/2,j}^n}{3\Delta x} \frac{5(q_{i+1/2,j}^n)^2}{3\rho_{i+1/2,j}^n} \left(-\frac{\rho_{i+1,j}^n - \rho_{i,j}^n}{\rho_{i+1/2,j}^n} + 2\frac{q_{i+1,j}^n - q_{i,j}^n}{q_{i+1/2,j}^n} \right),\end{aligned}\tag{86b}$$

où $\hat{f}_{i,j}^{n(\pm)} = \hat{f}_{i,j}^n \pm \frac{\Delta x}{2} \delta_x \hat{f}_{i,j}^n$.