



HAL
open science

Modélisation autour de l'équation de Boltzmann

Jacques Schneider

► **To cite this version:**

Jacques Schneider. Modélisation autour de l'équation de Boltzmann. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. École doctorale Mer et Sciences de Toulon - E.D. n • 548, 2015. tel-01338768v2

HAL Id: tel-01338768

<https://univ-tln.hal.science/tel-01338768v2>

Submitted on 12 Jul 2016

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.

Copyright

UNIVERSITÉ DE TOULON

Année 2015

N° attribué par la bibliothèque :

HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Discipline : *Mathématiques Appliquées*

École doctorale Mer et Sciences de Toulon - E.D. n° 548

présentée et soutenue publiquement par

Jacques SCHNEIDER

le mardi 14 avril 2015

Titre :

MODELISATION AUTOUR DE L'EQUATION DE
BOLTZMANN.

JURY :

M. Yves DUBROCA, Chercheur, *CEA et Bordeaux INP*

M. Pierre CHARRIER, Professeur émérite *Bordeaux INP*

M. Laurent DESVILLETES, Professeur, *Ecole Normale Supérieure
de Cachan*

M. Cédric GALUSINSKI, Professeur, *Université de Toulon*

M. Vincent GIOVANGIGLI (rapporteur), Directeur de Recherche au
CNRS, *Ecole Polytechnique*,

M. Lorenzo PARESCHI (rapporteur), Professeur, *Université de Ferrare*

M. Benoit PERTHAME (rapporteur), Professeur, *Université Pierre et
Marie Curie*

Remerciements

Il m'a semblé important de réunir un jury composé de personnes qui partagent un point de vue commun sur la recherche. "*Extraire la substantifique moëlle*" (Rabelais), inventer, faire avancer les choses.

Il s'en est fallu de peu pour que j'atterrisse à Bordeaux comme jeune maître de conférence. J'aurais alors eu le plaisir de débiter au côté de Pierre Charrier, apprendre de lui et chercher ensemble. C'est donc pour moi un immense honneur que de le voir à cette place de président du jury.

Vincent Giovangigli a eu la gentillesse de me révéler quelques mystères de la chimie et de m'aider à résoudre des problèmes épineux. Je le remercie d'être en plus rapporteur de ce manuscrit.

Benoît Perthame, rapporteur de cette habilitation, n'a pas hésité à dire oui pour participer à ce jury. Il faisait d'ailleurs déjà partie de mon jury de thèse. Je suis très heureux qu'il soit présent en ce grand jour.

J'ai rencontré Lorenzo Pareschi en 2000 lors d'une conférence sur les méthodes Monté-Carlo alors que nous présentions des méthodes déterministes ! Sa connaissance sur le sujet en fait un membre tout désigné pour ce jury auquel il a accepté de participer. Il est par ailleurs rapporteur de ce mémoire et je lui adresse ma gratitude.

Jeune doctorant, j'assistais et participais à un bouillonnant séminaire sur les équations cinétiques. Le dynamisme de Laurent Desvilletes en était un ingrédient précieux. C'est un plaisir qu'il vienne assister aujourd'hui à "mon" séminaire.

J'ai rencontré Yves Dubroca au cours de mes pérégrinations scientifiques. En plus d'être un brillant chercheur, c'est un homme chaleureux et prompt à rire. L'occasion est aujourd'hui plus solennelle mais je salue l'homme dans son ensemble.

Finalement, j'ai demandé à Cédric Galusinski, membre très actif et sympathique de notre laboratoire, de se joindre à ce jury. Il a accepté sans hésiter malgré nos différences de thématiques scientifiques. Merci pour cet effort et pour sa présence.

Je tiens à redire combien François Rogier, mon co-directeur de thèse, a compté dans mon esprit et ma façon de penser jusqu'à aujourd'hui. Son approche scientifique, sa personnalité et sa capacité à propulser l'autre vers l'avant sont des points de repaire très importants pour moi.

J'ai par la suite rencontré Sasha Bobylev et par son intermédiaire et

celui d'internet Andrzej Palczewski. Notre premier résultat est tombé avant que je connaisse Andrzej de visu. On était en 1994 et c'était pour le moins déconcertant. Je remercie ces aînés tant pour le plaisir du travail en commun que pour la richesse de notre rencontre.

Presque huit ans se sont écoulés après mes derniers travaux avec Andrzej avant que je ne rencontre mes futurs collaborateurs. Cette fois-ci, c'était moi l'aîné. Ce fut dans un premier Stéphane Brull qui par sa joie de vivre m'a redonné des couleurs. Je lui dis merci pour ces séances de travail parfois hilarantes et pourtant fructueuses. Peu après, j'ai rencontré Vincent Pavan avec qui je continue de travailler. Je lui adresse tout d'abord mon amitié. Vincent est par ailleurs un chercheur hors pair à qui je souhaite le meilleur.

Je ne pouvais pas terminer ces remerciements sans évoquer notre petite équipe d'enseignants chercheurs très chaleureuse : Frédéric, Mehmet, Lyuda, et les autres.

Table des matières

1	Introduction.	9
1.0.1	Le plan	15
2	Modèles à répartition discrètes des vitesses	17
2.1	Petit tour d’horizon	17
2.2	D’une méthode particulière à un modèle à répartition discrète des vitesses [38]	20
2.3	Formules d’intégration polaires [99, 96, 81]	22
2.3.1	Cas de la dimension 2 [99, 96]	23
2.3.2	Cas de la dimension 3 [99, 81]	25
2.4	Consistance du modèle de Goldstein & al [94]	27
3	Approximation entropique et premiers modèles BGK [104]	33
3.1	Problème de réalisabilité et approximation entropique .	34
3.2	Modèles BGK généralisés	37
4	La méthode de relaxation des moments	43
4.1	Une nouvelle approche du modèle ESBGK [25] [26] . .	45
4.2	Modèle de Fick pour un mélange de gaz [22]	49
4.2.1	Notations et équation(s) de Boltzmann	49
4.2.2	Sur le lien entre Boltzmann et Onsager	51
4.2.3	Construction de l’opérateur de Fick	53
4.2.4	Réalisabilité et définition de $\mathcal{R}((f))$	55
4.3	Propriétés de l’opérateur et limite hydrodynamique . .	56
4.3.1	Erratum	57

5	Gaz polyatomiques avec réactions chimiques "lentes"	61
5.1	Un cas simplifié [27]	61
5.2	Un modèle pour la simulation de mélanges de gaz polyatomiques raréfiés avec réactions chimiques [103]	62
6	Conclusion	77

Avant propos

Le présent travail est entièrement dédié à la construction de modèles simplifiant l'opérateur de collision de Boltzmann. On pourrait trouver cette thématique très réductrice et pourtant...Les travaux de Ludwig Boltzmann portent sur l'introduction d'une description cinétique des gaz, même si cette idée peut être largement co-attribuée à James Clerk Maxwell et aux thermodynamiciens de cette époque. Mais ils s'étendent aussi et surtout à leur évolution en dehors de l'équilibre [19]. Si le terme de transport de son équation est relativement naturel eût égard aux équations du mouvement avec forces extérieures, le comptage des collisions contribuant qui à diminuer la densité du nombre de molécules ayant la vitesse \mathbf{v} pour t et \mathbf{x} fixés, qui à l'augmenter, est d'une grande beauté géométrique. Et le passage de la micro-réversibilité à la "flèche" du temps (théorème H) est révolutionnaire. La relative simplicité de la démonstration fascine. Pourtant, Boltzmann lui-même déclara tandis qu'il cherchait des développements pour obtenir des solutions à son équation : "la simplicité sied au tailleur, pas au mathématicien". Il est vrai que bon nombre de travaux qui suivirent, dont la hiérarchie BBGKY et le théorème d'existence global en temps de solutions, peuvent lui donner raison. Mais reste son oeuvre immense. Bon nombre d'équations cinétiques suivront telles celles de Fokker-Planck, Landau, Vlasov ou même Uehling-Uhlenbeck pour ne citer qu'elles. Ces équations n'auraient peut-être pas vu le jour sans son travail. Le point de vue cinétique permet d'appréhender bon nombre de problèmes issus de la physique. "Sasha" Bobylev m'a dit un jour : "Jâcques, à partir du moment où tu as commencé avec l'équation de Boltzmann, tu ne pourras jamais la quitter". En ce qui me concerne, il a eut raison !

Chapitre 1

Introduction.

1990. L'Europe possède sa propre fusée, Ariane, mais voudrait aussi se doter d'une navette (projet Hermes). Des fonds sont débloqués de toute part, notamment pour la recherche en amont. Les progrès sur la simulation des rentrées atmosphériques dues à l'algorithme de Bird (1963) se heurtent aux limites des méthodes DSMC. Des résultats bruités et un coût grandissant quand le nombre de Knudsen diminue. Bien que la méthode soit loin d'être enterrée (elle est toujours d'actualité), on s'interroge sur la faisabilité d'un traitement déterministe. Il est clair que cette perspective ne va pas sans la montée en puissance des super-calculateurs. Le Cray, monolithe mystérieux et les ordinateurs parallèles. L'Onera dispose des deux et vient d'acquérir l'Hypercube à 128 processeurs. Il est clairement affiché que la thèse que je viens de commencer sur la construction d'une méthode déterministe pour la résolution de l'équation de Boltzmann relève autant d'un défi mathématique que de la capacité informatique à gérer un problème en dimension 7 avec le calcul d'une intégrale dans $\mathbb{R}^3 \times S^2$. Quoiqu'il en soit, de méthodes déterministes, il n'en existe pas, au sens où une consistance aurait été prouvée. Nous attaquons le problème avec François Rogier sur la base d'une méthode particulière. Bien vite s'impose la nécessité d'utiliser une grille fixe en vitesse, sorte d'invariance Galiléenne discrete. En cela, nous ne faisons que marcher sur les pas de Tchermisina (1969!) [34] et retrouvons assez naturellement la méthode de Goldstein, Sturtevant et Broadwell [53] [55]. Dominique Bernardi (Paris 6) me dit que celle-ci a peu de chance de converger en dimension 2 en se référant à un résultat de Gauss portant sur les résultats de l'équation Diophantienne $p^2 + q^2 = n$ pour n (entier) quelconque [62].

Quand à la dimension 3, nous sommes loin d'être en mesure de prouver quelque chose. C'est finalement en cassant la structure de l'intégrale sur les cercles de collision que se profile l'idée de n'intégrer que sur des droites à pente rationnelle. Les suites de Farey et les arcs qui y sont associés permettront d'obtenir une formule consistante en dimension 2 de vitesse [99] [96]. La généralisation aux dimensions supérieures se fera avec l'aide de Philippe Michel [99] [81]. Il se trouve par ailleurs que l'utilisation d'une grille fixe entre dans la catégorie des modèles à répartition discrète (MDV) des vitesses introduite par Carleman en 1932 [30] [31] et suivi, entre autres, par Broadwell [23], Cabannes [29] et Gatignol [51]. Les propriétés de ces modèles sont identiques à celles de l'équation de Boltzmann et nous prouvons que sous certaines conditions les seuls invariants sont bien ceux escomptés. Lors d'une rencontre avec Alexander Bobylev, nous décidons de nous attaquer à la consistante de la formule de Goldstein *et al* en dimension 3. Se joindra à nous Andrzej Palczewski. Nous partons tout d'abord sur la base de résultats de théorie ergodique dues à Linnik [74] qui s'avèrent ne pas traiter tous les cas de l'équation $p^2 + q^2 + r^2 = n$ quand n varie. Philippe Michel avait mentionné durant ma thèse des résultats obtenus sur les coefficients des formes modulaires [98] et relatifs à ce problème. C'est en suivant cette piste que nous obtenons le résultat voulu [94]. La convergence de la méthode vers les solutions renormalisées de Di Perna et Lions [43] sera faite plus tard par Mischler [84] en supposant qu'une hypothèse très forte (mais au sens faible!) est satisfaite par la formule de quadrature. Cette hypothèse est justement une conséquence immédiate du résultat que nous venons d'obtenir et est aussi vérifiée par la formule de Farey. De notre côté, nous prouvons avec Andrzej Palczewski un résultat d'existence, de stabilité et de convergence dans le cadre homogène [93]. A noter que la consistance de la formule de Goldstein *et al* en dimension 2 sera prouvée par Fainzilber, Kurlberg et Wennberg en 2006 [49]. Pour finir le tableau, Panferov et Heintz établissons en 2002 [92] une formule de quadrature qui, de par la simplicité de sa consistance, est absolument remarquable. Seulement voilà, quelle que soit la formule utilisée, le coût du calcul approché de $Q(f, f)$ est en $N^2 \log N$ où N est un nombre fini de vitesses (on a pris soin au préalable de tronquer l'espace des vitesses). Buet [28] attaque le problème du coût [28] en proposant une sorte de splitting sur l'étape collisionnelle (la solution pour une collision donnée est explicite). Nous tentons de

notre côté une approche type Galerkin discontinue dans l'espace des vitesses en supposant que la solution est polynomiale par maille [101]. La méthode se révèle instable car elle ne garantit pas la positivité de la fonction de distribution. Elle ne donnera donc pas lieu à publication. Nous en resterons donc là pour la partie "modèles à répartition discrète des vitesses" tout en n'oubliant pas de citer les travaux récents de Mouhot, Pareschi et Rey [88] inspirés des méthodes spectrales [87] et ramenant le coût du calcul par formule de quadrature à $O(\tilde{N}N \log_2 N)$ avec $\tilde{N} \ll N$.

En marge de ce travail, il m'a été proposé de réaliser une étude sur un couplage Boltzmann/Euler dans le cadre de mon postdoc à Kaiserslautern [100] (partenariat avec Dassault Aviation). Même si les méthodes DSMC sont les moins chères pour simuler les gaz raréfiés, il n'en reste pas moins que résoudre les équations de la mécanique des fluides nécessite bien moins de ressources informatiques. L'idée consiste alors à coupler ces équations. La résolution la plus fine (Boltzmann) étant réservée aux zones de forts déséquilibres thermodynamiques. Il s'agissait ici d'effectuer un couplage Euler-Boltzmann, d'établir des conditions limites à la frontière des différents domaines et d'améliorer l'approche de Lukschin & al [76] basée sur l'algorithme de Schwarz. On montre numériquement qu'il suffit de résoudre successivement chaque étape pendant un pas de temps pour arriver à l'équilibre. Le schéma de Van Leer utilisé pour résoudre les équations d'Euler "absorbe" très bien les fluctuations dues au traitement probabiliste de la zone hors équilibre. Les conditions limites sont basées sur l'étude des caractéristiques à la frontière [78]. S'il est clair que ce travail n'est pas d'une grande originalité, il a le mérite de montrer qu'il n'est peut-être pas nécessaire de se poser trop de questions sur les conditions limites et que la recherche dans ce domaine doit plutôt être axée sur la détection des domaines respectifs à chaque équation. Ce qui sera fait par un grand nombre d'auteurs (voir l'article de Dimarco et Pareschi [44] pour une bibliographie assez large).

Au premier CEMRACS de 1996, Frédéric Coquel propose un sujet sur les schémas pour les solutions d'équations hyperboliques. Il s'agit de substituer au critère TVD la diminution de l'entropie tout en restant à l'ordre 2. Un des buts non avoués et de constituer une première étape vers l'existence de solutions faibles entropiques pour les systèmes d'équations hyperboliques. Il s'avérera finalement que c'est pour des

données BV suffisamment petites que Bressan *et al* [20] prouveront de tels résultats. Ceci pour dire que c'est en quelque sorte le premier critère qui a remporté la palme même si la démonstration ne s'appuyait pas sur la convergence de tels schémas vers ces solutions. Bref, le programme que propose Coquel est celui de la construction d'une projection entropique d'ordre 2 dans le cadre du schéma de Godunov. On supposera au préalable qu'un schéma entropique permet de résoudre le système pendant un pas de temps Δt avec données initiales linéaires par mailles sur les variables conservatives. De telles projections existent déjà pour les lois de conservation scalaires [10] et pour les systèmes 2×2 [35]. Il nous faut donc construire des inégalités de Bessel portant sur des fonctions linéaires par morceaux. Le point d'attaque sera cinétique et on tentera d'utiliser certains des résultats récents de Levermore [71]. Coquel me laisse mijoter devant cette avalanche de données dans une chapelle désaffectée du CIRM. Je n'aurais point de révélations. La solution viendra bien plus tard en oubliant le cinétique et en construisant des projections successives [36]. Quoi qu'il en soit, l'article de (chevet) de Levermore deviendra une source d'inspiration...

Nous allons opérer un tournant dans notre vision du problème en cherchant des opérateurs de la forme du modèle BGK classique [16] mais voulant approcher au plus près $Q(f, f)$. Ce qui nous intéresse dans l'article de Levermore n'est pas la hiérarchie de modèles BGK ni même l'idée principale de modèles aux moments mais la nature même de la "projection" d'une certaine fonction de répartition $g \rightarrow G(v) = \exp(m(v))$ obtenue par minimisation de l'entropie sous contraintes d'égalité d'un certain nombre de moments. Si le modèle BGK peut être regardé comme l'expression naturelle de la relaxation de f vers un état d'équilibre local, la similitude visuelle entre $R(f) = \nu(G - f)$ et $Q(f, f) = Q^+(f, f) - \nu(f)f$ suggère autre chose. Ne pourrait-on pas considérer G comme une "approximation entropique" de $Q^+(f, f)$ sous contraintes d'égalité de moments. Le modèle BGK ne serait alors que le premier modèle d'une hiérarchie infinie de modèles construits à partir d'espaces de moments. D'un autre côté, les travaux de Mieussens sur l'aspect technique de la résolution des modèles BGK [16] et ESBGK [77] par des modèles à répartition discrète des vitesses semblent aller dans le même sens. Le modèle BGK, bien qu'étant peu fiable dans les zones de fort gradients, a pourtant eu son heure de gloire [91] et Mieussens remet un pied à l'étrier en proposant une méthode implicite en temps, effi-

cace et robuste. Certes des limitations persistent quand à l'usage d'une grille de vitesses fixe, et en terme de mémoire, et lorsqu'apparaissent de fortes variations de vitesse moyenne et/où de température, mais l'espoir est là (ces problèmes sont maintenant en passe d'être résolus [11] [17]). L'article publié dans M2AN [104] est l'expression de ces deux mouvements : $Q^+(f, f) \rightarrow \exp(m(\mathbf{v}))$ et la faisabilité. Seulement voilà, il y a le problème de réalisabilité du problème de minimisation de l'entropie sous contraintes d'égalité de moments que Junk a remarquablement débusqué, étudié et dont il catégorise la validité [67]. Son article fait le tour complet de la question au moyen notamment de perturbations autour des moments des exponentielles. Nous revisitons ce problème sous un autre angle en relaxant la contrainte portant sur le moment d'ordre supérieur et obtenons un résultat "positif" au regard de celui de Junk même si les deux sont peut-être équivalents (voir discussion après le théorème 3.1.7. Nous généraliserons plus tard cette preuve au cas relativiste [102] en modifiant quelques aspects techniques. A noter qu'une dernière approche du problème par analyse convexe a été réalisé par Vincent Pavan [95]. Au passage, nous analysons la nature des systèmes aux moments de Levermore. La viabilité de ces systèmes reposent sur un argument de dualité entre les moments ρ des fonctions positives et non nulles dans L^1 à poids (i.e dont les moments sont bornés) et les coefficients α des polynômes dont l'exponentielle est intégrable. Cette dualité est clairement mise en défaut dans les cas de non réalisabilité. Hauck, Levermore et Tits [63] concluront plus tard que l'ensemble des moments pour lequel ces systèmes sont mal posés est de mesure nulle. Le cas des molécules non Maxwelliennes ne permet pas a priori de construire des modèles comme ci-dessus. En remarquant que les moments de la fonction de distribution qui sont orthogonaux aux invariants de collisions s'annulent quand $t \rightarrow +\infty$ dans l'équation de Boltzmann homogène, nous proposons une autre construction : imposer des contraintes de relaxation sur certains de ces moments et en déduire G par minimisation de l'entropie sous contraintes (conservations et relaxations). Cette idée est aussi issue de l'étude du spectre de l'opérateur linéarisé pour les molécules Maxwelliennes [112]. Nous étudions alors avec Stéphane Brull le cas du premier ensemble non trivial $[1, \mathbf{v}, |\mathbf{v}|^2, \mathbf{v} \otimes \mathbf{v} - \frac{1}{3}|\mathbf{v}|^2 Id]$ et retrouvons le modèle ESBGK [25]. Il s'agit d'ajuster le coefficient de relaxation et la fréquence de relaxation de f vers G de telle sorte que la limite hydrodynamique (Navier-Stokes)

de notre modèle coïncide avec celle de l'équation de Boltzmann. Ce travail est par la suite étendu [26] au cas des molécules polyatomiques [5]. Cette nouvelle interprétation de modèles déjà existants va devenir "a veritable machinery" (dixit Levermore). Construire des modèles sur les principes déjà énoncés par identification avec la limite hydrodynamique. Nous nous attaquons avec Stéphane Brull et Vincent Pavan aux mélanges de gaz qui, en plus des comportements "connus" des gaz simples, échangent de la quantité de mouvement, de l'énergie, etc. Les modèles BGK existants prennent souvent ces échanges en compte [54] [79] [1] (voir [22] pour une littérature plus large) mais le développement de Chapman-Enskog, quand il est effectué, est un "exercice" final [1]. Il s'agit donc pour nous de partir de la limite hydrodynamique est de laisser "dérouler" notre programme. Seulement voilà, si l'écriture de Navier-Stokes est unique lorsqu'il s'agit d'un seul gaz, il n'en est rien dans le cas des mélanges. Les lois observées et décrites par les physiciens Fick, Soret, Dufour et Fourier donnent lieu à une première formulation. Une autre formulation (que nous ne découvrirons qu'après cet article) fait intervenir d'autres grandeurs physiques : les pressions partielles, les enthalpies, etc [61]. Enfin, il y a l'obtention des équations de Navier-Stokes par la thermodynamique des processus irréversibles (TIP) ou les flux s'expriment entre autres au moyen des potentiels chimiques (ou fonctions de Gibbs) [80] [39]. La formulation dont nous avons besoin est unique. Elle se profile sur deux niveaux différents : les propriétés de l'opérateur de collision linéarisé et les lois de Onsager (matrice de coefficients symétrique négative - ou positive si l'on part de la TIP). Nous identifions dans un premier temps la bonne formulation, réécrivons le lien entre l'équation de Boltzmann et la matrice de Onsager, traduisons le langage des coefficients et moments de relaxation dans un cadre plus général pour finalement obtenir un modèle entropique basé sur la connaissance de la loi de Fick [22].

Toujours dans le cadre des gaz raréfiés, nous décidons avec Stéphane Brull de nous attaquer au cas d'une chimie lente. C'est à dire quand les temps caractéristiques de relaxation des énergies internes vers l'équilibre (statistique de Boltzmann) et des collisions sont au moins d'un ordre supérieurs à ceux des temps entre collisions chimiques. Nous nous attaquons à un cas simplifié : une collision bi-moléculaire avec une énergie interne par molécule. L'idée est relativement simple : additionner au modèle ci-dessus un terme chimique entropique basé sur les modèles

BGK de Spiga & al. La difficulté principale est le calcul de la perturbation du terme source chimique à l'ordre ε dans le développement de Chapman-Enskog [27]. Il s'agira en quelque sorte d'un galop d'essai. Un projet plus ambitieux est de construire un modèle simplifié et calculable au sens de la simulation numérique pour un mélange de gaz polyatomiques avec plusieurs réactions. Nous attaquons le problème dans une approche semi-classique. L'idée du splitting non-réactif/réactif reste la même et la modélisation des collisions non réactives est dans la continuité des travaux ci-dessus. La grande difficulté réside dans la construction d'un modèle chimique qui soit à la fois bien posé (notamment entropique) et donne des taux de production chimiques réalistes. Le problème sera résolu en exploitant d'une part la dynamique des réactions chimiques à l'équilibre thermodynamique et d'autre part le célèbre second principe de la thermodynamique. L'introduction ainsi que l'étude complète de ce modèle (généralisation du modèle de Fick, caractérisation des taux de production d'entropie nul, limite hydrodynamique,...) sont réalisés dans un article à paraître [103].

1.0.1 Le plan

La présentation des articles qui vont suivre est le reflet d'un cheminement. Le parti pris est de développer des modèles bien posés au sens mathématique et physique du terme mais aussi calculables. Certaines démonstrations apparaîtront donc sous forme simplifiée pour mettre en avant le premier point. La faisabilité est considérée, elle, comme faisant partie de l'équation. Un domaine particulier est celui des données disponibles pour la construction des modèles. Nous n'entrons pas dans ce domaine mais faisons en sorte d'exploiter les résultats disponibles.

Au chapitre deux, on montre comment en cherchant un schéma numérique déterministe pour résoudre l'équation de Boltzmann nous sommes tombés naturellement dans la catégorie bien connue des modèles à répartition discrète des vitesses (MDV). Nous exhiberons en premier lieu une formule de quadrature consistante avec l'intégrale de collision en dimension deux et trois en vitesse [99, 96, 81]. Si ce travail de thèse est évoqué à nouveau dans ce manuscrit, c'est qu'il est un pilier fondateur et qu'il constitue l'essentielle motivation des travaux qui suivront dans ce chapitre. La deuxième partie sera donc consacrée à l'étude de la consistance d'une formule similaire : celle de Goldstein & al [53, 55]. Ne seront pas décrits les résultats d'existence, de stabilité

et de convergence des solutions de nos modèles vers les solutions du modèle continu [93]. Il s'agit là de techniques relativement conventionnelles d'analyse fonctionnelle qui s'appuient sur des résultats d'Arkeryd [6] pour l'existence, de DiBlasio pour la stabilité [40] et de Mishler pour relier la formulation MDV à celle de Boltzmann [84].

Le chapitre trois marque un tournant vers la modélisation : simplifier le terme de collision. On y construit une hiérarchie d'opérateurs BGK convergeant vers l'intégrale de collision [104]. Nous examinons en premier lieu le cadre mathématique de cette construction, à savoir la minimisation d'entropie sous contraintes d'égalités de moments. Le problème évoqué par Junk [67], la réalisabilité, est revisité sous un tout autre angle pour en extraire un théorème "positif". Nous en profitons pour dire quelques mots sur le travail effectué avec Frédéric Coquel et Philippe Helluy [36] (remarque 4). Celui-ci mériterait d'y consacrer plus de temps mais il faut bien reconnaître qu'il est en premier lieu l'oeuvre du "Maître". Nous abordons alors avec un souci de clarification, voire de rajouts par rapport à l'article, des questions liées à la construction de ces modèles et de leurs limites hydrodynamique. Cela constitue une étape fondatrice de ce qui va suivre.

Ce que nous appelons la méthode de relaxation des moments (MRM) est ensuite exposé en trois temps : 1- de $Q(f, f)$ à l'opérateur linéarisé par les moments et les coefficients de relaxation, 2- interprétation des modèles ESBGK pour les cas mono et polyatomiques grâce à l'étape 1 [25] [26], 3- construction d'un modèle pour un mélange de gaz monoatomique [22]. Ce dernier article met en oeuvre une méthodologie générale valable pour des modèles à venir. A noter que nous rectifions ici une erreur parue dans l'article original et portant sur la limite hydrodynamique du modèle.

Le chapitre 5 aborde enfin le cas des molécules polyatomiques et des réactions chimiques dans une approche semi-classique. Nous évoquons brièvement l'article réalisé avec Stéphane Brull [27] afin de mettre en lumière les véritables enjeux. Le travail réalisé dans [103] est alors exposé en détail en montrant les tenants et les aboutissants. Un souci particulier dans la construction de ce modèle est de tenir compte des paramètres disponibles. C'est ce lien modélisation, logiciels et formules qui termine notre exposé.

Nous concluons en donnant quelques perspectives de recherche.

Chapitre 2

Modèles à répartition discrètes des vitesses

2.1 Petit tour d’horizon

splitting

Nous proposons tout d’abord de faire un bref rappel (non exhaustif) des méthodes numériques existantes au début de cette étude (1990). La première, certainement la plus citée et la plus utilisée sous différentes variantes est celle de Bird [12, 13]. Il est intéressant de noter que Bird n’a pas voulu résoudre l’équation de Boltzmann mais simuler via des particules ”numériques” (c’est à dire ne correspondant à proprement parler à des particules physiques) des écoulements en milieu raréfié. Une preuve ultérieure par Wagner [110] prouvera que sa méthode converge bel et bien vers les solutions de ladite équation. Une autre méthode probabiliste qu’il convient ici de citer pour sa popularité et son originalité est celle de Nanbu [90]. La convergence de cette méthode vers les solutions de l’équation de Boltzmann sera prouvée en deux temps par Babovsky [7] et Babovsky et Illner [8]. Nous ne citerons pas ici l’ensemble des méthodes probabilistes ayant vu le jour depuis celle de Bird tant elles sont nombreuses. Par contre, il est clair que de grandes lignes directrices peuvent être dressées. Il s’agit de méthodes particulières basées sur un splitting de l’équation en une phase de transport et une phase de collision. C’est à dire qu’à partir d’une donnée initiale

$f^0(x, v)$, on résout successivement l'équation de transport

$$\begin{cases} \partial_t f^{n+\frac{1}{2}} + v \cdot \nabla_x f^{n+\frac{1}{2}} = 0, \\ f^{n+\frac{1}{2}}(0) = f^n(\Delta t) \end{cases}$$

pendant un pas de temps Δt puis la phase de collision

$$\frac{\partial f^{n+1}}{\partial t} = Q(f^{n+1}, f^{n+1}), \quad f^{n+1}(0) = f^{n+\frac{1}{2}}(\Delta t)$$

C'est essentiellement la phase de collision qui différencie les méthodes. Dans un cadre probabiliste, le coût de la phase de collision est en $O(N)$ où N est le nombre de particules présentes dans un élément de volume du domaine physique. Selon le type d'algorithme utilisé, les propriétés de conservation des premiers moments sont respectées soit directement (Bird), soit en moyenne (Nambu, etc.). Il est cependant plus difficile d'observer la décroissance de l'entropie en raison de la discrétisation particulière dans l'espace des vitesses). L'intérêt des méthodes probabilistes est le faible coût de calcul ainsi que l'adaptabilité à des problèmes physiques plus évolués (gaz à plusieurs composantes, prise en compte des différents modes d'énergie interne, etc). Leurs défauts sont d'une part les résultats bruités due aux traitements probabilistes et d'autre part une quasi impossibilité de résoudre les problèmes d'écoulement proche de la limite hydrodynamique (le coût de la méthode dépendant du pas de temps).

Tcheremissine, pratiquement en même temps que Bird, propose un traitement presque déterministe de la phase de collision [108]. Son idée est d'imposer une répartition régulière de l'ensemble des vitesses sur une grille \mathcal{V}_h (cette grille reste fixe en temps et espace)

$$\mathcal{V}_h = \{h(i, j, k), (i, j, k) \in \mathbb{Z}^3\} \quad (2.1.1)$$

où h est le pas de discrétisation. Ensuite f est remplacée par des poids $f_i(t, x)$ associés à chaque vitesse $v_i \in \mathcal{V}_h$. La variation des $(f_i(t, x))_i$ est fonction de la phase de transport et de la phase de collision. Enfin les collisions sont effectués entre **toutes** les paires de vitesses dans \mathcal{V}_h . Le résultat de chaque collision dépend du choix (aléatoire) de l'angle de diffusion ω (2.4.27). Les nouvelles vitesses ainsi obtenues n'appartiennent pas en général à la grille \mathcal{V}_h et sont projetées sur les vitesses alentour.

Afin de respecter les lois de conservation, l'ensemble des $(f_i^{n+1})_i$ sont multipliés par une fonction Gaussienne de renormalisation.

Pour terminer ce tour d'horizon, apportons une attention toute particulière à une catégorie de modèles proches de l'équation de Boltzmann.

Les systèmes à répartition discrète des vitesses

Les physiciens, ou plutôt dans l'ordre chronologique les mathématiciens ont proposé de substituer à l'équation de Boltzmann des systèmes d'équations phénoménologiques portant sur un nombre **finis** de vitesses. La fonction de répartition $f(t, x, v)$ est remplacée par un ensemble de fonctions de répartition $(\omega_i(t, x))_i$ où l'indice i se rapporte à un ensemble fini de vitesses $(v_i)_{i=1, \dots, N}$. Notons que $\omega_i(t, x)$ n'est en rien une approximation de $f(t, x, v_i)$. L'évolution des $(\omega_i(t, x))_i$ est décrite par un système d'équations couplées

$$\begin{cases} \partial_t \omega_i + v \cdot v_i \cdot \nabla_x \omega_i = \sum_{j,a,b=1} \Gamma_{ij}^{ab} (\omega_a \omega_b - \omega_i \omega_j) \\ \omega_i(0) = \omega_i^0, \quad i = 1, \dots, N \end{cases} \quad (2.1.2)$$

où les Γ_{ij}^{ab} sont les probabilités de transition

$$(v_a, v_b) \longrightarrow (v_i, v_j)$$

On attribue souvent au mathématicien Carleman [30] le premier modèle à répartition discrète des vitesses. Un second modèle dû à Broadwell [23] fût succédé par une approche beaucoup plus "mécanicienne" par notamment Cabannes et Gatignol dans les années 70 [29, 51]. Remarquons que dans tous les cas, il s'agit d'une approche qualitative et non quantitative des solutions de l'équation de Boltzmann et que l'étude très poussée de ces systèmes ne fut pas axée vers l'approximation des solutions de l'équation de Boltzmann. Néanmoins, ils respectent certaines des propriétés fondamentales de l'équation de Boltzmann, à savoir : conservation des premiers moments et théorème H. Ceci est une conséquence immédiate des propriétés du tenseur $(\Gamma_{ij}^{ab})_{ijab}$

Propriété 2.1.1.

$$\Gamma_{ij}^{ab} = \Gamma_{ji}^{ba} \quad (2.1.3)$$

$$\Gamma_{ij}^{ab} = \Gamma_{ab}^{ij} \quad (2.1.4)$$

La propriété (2.1.4) n'est autre que la micro-réversibilité. En ce qui concerne les états d'équilibre, on montre qu'ils ne dépendent que des invariants collisionnels. Cependant il se peut qu'en raison du faible nombre de collisions, il apparaisse des invariants non physiques.

2.2 D'une méthode particulière à un modèle à répartition discrète des vitesses [38]

Dans tout ce qui suit, on fait le choix d'effectuer un splitting entre la phase de transport et celle de collision. La convergence de ce splitting vers la solution de l'équation de Boltzmann a été prouvé par Desvillettes et Mishler [41]. On utilise aussi un schéma explicite en temps en raison de la non linéarité du terme de collision. Des schémas implicites viendront plus tard [24] [37]. Finalement, remarquons que pour le splitting proposé ci-dessus, la phase de collision est locale en espace. Or cette étape est de loin la plus difficile à résoudre. Nous nous bornerons donc à ne considérer que l'équation de Boltzmann homogène en espace

$$\partial_t f(t, v) = Q(f, f)(t, v) \quad (2.2.5)$$

avec

$$Q(f, f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} (f' f'_* - f f_*) |g| q(|g|, \omega) d\omega dv_*, \quad (2.2.6)$$

où

$$v' = v - \langle g, \omega \rangle \omega, \quad v'_* = v_* + \langle g, \omega \rangle \omega, \quad g = v - v_*. \quad (2.2.7)$$

Comme nous l'avons mentionné dans l'introduction, nous avons fait le choix de chercher une méthode déterministe particulière avec poids variables. On suppose donc que

$$f(t, v) \approx \sum_i f_i(t) \delta(v - v_i), \quad (2.2.8) \quad \boxed{\text{ap1}}$$

où les poids f_i ne dépendent que de t tandis que l'ensemble des vitesses $(v_i)_i$ est pré-défini et ne dépend pas de t contrairement aux méthodes Monté-Carlo. On suppose que l'ensemble $(v_i)_i$ est dénombrable et on se pose la question de savoir comment répartir au mieux cet ensemble sur \mathbb{R}^3 pour pouvoir effectuer le calcul de $Q(f, f)$. Un calcul rapide

2.2. D'UNE MÉTHODE PARTICULAIRE À UN MODÈLE À RÉPARTITION DISCRÈTE DES VITESSES

montre que le meilleur choix est celui de Tcheremissine : imposer une grille fixe en vitesse. Ceci permettra au passage d'obtenir une invariance Galiléenne discrète. On utilise alors (2.2.8) qu'on injecte dans $Q^+(f, f)$. Après quelques manipulations, le terme de gain s'écrit sous la forme

$$\begin{aligned} Q^+(f, f) &= \sum_{a,b} f_a f_b \Gamma_{a,b}^+, \\ \Gamma_{a,b}^+ &= \int_{S^2} \delta(v - \langle v_a - v_b, \omega \rangle \omega) |v_a - v_b| q(v_a - v_b, \omega) d\omega. \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Le problème est donc d'approcher les mesures $\Gamma_{a,b}^+$. On écrit symboliquement

$$\Gamma_{a,b}^+ \approx \sum_i \Gamma_{ij}^{ab} \delta(v - v_i), \quad (2.2.10)$$

où les poids Γ_{ij}^{ab} se rapportent aux points d'intégration $v_i \in \mathcal{V}_h$. L'index j est ici introduit de façon artificielle et correspond aux points antipodaux aux vitesses v_i sur la sphère de diamètre $[v_a, v_b]$. Malheureusement, il semble à première vue que l'intersection de ces sphères avec les points de la grille \mathcal{V}_h donne peu de points d'intégration. C'est pourquoi on a choisi dans un premier temps [38] d'élargir les supports des distributions en les convoluant avec une fonction cut-off à la manière des méthodes particulières en mécanique des fluides. Les résultats numériques [38] ont cependant montré qu'il fallait mieux se restreindre aux distributions initiales si l'on voulait obtenir des "Maxwelliennes discrètes" à l'état d'équilibre. En regroupant l'ensemble des contributions ci-dessus, on obtient

$$Q^+(f, f)(v_i) \approx \sum_{j,a,b} \Gamma_{ij}^{ab} f_a f_b,$$

(la somme sur j est en réalité inexistante pour le terme de gain). On utilise ces mêmes poids pour le terme de perte en supposant que les propriétés (2.1.3) (2.1.4) sont satisfaites. On doit alors résoudre le système d'EDOs suivant

$$\begin{cases} \frac{df_i}{dt} = \sum_{j,a,b=1} \Gamma_{ij}^{ab} (f_a f_b - f_i f_j), \\ f_i(0) = f(0, v_i) \quad \forall v_i \in \mathcal{V}_h. \end{cases} \quad (2.2.11)$$

Ce système hérite alors des propriétés des modèles à répartition discrète des vitesses, à savoir : conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique et décroissance de l'entropie discrète (obtenues après sommation).

Troncature du domaine des vitesses

Dans l'optique d'une résolution numérique de l'équation de Boltzmann par des modèles à répartition discrète des vitesses, il faut évidemment travailler sur des domaines bornés. Nous avons introduit dans [99] un cut-off qui permet de conserver toutes les propriétés de l'équation de Boltzmann et des MDV. Plus précisément, il suffit de remplacer la section différentielle $q(|g|, \omega)$ dans (2.2.6) par

$$q_{\Omega}(v, v_*, \omega) = \chi_{\Omega}(v, v_*, \omega)q(|v - v_*|, \omega), \quad (2.2.12)$$

où χ_{Ω} est la fonction caractéristique définie par

$$\chi(v, v_*, \omega) = \begin{cases} 1 & \text{si } (v, v_*, v', v'_*) \in \Omega^4 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

2.3 Formules d'intégration polaires [99, 96, 81]

polair

Il reste à trouver des formules de quadrature du type (2.2.10) qui convergent vers le terme de collision. Remarquons que si l'on est capable de trouver de telles formules, on aura réussi à jeter un pont entre des modèles à répartition discrète des vitesses et l'équation de Boltzmann. En dimension 2, l'approximation (2.2.10) est directement liée aux solutions des équations diophantiennes $p^2 + q^2 = n$ pour p, q dans \mathbb{Z} et $n \in \mathbb{N}$. Gauss a prouvé (voir par exemple [62]) que le nombre de solutions de ces équations est en moyenne borné (c'est à dire lorsque l'on considère l'ensemble des $n \in \mathbb{N}$). Ceci semble indiquer à première vue qu'il y a peu de chance que notre première approche soit concluante. Nous allons tenter de contourner cette difficulté en réécrivant le terme de collision $Q(f, f)$ (2.2.6) sous une autre forme (voir par exemple [85]). On inverse les variables d'intégration ω et v_* dans (2.2.6) de telle sorte que

$$Q(f, f)(v) = \frac{1}{2} \int_{S^2} \int_{\mathbb{R}^3} F(v, v_*, \omega) dv_* d\omega. \quad (2.3.13)$$

où on a posé

$$F(v, v_*, \omega) = (f'f'_* - ff_*)|g|q(|g|, \omega) \quad (2.3.14)$$

Pour la clarté de l'exposé, nous exposons tout d'abord les résultats obtenus en dimension 2 de vitesse.

2.3.1 Cas de la dimension 2 ^[JS, RS] [99, 96]

(2.3.13) se réécrit

$$Q(f, f)(v) = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(v, r, s, \psi) dr ds d\psi, \quad (2.3.15)$$

où on a posé

$$\begin{aligned} F(v, r, s, \psi) &= f(v + r\omega)f(v + s\omega^\perp) - f(v)f(v + r\omega + s\omega^\perp) \\ &\quad \times \sqrt{r^2 + s^2}q(\sqrt{r^2 + s^2}, \arctan \frac{s}{r}). \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

avec

$$\omega = (\cos\psi, \sin\psi), \quad \omega^\perp = (\sin\psi, -\cos\psi).$$

On cherche d'abord une formule d'approximation de

$$\int_{-\infty}^{+\infty} F(v_i, r, s, \psi) dr ds$$

pour

$$v_i \in \mathcal{V}_h = \{h(i, j) / (i, j) \in \mathbb{Z}^2\}$$

et $\psi \in [0, 2\pi]$ fixés. Ayant choisi $\frac{p}{q} \in \mathbb{Q}$ avec p et q premiers entre eux, on voit facilement que les points

$$v' = v_i + kh(q, p), \quad v'_* = v_i + lh(p, -q), \quad \forall (k, l) \in \mathbb{Z}^2$$

sont des éléments de \mathcal{V}_h et qu'il en est de même pour

$$v_* = v_i + h(kq + lp, kp - lq).$$

Les points v_* ainsi définis constituent une sous-grille régulière $\mathcal{V}_h^{pq} \subset \mathcal{V}_h$ de telle sorte que l'on peut facilement appliquer la formule des rectangles

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} F(v_i, r, s, \arctan \frac{p}{q}) dr ds \\ &\approx h^2(p^2 + q^2) \sum_{k, l \in \mathbb{Z}} F(v_i, hkq, hlp, \arctan \frac{p}{q}) \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

Il reste maintenant à trouver une formule d'intégration sur $[0, 2\pi]$ faisant intervenir les angles $(\arctan \frac{p}{q})_{p, q}$. Il va de soi qu'on doit se restreindre à un nombre fini d'angles. On choisit de sélectionner ces angles en rappelant la définition des suites de Farey (voir ^[62] et références dans ce livre).

Définition 2.3.1. Soit $n \in \mathbb{N}$, on appelle suite de Farey d'ordre n et on note \mathcal{F}_n la suite des nombres rationnels ordonnés

$$\mathcal{F}_n = \left\{ \frac{p_i}{q_i}, 0 \leq p_i \leq q_i \leq n \text{ et } p_i \wedge q_i = 1 \right\} \quad (2.3.18)$$

où $p_i \wedge q_i = 1$ veut dire que p_i et q_i sont premiers entre eux. A chaque $p_i/q_i \in \mathcal{F}_n$ est associé un "arc" de Farey α_i^n que l'on définit (par abus de langage) par

$$\begin{aligned} \alpha_i^n &= \arctan \mu_{i+1} - \arctan \mu_i \\ \text{avec } \mu_1 &= 0, \quad \mu_{N+1} = 1 \text{ et } \mu_i = \frac{p_i + p_{i-1}}{q_i + q_{i-1}}, \forall i. \end{aligned}$$

Chaque arc de Farey α_i^n constitue naturellement un poids d'intégration associé au point d'intégration $\arctan p_i/q_i \in [0, \pi/4]$. On obtient ainsi la formule d'intégration suivante pour toute fonction g définie sur $[0, \pi/4]$ et suffisamment régulière

$$\int_0^{\pi/4} g(\psi) d\psi \approx \sum_{i=1}^N \alpha_i^n g(\arctan \frac{p_i}{q_i}) \quad (2.3.19)$$

On étend facilement cette formule à $[0, 2\pi]$ par symétries. On note alors

$$\tilde{\mathcal{F}}_n = \left\{ \frac{p_i}{q_i}, 0 \leq |p_i|, |q_i| \leq n \text{ et } |p_i| \wedge |q_i| = 1 \right\}.$$

Le même poids que précédemment α_i^n (en tenant compte des symétries) est associée à $|\frac{p_i}{q_i}|$ pour tout élément de $\tilde{\mathcal{F}}_n$. En regroupant (2.3.17) et (2.3.19) on obtient la formule d'approximation de (2.3.15)

$$Q(f, f)(v_i) \approx \sum_{\frac{p_i}{q_i} \in \tilde{\mathcal{F}}_n} \sum_{k, l \in \mathcal{Z}} \alpha_i^n h^2 (p_i^2 + q_i^2) F(v, h k q, h l p, \arctan \frac{p_i}{q_i}). \quad (2.3.20)$$

approx

Théorème 2.3.1. On suppose que $F \in C_c^2(\mathbb{R}^2, \mathbb{R}, \mathbb{R}, [0, 2\pi])$, alors l'erreur d'approximation de la formule précédente (2.3.20) est en $O(\frac{\log n}{n^2} + h^2 n^2)$.

De plus les propriétés (2.1.3), (2.1.4) sur le tenseur $(\Gamma_{ij}^{ab})_{ijab}$ étant satisfaites, le système d'EDOs (2.2.11) est conservatif sur les premiers

moments et vérifie le théorème H. Enfin, les états d'équilibre sont des Maxwelliennes

$$\mathcal{M}_i(t, x) = \alpha \exp\left(\frac{-(v_i - u)^2}{\beta}\right)$$

où $(\alpha, u, \beta) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ sont définis implicitement par les relations de conservations

$$\sum_{v_i \in \mathbf{V}_h} \alpha \exp\left(\frac{-(v_i - u)^2}{\beta}\right) \varphi(v_i) = \sum_{v_i \in \mathbf{V}_h} f_i(t, x) \varphi(v_i)$$

pour $\varphi(v) = 1, v, v^2$.

L'estimation de l'erreur repose essentiellement sur une majoration de la longueur des arcs de Farey [62]. La caractérisation des états d'équilibre vient du fait que l'ensemble des invariants collisionnels $I(\mathcal{V}_h)$ se réduit à

$$I(\mathcal{V}_h) = [1, v, |v|^2].$$

2.3.2 Cas de la dimension 3 [99, 81]

Ce travail a été effectué en collaboration avec P. Michel en 1992 mais publié (en dehors de la thèse) nettement plus tard [81]. Il s'agit comme en dimension 2 d'approcher en premier lieu l'intégrale

$$\int_{\mathbb{R}^3} F(v_i, v_*, \omega) dv_* \quad (2.3.21)$$

pour $\omega \in S^2$ et $v_i \in \mathcal{V}_h$ fixés. A nouveau, la condition

$$v' = v_i + r\omega \in \mathcal{V}_h$$

implique que nécessairement $\omega = m \cdot |m|^{-1}$ où $m \in \mathbb{Z}^3$. On effectue alors le changement de variables

$$\begin{aligned} v_* &\rightarrow (r, q) \in \mathbb{R} \times m^\perp, & r &= \langle v_* - v_i, m \cdot |m|^{-1} \rangle \\ q &= v_* - v_i - r m \cdot |m|^{-1} \end{aligned}$$

de telle sorte que

$$\int_{\mathbb{R}^3} F(v_i, v_*, \omega) dv_* = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{q \perp m} F(v_i, v_i + r m \cdot |m|^{-1} + q, m \cdot |m|^{-1}) dq dr$$

On reprend maintenant un résultat énoncé dans [99] avec une estimation plus fine due à V. Panferov [92].

Lemme 2.3.1. Soit $m \in \mathbb{Z}^3$, alors l'ensemble des points $q \in \mathbb{Z}^3$ tels que $\langle q, m \rangle = 0$ est un sous-réseau régulier de \mathbb{Z}^3 dont une base $(m_2, m_3) \in \mathbb{Z}^6$ peut être choisie de façon que :

$$\max(|m_2|, |m_3|) \leq |m|$$

D'autre part le volume de la cellule $\{m, m_2, m_3\}$ est $|m|^2$.

Ce résultat conduit à notre première formule d'approximation

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{q \perp m} F(v_i, v_i + r m \cdot |m|^{-1} + q, m \cdot |m|^{-1}) dq dr \\ & \approx h^3 |m|^2 \sum_{k \in \mathbb{Z}^3} F(v_i, v_i + hk_1 m + hk_2 m_2 + hk_3 m_3, m \cdot |m|^{-1}). \end{aligned} \quad (2.3.22)$$

On cherche maintenant à généraliser la formule d'approximation (2.3.19), c'est à dire à obtenir une formule du type

$$\int_{S^2} G(\omega) d\omega \approx \sum_{m \in \Omega_n} \beta_m G(m) \quad (2.3.23)$$

où

$$\Omega_n = \{m \in \mathbb{Z}^3, |m_i| \leq n, m_x \wedge m_y \wedge m_z = 1\}$$

On commence tout d'abord par se ramener à un problème bidimensionnel en appliquant la projection suivante

1. Pour tout $m \in \Omega_n$, on pose

$$r = \max(|m_x|, |m_y|, |m_z|), \quad \{p, q\} = \{|m_x|, |m_y|, |m_z|\} / \{r\},$$

(ici il faut comprendre $/\{r\}$ par "sans r ").

2. On introduit ensuite la projection Π

$$\Pi : m \rightarrow (p/r, q/r).$$

De cette façon, tout point de Ω_n devient un couple de rationnels dans $[0, 1]^2$. Tout repose alors sur un résultat d'approximation simultanée de nombre réels par des rationnels.

diric **Théorème 2.3.2** (Dirichlet^{Hardy}[62]). Soit $n \in \mathbb{N}$, $\forall (x_1, x_2) \in [0, 1]^2$, il existe un entier $r \leq n$ et des entiers $p \leq r$ et $q \leq r$ tels que

$$|rx_1 - p| \leq \frac{1}{\sqrt{n}}, \quad |rx_2 - q| \leq \frac{1}{\sqrt{n}}.$$

Ce résultat conduit à définir une surface élémentaire dans $[0, 1]^2$ pour chacun des rationnels de la forme $(\frac{p}{r}, \frac{q}{r})$ et dont le dénominateur n'excède pas n

$$R_{pqr} = \{(x_1, x_2) \in [0, 1]^2, |r(x_1, x_2) - (p, q)| = \inf_{r_i \leq n} |r_i(x_1, x_2) - (p_i, q_i)|\}.$$

On définit alors les poids d'intégration $(\beta)_m$ sur S^2 par

$$\beta_m = \lambda_m |\Pi^{-1}(R_{pqr})| \quad \left(\sum_{\Omega_n} \beta_m = 4\pi \right).$$

où λ_m tient compte des éventuelles symétries et/ou permutations liées au changement de variables $(m_x, m_y, m_z) \rightarrow (p, q, r)$ (voir (??)). En regroupant (2.3.22) et (2.3.23), on obtient la formule d'approximation

$$Q(f, f)(v) \approx h^3 \sum_{m \in \Omega_n} \beta_m |m|^2 \sum_{k \in \mathbb{Z}^3} F(v, v + hk_1 m + hk_2 m_2 + hk_3 m_3, m) |m|^{-1}. \quad (2.3.24)$$

Théorème 2.3.3. *On suppose que $F \in C_c^2(\mathbf{R}^3, \mathbf{R}^3, S^2)$, alors l'erreur d'approximation de la formule (2.3.24) est en $O(\frac{\log n}{n^2} + h^2 n^2)$.*

De plus, les conclusions de la proposition restent valides.

2.4 Consistance du modèle de Goldstein & al [94]

Reprenons le problème associé à la formule de Goldstein & al [53, 55]. Afin de faire apparaître clairement le problème de l'intégration sur les sphères S_{ab} de centre $(v_a + v_b)/2$ et de rayon $|v_a - v_b|/2$, on effectue le changement de variable $\omega \rightarrow u \in S^2$ défini par (2.4.27) et

$$v' = \frac{v + v_*}{2} + \frac{|v - v_*|}{2} u, \quad v_* = \frac{v + v_*}{2} - \frac{|v - v_*|}{2} u. \quad (2.4.25)$$

Ainsi, on réécrit $Q(f, f)$ sous une forme bien connue,

$$Q(f, f)(v) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} (f' f'_* - f f_*) s(g, u) du dv_*, \quad (2.4.26)$$

où on a posé

$$s(g, u) = \frac{1}{4 \cos \theta |g|} q(g, \omega), \quad \theta = (g, \omega) |g|^{-1}. \quad (2.4.27)$$

Soit $v_i \in \mathcal{V}_h$ fixé, on note pour tout $m \in \mathbb{Z}^3$

$$v_{j(m)} = v_i + 2hm.$$

Afin d'approcher $Q(f, f)(v_i)$, on utilise d'abord la formule des rectangles

$$Q(f, f)(v_i) \approx (2h)^3 \sum_{m \in \mathbb{Z}^3} \int_{S^2} (f(v')f(v'_*) - f(v_i)f(v_{j(m)})) s(2hm, u) du. \quad (2.4.28)$$

La deuxième approximation consiste à écrire pour chaque sphère

$$\int_{S^2} (f(v')f(v'_*) - f(v_i)f(v_{j(m)})) s(2hm, u) du \approx N(v_i, v_{j(m)}) \quad (2.4.29)$$

avec

$$N(v_i, v_{j(m)}) = \frac{1}{r(|m|)} \sum_{a,b} s_{ij}^{ab} (f_a f_b - f_i f_j), \quad (2.4.30)$$

$$s_{ij}^{ab} = s(|v_i - v_j|, u_{ij}^{ab}) \quad (2.4.31)$$

où $u_{ij}^{ab} \in S^2$ est le vecteur correspondant à la collision $(v_i, v_j) \rightarrow (v_a, v_b)$. Par ailleurs $r(|m|)$ est le nombre points $v_a \in \mathcal{V}_h \cap S_{ij}$ et la somme s'étend sur de tous les couples antipodaux (v_a, v_b) . L'ensemble de ces points peut être obtenu après translation et homothétie de l'ensemble

$$V(|m|) = \{(p_1, p_2, p_3) \in \mathbb{Z}^3 / p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = |m|\}. \quad (2.4.32)$$

$r(|m|)$ est le nombre de solutions de l'équation diophantienne

$$p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 = |m|.$$

Des conditions suffisantes pour que l'approximation globale (2.4.28), (2.4.29) converge sont

1. $r(|m|) \rightarrow \infty$ quand $|m| \rightarrow +\infty$,
2. L'ensemble des points de $V(|m|)$ est asymptotiquement uniformément réparti sur la sphère de centre 0 et de rayon $|m|$.

En dimension 3 on a le lemme suivant qui est un résultat de Gauss [62] amélioré plus tard par Siegel [105].

Théorème 2.4.4 (Siegel). *Soit $m \in \mathbb{R}^3$ tel que $|m| \in \mathbb{N}$ et $|m| = 4^a m_1$ avec m_1 non divisible par 4 et $m_1 \neq 7$ [8], alors pour tout $\varepsilon > 0$ on a l'estimation suivante*

$$c_1(\varepsilon)m_1^{(1-\varepsilon)/2} \leq r(|m|) \leq c_2(\varepsilon)m_1^{(1-\varepsilon)/2}, \quad (2.4.33)$$

où les constantes c_1 et c_2 ne sont pas connues. Ici, on a adopté la notation $[\cdot]$ pour "modulo".

- Remarque 1.**
1. $r(|m|) = r(m_1)$ pour tout $|m|$ implique que les points de $V(4^a m_1)$ sont les mêmes pour tout a (modulo la division par 4^a). Autrement dit, pour toute valeur de m_1 non divisible par 4 et $m_1 \neq 7$ [8], il existe une suite $V(|m|)$ de sphères qui contredit l'hypothèse d'uniforme équirépartition quand $|m| \rightarrow \infty$!
 2. Les valeurs de $m = 7$ [8] correspondent à $r(m) = 0$, c'est à dire à des sphères telles que $\mathcal{V}_h \cap S_{ij} = \emptyset$, ce qui ne pose pas de problème.

La seconde condition fait appel à des résultats beaucoup plus sophistiqués de théorie des nombres sur les coefficients des formes modulaires qui sont définis pour tout polynôme homogène harmonique sphérique p de degré l par

$$\theta(z; p) = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} p(\mathbf{n}) \exp 2\pi i z |\mathbf{n}|^2 = \sum_{m=1}^{\infty} a_m \exp 2\pi i m z.$$

La très grande difficulté porte alors sur l'estimation des coefficients de Fourier a_m de θ . Les résultats obtenus successivement par entre autres Iwaniec [64] et Duke [45] et que l'on peut retrouver dans un livre de Sarnak [98] se résument par l'estimation suivante.

$$a_m \leq c(\varepsilon, l) m^{13/28+l/2+\varepsilon} \quad |m| = 1, 2, 3, 5, 6 [8].$$

Le travail consiste ensuite à exploiter ces inégalités en effectuant un développement en harmoniques sphériques des fonctions continues sur la sphère.

IDS **Théorème 2.4.5** (Iwaniec, Duke, Sarnak). *Soit g une fonction continue sur S^2 , alors*

$$\frac{1}{r(|m|)} \sum_{z \in V(|m|)} g\left(\frac{z}{|z|}\right) \longrightarrow \int_{S^2} g(u) du \quad \text{quand } |m| \rightarrow +\infty \quad (2.4.34)$$

pour tout $|m| = 1, 2, 3, 5, 6$ [8]

Bien que ce théorème assure la convergence de chacune des intégrales (2.4.29), il faut que cette convergence soit uniforme sur tous les couples $(v_i, v_{j(m)})$. Un résultat dû à Golubeva et Fomenko [57] donne en fonction de la régularité de g une borne supérieure sur les coefficients intervenant dans le développement de g en polynômes harmoniques sphériques. Ce résultat sera amélioré par Duke et Schulze-Pillot [46]. Il permet de dire que la convergence du théorème 2.4.5 est en $|m|^{-1/175+\epsilon}$ pour tout $\epsilon > 0$ si $g \in C^4(S^2)$! Il est évident que cette estimation est extrêmement faible du point de vue d'une formule de quadrature même si elle est une grande avancée en théorie des nombres.

Remarque 2. *Une conjecture de Ramanujan portant sur les formes modulaires ramène cette estimation en $|m|^{-1/4+\epsilon}$. Il est intéressant de noter qu'en raison de l'estimation de Gauss-Siegel, la distance moyenne entre deux points voisins appartenant à $V(|m|)$ est de l'ordre de $|m|^{-1/4}$ si $|m|$ n'est pas divisible par 4. On en conclut qu'en raison de la conjecture de Ramanujan, l'erreur d'approximation est du même ordre que celui du "pas" sur la sphère. C'est à dire que grosso-modo, cette erreur est équivalente à la formule des rectangles.*

Une dernière étape consiste à ramener les formules d'approximations (2.4.28) et (2.4.29) pour un pas h et non $2h$. C'est évidemment la deuxième formule qui pose problème puisque l'on doit imposer des conditions supplémentaires sur l'équation diophantienne

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 = |m|.$$

Ces conditions sont équivalentes à étudier pour certaines valeurs de $|m|$ les solutions entières d'équations de la forme

$$2x^2 + 4y^2 + z^2 + 4xy = |m|,$$

c'est à dire à généraliser le problème d'équirépartition sur des sphères à des ellipsoïdes. En fait, les résultats de Duke et Schulze-Pillot [46] (voir aussi [86]) s'étendent aux formes quadratiques définies positives (à coefficients entiers) et on a le résultat suivant.

Théorème 2.4.6. *Palczewski, Schneider, Bobylev[94] On suppose que $f \in C^k(\mathbb{R}^3)$ ($k \geq 6$) est à support compact dans $B(0, R)$ pour $R > 0$ fixé et que la section différentielle $s(|g|, u)$ a une régularité suffisante*

pour que la fonction G_v définie par (v étant fixé)

$$G_v(v_*) = \int_{S^2} (f(v')f(v'_*) - f(v)f(v_*) s(|g|, u) du,$$

soit dans $H^{k,1}(\mathbb{R}^3)$. Alors pour tout maillage $\mathcal{V}_h = \{v_n = h\mathbf{n}, \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3\}$ et tout $\epsilon > 0$, on a

$$\|Q(f, f)(\mathbf{v}_i) - h^3 \sum_{\mathbf{v}_j \in \mathbb{Z}^3} N(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j)\| \leq c(\epsilon, k) R^5 \|f\|_k^2 h^{\frac{2}{175} - \epsilon} \quad \forall \mathbf{v}_i \in \mathcal{V}_h$$

où $c(\epsilon, k)$ ne dépend pas de f .

De plus, si la conjecture de Ramanujan est vraie, l'erreur est en $h^{1/2-\epsilon}$.

Chapitre 3

Approximation entropique et premiers modèles BGK [104]

Le coût prohibitif des modèles à répartition discrète des vitesses pour l'équation de Boltzmann est une barrière qui semble infranchissable. En restant dans le même cadre, Buet a proposé de n'appliquer que partiellement et de façon aléatoire la formule de Goldstein & al [28]. Les problèmes rencontrés l'ont amené dans le même temps à résoudre séparément un ensemble de modèles à 4 vitesses. Et puis il y a la thèse de Mieussens [82] qui propose une alternative non pas nouvelle, résoudre le modèle BGK au lieu de l'équation de Boltzmann, mais qui ouvre d'autres horizons. Le problème est abordé sous un angle pratique avec une approche numérique globale. Temps, espace, vitesses (discrètes). Il en résulte un schéma aux volumes finis implicite en temps et donc "compétitif". Ce même schéma s'étend naturellement au modèle ESBGK [77] et même à un modèle BGK aux 14 moments originellement proposé par Levermore [71] mais corrigé dans cette même thèse pour faute de nombre de Prandtl incorrect. Il ne s'agit pas pour nous d'améliorer le modèle de Levermore mais d'exploiter la "projection" $g \rightarrow G(v) = \exp(m(v))$ pour le terme de gain $Q^+(f, f)$. L'article paru dans M2AN [104] est en fait composé de trois parties distinctes. La première est consacrée à l'étude mathématique de cette projection. La seconde à celle des systèmes aux moments de Levermore. Originellement, ce chapitre se concentrait sur la nature hyperbolique ou non de ces systèmes et statuait pour l'hyperbolicité. Bien que la réponse soit fautive, les outils introduits pour cette démonstration ont un grand

intérêt. Faute de n'avoir pu corriger l'erreur, la version publiée a été notablement écourtée et coupée du pire comme du meilleur. Le chapitre présent dans la version publiée évoque la possibilité de systèmes mal posés sans apporter de réponse nette. Hauck, Levermore et Tits [63] en feront une étude très poussée qui, tout en répondant à certaines questions, a le mérite de montrer sa propre "incomplétude". Finalement, la troisième partie de l'article est consacrée aux modèles BGK généralisés construits à partir de l'idée que nous avons eue. Nous ne présenterons ici que les chapitres un et trois.

3.1 Problème de réalisabilité et approximation entropique

M2AN

Junk a démontré [67] que la projection ci-dessus n'allait pas de soi. C'est ce que nous appellerons le problème de réalisabilité. Nous rappelons brièvement son résultat avant de proposer notre propre approche. Pour simplifier les notations nous nous bornons au cas de l'étude proposée dans [104] où l'espace des moments \mathbb{P} est de la forme $\mathbb{P} = \mathbb{P}_{N-1} \oplus \mathbb{R} \cdot |\mathbf{v}|^N$ avec N pair et où $\mathbb{P}_{N-1}(\mathbb{R}^d)$ est l'espace des polynômes en les variables (v_1, \dots, v_d) d'ordre plus petit ou égal à $N-1$. C'est à dire l'espace engendré par les monômes $\mathbf{v}^{\mathbf{q}} = v_1^{q_1} v_2^{q_2} \dots v_d^{q_d}$ avec $|\mathbf{q}| = q_1 + q_2 + \dots + q_d \leq N-1$. On note $\mathbf{m}(\mathbf{v})$ le vecteur dont les composantes sont les monômes de \mathbb{P}_{N-1} plus $|\mathbf{v}|^N$. Ainsi tout polynôme de \mathbb{P} s'écrit sous la forme $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v})$ où $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{\#\mathbb{P}}$ avec

$$\#\mathbb{P} = 1 + \binom{N-1+d}{N-1}.$$

Junk étudie alors la structure de l'ensemble

$$\Lambda = \{ \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{\#\mathbb{P}} / \int \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v})) < +\infty \}$$

et des moments y attendant. C'est à dire l'ensemble

$$\boldsymbol{\mu}(E) = \left\{ \int \mathbf{m}(\mathbf{v}) \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v})) / \boldsymbol{\alpha} \in \Lambda \right\}. \quad (3.1.1) \quad \text{MuE}$$

Il est alors intuitif de penser que si $\boldsymbol{\mu}(E)$ est strictement inclus dans

$$\boldsymbol{\mu}(D) = \left\{ \int \mathbf{m}(\mathbf{v}) g / g \geq 0, g \neq 0, \int g(\mathbf{v}) (1 + \|\mathbf{v}\|^N) < +\infty \right\}, \quad (3.1.2) \quad \text{MuD}$$

3.1. PROBLÈME DE RÉALISABILITÉ ET APPROXIMATION ENTROPIQUE 35

alors il y existera des cas de non réalisabilité. Il est nettement moins intuitif de penser que ces deux ensembles peuvent être différents. Junk réussit à construire des moments dans $\boldsymbol{\mu}(D)/\boldsymbol{\mu}(E)$ quand $\Lambda \cap \partial\Lambda \neq \emptyset$, montrant des cas de non réalisabilité. Par contre, quand Λ et $\partial\Lambda$ sont disjoints (avec Λ non vide), on a $\boldsymbol{\mu}(D) = \boldsymbol{\mu}(E)$ et la projection est bien définie.

Notre approche est tout à fait différente et repose essentiellement sur le lemme de Fatou. Prenons une fonction f non négative, non nulle et dont les moments jusqu'à l'ordre N sont bornés. L'ensemble

$$C_f = \{g \geq 0, \int \mathbf{m}(\mathbf{v}) g(\mathbf{v}) = \int \mathbf{m}(\mathbf{v}) f(\mathbf{v})\}$$

est convexe mais non fortement fermé. En relaxant la contrainte sur le moment d'ordre N par une inégalité non stricte, on obtient un ensemble fortement fermé. C'est une conséquence directe du lemme de Fatou. On note ainsi

$$\bar{C}_f = \{g \geq 0, \boldsymbol{\mu}(g) \leq^* \boldsymbol{\mu}(f)\},$$

où la relation $\boldsymbol{\mu}(g) \leq^* \boldsymbol{\mu}(f)$ est définie par

$$\int \mathbf{v}^{\mathbf{q}} g(\mathbf{v}) = \int \mathbf{v}^{\mathbf{q}} f(\mathbf{v}), \forall |\mathbf{q}| \leq N-1 \text{ et } \int \|\mathbf{v}\|^N g(\mathbf{v}) \leq \int \|\mathbf{v}\|^N f(\mathbf{v}).$$

On a donc construit un ensemble fortement et donc faiblement fermé par convexité. En ayant prouvé au préalable que tout ensemble de C_f à entropie bornée est faiblement (relativement) compact, on conclut que toute suite minimisante $(g_n)_n \in C_f$ pour l'entropie va nécessairement converger faiblement vers une fonction $G \in \bar{C}_f$. Mais l'entropie

$$H(f) = \begin{cases} \int f \ln f - f & \text{si } f \geq 0, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases} \quad (3.1.3)$$

est strictement convexe sur son domaine. G est donc l'unique fonction minimisante. Il nous faut maintenant la caractériser. Cela se fait en deux temps :

- 1- On montre qu'en se restreignant à un ensemble compact $K \in \mathbb{R}^d$, toute fonction $h \geq 0$, non nulle et dans $L^1(K)$ admet une projection qui est une exponentielle d'un polynôme dans \mathbb{P} .
- 2- G est inconnue mais on peut toujours définir la restriction de ses

moments $\boldsymbol{\mu}_K(G)$ sur K et sa projection $G_K = \exp(\boldsymbol{\alpha}_K \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}))$. Mais si G minimise l'entropie dans \bar{C}_f , elle minimise aussi l'entropie restreinte à K sous contraintes d'égalités avec les moments $\boldsymbol{\mu}_K(G)$. Donc G restreinte à K coïncide avec sa projection G_K . En appliquant ce raisonnement pour une suite "croissante" d'ensembles $K_n \rightarrow \mathbb{R}^d$, on en déduit que $\boldsymbol{\alpha}_{K_n}$ ne dépend plus de n . On peut alors passer à la limite par un argument de convergence dominée et en déduire que $G = \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}))$. Le cas où la contrainte d'ordre N n'est pas saturée se traite de façon similaire en restreignant les contraintes égalité aux moments d'ordre inférieur et en tenant compte de la parité de N . On obtient alors le théorème suivant.

sufficient

Théorème 3.1.7. *Soit $N \in \mathbb{N}$ et f une fonction non négative dans $L^1_N(\mathbb{R}^d)$ (L^1 à poids) telle que $H(f) < +\infty$. On note*

$$\bar{C}_f = \{g \geq 0, \boldsymbol{\mu}(g) \leq^* \boldsymbol{\mu}(f)\},$$

alors le problème de minimisation de l'entropie

$$\min_{g \in \bar{C}_f} H(g) \tag{3.1.4}$$

admet une unique solution dans \bar{C}_f qui s'écrit

$$G(\mathbf{v}) = \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v})).$$

Inversement, s'il existe une fonction de la forme $\exp(p(\mathbf{v}))$ avec $p \in \mathbb{P}$, alors cette fonction est unique (i.e il n'y a pas d'autre exponentielle) et c'est la solution de notre problème.

Les multiplicateurs de Lagrange $\boldsymbol{\alpha}$ sont entièrement déterminés par les contraintes $\boldsymbol{\mu}(G) \leq^* \boldsymbol{\mu}(f)$. Si la contrainte d'ordre supérieure n'est pas saturée, on distingue deux cas :

- 1- N impair. On a alors $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}) \in \mathbb{P}_{N-1}$ et G minimise H sous les seules contraintes $\mu_{\mathbf{q}}(G) = \mu_{\mathbf{q}}(f)$, $|\mathbf{q}| \leq N - 1$.
- 2- N pair. Alors $\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}) \in \mathbb{P}_{N-2}$ et $\boldsymbol{\alpha}$ est entièrement défini par $\mu_{\mathbf{q}}(G) = \mu_{\mathbf{q}}(f)$, $|\mathbf{q}| \leq N - 2$.

Ce théorème est en quelque sorte un résultat positif au regard de celui de Junk qui exhibe les cas de non réalisabilité. L'équivalence des deux résultats repose sur certaines propriétés des polynômes positifs de \mathbb{P} (dixit Junk). Ces mêmes polynômes jouent un rôle essentiel dans la caractérisation des moments de fonctions positives [67]. Le problème n'a pas été résolu à l'heure actuelle.

Remarque 3. Le terme "projection" a été introduit par Csiszàr pour définir la fonction densité de probabilité P appartenant à un ensemble convexe C qui minimise l'entropie relative à une densité de probabilité R donnée, ou entropie de Kullback-Leibler, i.e

$$\int P \ln \frac{P}{R} dv = \min_{Q \in C} \int Q \ln \frac{Q}{R} dv.$$

L'ensemble E des exponentielles dont les coefficients sont dans Λ n'étant pas convexe, il était plus approprié d'utiliser dans notre cas le terme approximation entropique en vertu de l'inégalité de Csiszàr-Kullback (pour des densités de probabilité)

$$\|f - G\|_{L^1}^2 \leq 2 \int f \ln \frac{f}{G}.$$

proj

Remarque 4. A nouveau, le terme "projection entropique" utilisé pour la construction de schémas pour les équations hyperboliques [36] ne doit évidemment pas s'interpréter de façon directe. S'il s'agissait de "projeter" des fonctions sur des polynômes d'ordre un (en espace) en minimisant l'entropie sous contrainte d'égalités des moments d'ordre 0, l'inégalité de Bessel nous conduirait vers le schéma de Godunov originel. Il n'y a dans cette projection aucune minimisation de quelque norme que ce soit. La norme L^1 adaptée à la conservation ne le serait pas pour assurer la positivité. Il s'agit donc tout simplement d'une approximation d'ordre deux par des applications linéaires au sens du développement de Taylor.

3.2 Modèles BGK généralisés

Pour des raisons que nous allons voir plus tard, les modèles que nous construisons ne s'appliquent qu'aux molécules Maxwelliennes. On simplifie quelque peu l'opérateur de collision $Q(f, f)$ pour la clarté de l'exposé

$$Q(f, f)(\mathbf{v}) = Q^+(f, f) - nf \quad \text{et} \quad Q^+(f, f) = \int_{S^2} \int_{\mathbb{R}^3} f' f'_* d\mathbf{v}_* d\omega, \quad (3.2.5) \quad \text{qqq}$$

avec $n = \int f d\mathbf{v}$ et

$$g = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_*|, \quad \mathbf{v}' = \frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_*}{2} + \frac{g}{2}\omega, \quad \mathbf{v}'_* = \frac{\mathbf{v} + \mathbf{v}_*}{2} - \frac{g}{2}\omega. \quad (3.2.6) \quad \text{tincan}$$

La Maxwellienne \mathcal{M} du modèle BGK

$$R(f) = \frac{1}{\tau}(\mathcal{M} - f),$$

où τ est un temps de relaxation vers l'état d'équilibre, est interprétée à la lumière du théorème 3.1.7. À savoir

" \mathcal{M} est l'unique fonction qui minimise l'entropie dans l'ensemble

$$C_{0,f} = \{g \geq 0, \boldsymbol{\mu}_0(g) = \boldsymbol{\mu}_0(f) = \int (1, \mathbf{v}, |\mathbf{v}|^2)^T f\}."$$

Mais on peut aussi écrire

$$C_{0,f} = \{g \geq 0, \boldsymbol{\mu}_0(g) = n^{-1} \int (1, \mathbf{v}, |\mathbf{v}|^2)^T Q^+(f, f) \mathbf{v}\}.$$

On pourrait dire que le modèle BGK est le modèle le "plus bas" dans la hiérarchie des modèles que nous allons construire. L'idée générale consiste alors à ajouter des contraintes dans le problème de minimisation, de telle sorte que

$$\int \mathbf{m}(\mathbf{v}) Q(f, f) d\mathbf{v} = \int \mathbf{m}(\mathbf{v}) R(f) d\mathbf{v},$$

où $\mathbf{m}(\mathbf{v})$ est un vecteur de moments de taille arbitraire et

$$R(f) = n(G - f).$$

On peut alors parler d'une approximation de Galerkin. Cette construction est assujettie à des conditions physiques et des contraintes de faisabilité.

1. Lois de conservation.
2. Invariance Galiléenne.
3. Le terme de collision doit assurer la décroissance de l'entropie.
4. La limite hydrodynamique doit correspondre à celle de l'équation de Boltzmann. Dans l'ordre : Euler, Navier-Stokes, Burnett, etc.
5. $n^{-1} \int Q^+(f, f) \mathbf{m}(\mathbf{v})$ doit être calculable à partir de moments de f .

A priori, il n'est pas nécessaire de prendre des espaces de la forme $\mathbb{P} = \mathbb{P}_{N-1} \oplus \mathbb{R} \cdot |\mathbf{v}|^N$ et on peut se restreindre à

$$\mathbb{E} = \mathbb{E}_{N-1} \oplus \mathbb{E} \cdot |\mathbf{v}|^N \quad (3.2.7) \quad \boxed{\text{E1}}$$

où \mathbb{E}_{N-1} est un espace de polynômes de degré inférieur strict à N . Pour satisfaire aux points 1 et 2, il est naturel d'imposer que

- (I) $\mathbb{E}_0 = \text{Vect}[1, v_1, v_2, v_3, |\mathbf{v}|^2] \subset \mathbb{E}$,
- (II) en notant l'opérateur de translation $\tau_{\mathbf{u}}f(\mathbf{v}) = f(\mathbf{v} - \mathbf{u})$ et pour tout $O \in SO(\mathbb{R}^3)$ (le groupe des transformations orthogonales dans \mathbb{R}^3) $\tau_O f(\mathbf{v}) = f(O\mathbf{v})$, on doit avoir

$$\tau_{\mathbf{u}}R(f) = R(\tau_{\mathbf{u}}f), \quad \tau_OR(f) = R(\tau_O(f)), \quad (3.2.8) \quad \boxed{\text{galilean}}$$

La restriction du modèle aux molécules Maxwelliennes est une conséquence des conditions 3 et 5. Attardons nous un instant sur le dernier point. Pour tout polynôme $p \in \mathbb{E}$, on a

$$\int Q^+(f, f) p(\mathbf{v}) d\mathbf{v} d\mathbf{v}_* d\omega = \int f(\mathbf{v}) f(\mathbf{v}_*) \left(\int_{S^2} p(\mathbf{v}') d\omega \right) d\mathbf{v} d\mathbf{v}_*. \quad (3.2.9) \quad \boxed{\text{calcul}}$$

Mais l'intégrale sur la sphère de $\omega^{\mathbf{q}}$ avec $|\mathbf{q}|$ impair s'annule. En utilisant les relations (3.2.6), les termes en $|\mathbf{v} - \mathbf{v}_*|^{|\mathbf{q}|}$ s'annulent à leur tour. Il s'en suit que pour \mathbf{v} (respectivement \mathbf{v}_*) fixé, l'application

$$\{\mathbf{v}_* \longrightarrow \int_{S^2} p(\mathbf{v}', \mathbf{v}_*) d\omega\} \in \mathbb{P}.$$

Autrement dit, on peut obtenir le résultat de (3.2.9) par la seule connaissance de moments de f dans \mathbb{P} ce qui répond au critère de faisabilité. On pose maintenant

$$H(G) = \min_{g \in C_+} H(g) \quad \text{où} \quad C_+ = \{g \geq 0, \boldsymbol{\mu}(g) \leq^* \boldsymbol{\mu}(n^{-1}Q^+(f, f))\}. \quad (3.2.10) \quad \boxed{\text{HG}}$$

($\boldsymbol{\mu}$ est ici réduit à l'ensemble \mathbb{E}). L'invariance Galiléenne du modèle est alors assurée par un résultat de Junk et Unterreiter [68] : si on note $\boldsymbol{\rho}$ les moments d'une fonction positive et non nulle $g \in L_N^1$, alors

$$\tau_{\mathbf{u}} \exp(\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v})) = \exp(\boldsymbol{\alpha}(\tau_{\mathbf{u}}\boldsymbol{\rho}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}))$$

et

$$\tau_O \exp(\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v})) = \exp(\boldsymbol{\alpha}(\tau_O\boldsymbol{\rho}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}))$$

où $\tau_{\mathbf{u}}\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}(\tau_{\mathbf{u}}f)$. La décroissance de l'entropie est le résultat conjugué de (3.2.14) et d'un théorème difficile de Villani [109] qui ne s'applique qu'aux molécules Maxwelliennes

$$H(Q^+(f, f)) \leq H(Q^-(f, f)).$$

On obtient alors après quelques manipulations le théorème H.

theoHBGK

Théorème 3.2.8.

$$\int R(f) \ln f \leq 0,$$

avec égalité si et seulement les deux assertions équivalentes sont satisfaites

- i) $G = f = \mathcal{M}$,
- ii) $R(f) = 0$.

Il nous reste à étudier la limite fluide de tels modèles. C'est à dire à effectuer le développement de Chapman-Enskog de

$$\partial_t f_\varepsilon + \mathbf{v} \cdot \nabla f_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} (G - f_\varepsilon). \quad (3.2.11)$$

On a le résultat suivant.

Proposition 1. *On se donne un espace de polynômes \mathbb{E} de la forme (3.2.7), contenant $\text{Vect}[1, v_1, v_2, v_3, v_i v_j, |v|^2 v]$ et invariant par transformation Galiléenne. Quand $\varepsilon \rightarrow 0$ dans (3.2.11), on obtient à l'ordre 1 l'équation de Navier-Stokes*

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbb{I}) - \varepsilon \nabla \cdot (\mu \mathbb{D}(\mathbf{u})) &= 0, \\ \partial_t (\frac{1}{2} \rho u^2 + \mathcal{E}) + \nabla \cdot ((\frac{1}{2} \rho u^2 + \mathcal{E} + p) \mathbf{u}) + \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{J}_q &= 0. \end{aligned} \quad (3.2.12)$$

où $p = nk_B T$, $\mathbb{D}(\mathbf{u})$ est le tenseur de Reynolds

$$\mathbb{D}(\mathbf{u}) = \left[\nabla_x \mathbf{u} + (\nabla_x \mathbf{u})^T \right] - \frac{1}{3} (\nabla_x \cdot \mathbf{u}) \mathbb{I}, \quad (3.2.13) \quad \text{reynolds}$$

$\mu = 2k_B T$ est la viscosité et κ la conductivité thermique. Enfin, le nombre de Prandtl vaut 2/3.

Le calcul de la limite fluide est très délicat. Le point difficile repose sur la linéarisation de $R(f)$. Nous en profitons pour clarifier à la fois le calcul donné dans l'article et effleurer quelques problèmes relatifs aux systèmes aux moments de Levermore. D'après le théorème 3.1.7, pour tout $\boldsymbol{\rho} \in \boldsymbol{\mu}(D)$ (3.1.2), il existe une unique fonction $G = \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}))$ telle que

$$H(G) = \min_{g \in C_{\boldsymbol{\rho}}} H(g) \quad \text{où} \quad C_{\boldsymbol{\rho}} = \{g \geq 0, \boldsymbol{\mu}(g) \leq^* \boldsymbol{\rho}\}. \quad (3.2.14) \quad \text{HG}$$

La construction des systèmes aux moments de Levermore repose sur la dualité entre les variables $\boldsymbol{\alpha}$ et $\boldsymbol{\rho}$ via la transformée de Legendre de $h^*(\boldsymbol{\alpha}) = \int \exp(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}))$. La transformée de Legendre de h^* , notée h n'est autre que la fonction entropie définie par $h(\boldsymbol{\rho}) = H(G)$ lorsqu'il y a égalité sur tous les moments. Les systèmes de Levermore seraient bien posés si $\boldsymbol{\rho} \rightarrow \boldsymbol{\alpha}$ était une bijection. Or nous avons mis en évidence l'existence des cas de non réalisabilité ce qui prouve le contraire. Autrement dit, pour $\boldsymbol{\rho} \in \boldsymbol{\mu}(D)/\boldsymbol{\mu}(E)$ (3.1.1), on a pas $h_{\boldsymbol{\alpha}}^*(\boldsymbol{\alpha}) = \boldsymbol{\rho}$. Ceci nous amène à définir une fonction non strictement convexe

$$\tilde{h}(\boldsymbol{\rho}) = \min_{g \in C_{\boldsymbol{\rho}}} H(g).$$

Nous en revenons maintenant au développement de Chapman-Enskog. Le théorème H 3.2.8 nous assure que f_{ε} se développe autour de \mathcal{M} . En notant $\boldsymbol{\rho}_M = \boldsymbol{\mu}(Q^+(\mathcal{M}, \mathcal{M}))$ et $\boldsymbol{\rho}_1^+$ la perturbation du terme d'ordre ε dans $Q^+(f, f)$

$$\boldsymbol{\rho}_1^+ = 2 \int Q^+(\mathcal{M}, \mathcal{M}g) \mathbf{m}(\mathbf{v}) d\mathbf{v}, \quad (3.2.15) \quad \text{Rho1}$$

on obtient dans un premier temps

$$G(\boldsymbol{\rho}_M + \varepsilon \boldsymbol{\rho}_1^+ + \dots) = \frac{1}{n} \mathcal{M} \left(1 + \varepsilon \mathbf{m}(\mathbf{v})^T \cdot \tilde{h}_{\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{\rho}_M) \cdot \boldsymbol{\rho}_1^+ + O(\varepsilon^2) \right).$$

La Hessienne $\tilde{h}_{\boldsymbol{\rho}\boldsymbol{\rho}}(\boldsymbol{\rho}_M)$ est dégénérée dans les directions $\boldsymbol{\rho}$ avec $\boldsymbol{\rho}_M \leq^* \boldsymbol{\rho}$ car \tilde{h} n'est pas strictement convexe. En comparant ce développement avec celui de G sur une base de Hilbert (après avoir orthonormalisé la base de \mathbb{E}), on obtient alors

$$G(\boldsymbol{\rho}_M + \varepsilon \boldsymbol{\rho}_1^+ + \dots) = \frac{1}{n} \mathcal{M} (1 + \varepsilon \tilde{\boldsymbol{\rho}}_1^+ \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}) + O(\varepsilon^2)),$$

où, par comparaison avec le développement précédent, $\tilde{\rho}_1^+ = \mathbf{m}(\mathbf{v})^T \cdot \tilde{h} \rho \rho(\rho_M) \cdot \rho_1^+$. Sans rentrer dans les détails, toutes ses composantes sur \mathbb{E}_{N-1} sont les mêmes que celles de ρ_1^+ (3.2.15). Finalement, on a

$$\mathcal{L}_R(g) = \tilde{\rho}_1^+ \cdot \mathbf{m}(\mathbf{v}) - g,$$

ce qui veut dire que la restriction à \mathbb{E}_{N-1} de $\mathcal{L}_R(g)$ correspond à celle de l'opérateur de Boltzmann linéarisé. Comme $[1, v, v_i v_j, |v|^2 v] \subset \mathbb{E}_{N-1}$, on conclut facilement sur la forme de l'équation de Navier-Stokes.

Chapitre 4

La méthode de relaxation des moments

MRM

On pourrait chercher à généraliser la méthode précédente à n'importe quel type d'interaction moléculaire par des méthodes d'approximation des moments de $Q(f, f)$ (voir par exemple [56] pour les gaz multi-espèces). Il faudrait distinguer ces approximations pour $Q^+(f, f)$ et $Q^-(f, f)$ puis tenter de mettre le tout sous une forme semblable à celle des modèles BGK. Il faudrait ensuite s'assurer que la fonction de relaxation a bien des moments dans $\mu(D)$. Enfin, il faudrait s'assurer que le modèle vérifie le théorème H. Ce programme semble long et fastidieux, voir impossible. C'est pourquoi nous proposons une approche simplifiée inspirée par le comportement des moments de f dans le cadre de l'équation de Boltzmann homogène. On part toujours d'un modèle BGK de la forme

$$R(f) = \varrho(G - f),$$

où G va être la solution du problème de minimisation de l'entropie sous certaines contraintes. L'idée est la suivante : puisque $f \rightarrow \mathcal{M}$ quand $t \rightarrow +\infty$, alors les moments de f pour des polynômes orthogonaux à $\mathbb{E}_0 = [1, \mathbf{v}, |\mathbf{v}|^2]$ pour le produit scalaire

$$\langle \phi, \psi \rangle = \int \phi \psi \mathcal{M} d\mathbf{v}$$

tendent eux mêmes vers 0. On se donne donc un espace $\mathbb{E} = \mathbb{E}_0 \oplus \mathbb{E}_0^\perp$ (voir (3.2.7)) où \mathbb{E}_0 est l'espace des invariants puis on simplifie le

problème en imposant les contraintes

$$\int R(f) p(v) d\mathbf{v} = -\lambda_p \int f p(v) d\mathbf{v}, \quad \forall p \in \mathbb{E}_0^\perp. \quad (4.0.1) \quad \text{contraintes}$$

Il est clair que les lois de conservation se traduisent simplement par $\lambda_p = 0$ pour tout $p(\mathbf{v}) \in \mathbb{E}_0$ tandis que les autres valeurs des λ_p doivent être strictement positives. L'autre idée à l'origine de la méthode est la suivante : chercher à copier l'opérateur de collision linéarisé tout en restant dans le cadre de l'équation de Boltzmann, c'est à dire avec f positif. L'étude du spectre de \mathcal{L} (à nouveau pour les molécules Maxwelliennes) nous dit d'ailleurs comment choisir les coefficients de relaxation et les moments associés. Il s'agit tout simplement de prendre les fonctions propres p comme polynômes avec les valeurs propres associées ($-\lambda_p^{-1}$). En notant $f = \mathcal{M}(1 + g)$, on a

$$-\lambda_p \int f p d\mathbf{v} = -\lambda_p \int \mathcal{M} \mathcal{L}(g) \mathcal{L}^{-1}(p) d\mathbf{v} = \int \mathcal{M} \mathcal{L}(g) p d\mathbf{v}. \quad (4.0.2) \quad \text{inter}$$

$R(f)$, s'il existe, serait alors égal à \mathcal{L} au sens faible et pour des fonctions test dans \mathbb{E} . Pour d'autres types d'interaction moléculaires, on peut dans un premier temps se restreindre aux pseudo-vecteurs propres

$$\mathbb{A} = \left[(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{u}) - \frac{1}{3} \|\mathbf{v} - \mathbf{u}\|^2 \mathbb{I} \right], \quad (4.0.3)$$

$$\mathbf{B} = (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \left[\frac{1}{2} m (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 - \frac{5}{2} k_B T \right], \quad (4.0.4)$$

où m est la masse moléculaire. L'équation (4.0.2) n'est pas exacte même si les moments de f relatifs à \mathbb{A} et \mathbf{B} tendent vers 0 quand $t \rightarrow +\infty$. Il s'agit donc de trouver des coefficients de relaxation $\lambda_{\mathbb{A}}$ et $\lambda_{\mathbf{B}}$, etc. Ces idées ayant été établies, nous avons commencé avec Stéphane Brull à travailler sur le premier espace non trivial, à savoir $\mathbb{E} = [1, \mathbf{v}, \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}]$. C'est l'objet du chapitre qui suit. L'interprétation de modèles déjà existants faite à partir de ce travail nous a alors ouvert de nouvelles perspectives. En s'adjoignant l'aide de Vincent Pavan, nous avons construit un nouveau modèle pour les gaz à plusieurs composantes [22] que nous décrirons dans le chapitre suivant. L'ensemble de ces travaux jette les bases de ce que nous pourrions appeler la méthode de relaxation des moments (MRM).

4.1 Une nouvelle approche du modèle ESBGK ^{BS1} [25] ^{BS2} [26]

Certes $\mathbb{E} = [1, \mathbf{v}, \mathbf{v} \times \mathbf{v}]$ n'est pas sous la forme $\mathbb{E}_{N-1} \oplus \|\mathbf{v}\|^N$, mais il présente l'avantage d'être de degré maximal 2. Ce qui veut dire que la solution du problème de minimisation sera explicite. Pour simplifier l'exposé, nous mettrons toutes les constantes physiques égales à 1 (la masse m , k_B, \dots). On se donne donc une fonction $f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ de densité n , vitesse moyenne \mathbf{u} et température T . L'ensemble des contraintes s'écrit

$$\int_{\mathbb{R}^3} (1, v, |v|^2) g dv = \int_{\mathbb{R}^3} (1, v, |v|^2) f dv, \quad (4.1.5)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \varrho(g - f) \mathbb{A}(V) dv = -\lambda \int_{\mathbb{R}^3} f \mathbb{A}(V) dv, \quad (4.1.6)$$

où

$$\mathbb{V} = \frac{v - u}{\sqrt{T}}.$$

Pour trouver ϱ et λ , on va chercher à ce que les limites hydrodynamiques des équations cinétiques avec respectivement $Q(f, f)$ et $R(f)$ comme second membre coïncident jusqu'à Navier-Stokes. Il faudra bien sûr s'assurer de la réalisabilité du problème ainsi que de la décroissance de l'entropie avec caractérisation des états d'équilibre par des Maxwelliennes. On réécrit tout d'abord la contrainte (4.1.6) sous la forme

$$\frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^3} c \otimes c g dv = \alpha \Theta + (1 - \alpha) T Id = \mathcal{T}. \quad (4.1.7)$$

où le tenseur des pressions Θ est défini par

$$\Theta = \frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^3} c \otimes c f dv, \quad c = v - u, \quad (4.1.8)$$

et $\alpha = 1 - \frac{\lambda}{\varrho}$.

Réalisabilité

th **Théorème 4.1.9.** *Soit $f \geq 0$, non nulle et dans L^1_2 (L^1 à poids), alors pour toute valeur $\alpha \in [-\frac{1}{2}, 1]$ le tenseur \mathcal{T} est symétrique défini*

positif et la solution du problème de minimisation de l'entropie sous les contraintes (4.1.5) et (4.1.7) admet une unique solution G définie par

$$G(v) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\mathcal{T})}} \exp\left(-\frac{1}{2}\langle c, \mathcal{T}^{-1}c \rangle\right). \quad (4.1.9)$$

Inversement, pour que le problème de minimisation admette une solution quelque soit f (avec les bonnes hypothèses), il faut que $\alpha \in [-\frac{1}{2}, 1]$.

Contrairement à [5] où le calcul de G est fait directement par multiplicateurs de Lagrange, on adopte ici une démarche plus proche du chapitre précédent. On a prouvé dans [104] que C_f correspond à sa fermeture dans L^1 (voir aussi [66]). C'est la condition nécessaire pour que l'on puisse effectivement utiliser des multiplicateurs de Lagrange. L'article de Vincent Pavan [95] met bien en lumière ce résultat grâce à son approche par analyse convexe. Par ailleurs on soulève un problème non évoqué jusqu'à présent. Si C_f est non vide par hypothèse dans le théorème 3.1.7, il existe un autre type de problème de réalisabilité. A savoir, quelles sont les conditions pour que C_f contiennent des fonctions positives et non nulles? Dans [66], ce problème est abordé en dimension 1 pour $\mathbb{E} = [1, v, v^2, v^3, v^4]$. L'ensemble des moments "réalisables" est identifié en faisant appel à une théorie assez élaborée [3] [4]. Dans le cas de dimension quelconque, l'identification des moments réalisables est directement reliée à celle des polynômes positifs de \mathbb{E} [67]. Ici nous prouvons par une construction "à la main" qu'étant donné $\rho = (n, \mathbf{u}, \mathcal{T})$ avec $n > 0$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ et \mathcal{T} symétrique défini positif, il existe une infinité de fonctions positives et non nulles dont les moments sont ρ .

Calcul de ϱ et λ :

On suppose le théorème H démontré et on effectue le développement de Chapman-Enskog. En notant \mathcal{L}_R l'opérateur linéarisé R , on doit donc résoudre l'équation

$$\mathcal{L}_R(g) = \mathbb{A}(V) : \mathbb{D}(\mathbf{u}) + \mathbf{B}(\mathbf{v}) \cdot \nabla_x \left(\frac{1}{T} \right), \quad (4.1.10)$$

où $\mathbb{D}(\mathbf{u})$ est le tenseur de Reynolds défini précédemment (3.2.13). Plutôt que de chercher g , on peut insérer cette équation dans l'équation (4.1.6) linéarisée et en déduire que

$$\frac{1}{10} \left(\int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{M} \langle A(V), A(V) \rangle dv \right) \mathbb{D}(u) = -\lambda \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{M} A(V) g dv,$$

(ici $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est le produit scalaire avec contraction complète). Pour retrouver la bonne viscosité μ , il suffit donc de poser

$$\lambda = \frac{nT}{\mu}, \quad (4.1.11)$$

d'où l'on déduit que la fréquence vaut

$$\varrho = \frac{\lambda}{1 - \alpha} = \frac{nT}{\mu(1 - \alpha)}. \quad (4.1.12)$$

On utilise alors une forme plus précise de l'opérateur linéarisé dans (4.1.10) que l'on multiplie par $\mathbf{B}(\mathbf{v})$. On obtient à nouveau par identification un lien entre ϱ et la conductivité thermique $\tilde{\kappa}$ de notre modèle

$$\varrho = \frac{5nT}{2\tilde{\kappa}}.$$

Ainsi le nombre de Prandtl est égal à

$$Pr = \frac{5\mu}{2\tilde{\kappa}} = \frac{\varrho}{\lambda} = \frac{1}{1 - \alpha},$$

et il suffit de poser $\alpha = -\frac{1}{2}$ pour retrouver la conductivité thermique physique κ .

Théorème H

Htheo **Théorème 4.1.10.** *Pour toute valeur de $\alpha \in [-\frac{1}{2}, 1]$, on a*

$$D(f) = \int (G_\alpha - f) \ln f \, dv \leq 0.$$

De plus $D(f) < 0$ pour $-\frac{1}{2} \leq \alpha < 1$ avec égalité si et seulement si $f = \mathcal{M}$.

Notre preuve diffère de celle de ^{ALPP} [5] qui s'appuie sur l'inégalité de Brunn-Minkowski. On remarque que $H(G_\alpha) - H(G_1)$ est du même signe que le polynôme

$$p(x) = \prod_i \theta_i + \prod_i (x(T - \theta_i) - T)$$

où $(\theta_i)_i$ sont les valeurs propres de Θ ^{theta} (4.1.8). On montre alors aisément que $p(-\frac{1}{2})$ atteint son maximum - 0 - pour $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = T$, c'est à

dire pour $G_{-1/2} = \mathcal{M}$ ce qui termine la démonstration.

Autres modèles

Bouchut et Perthame [21], puis Struchtrup [107] et enfin Mieussens et Struchtrup [83] ont construit des modèles qui permettent de retrouver le bon nombre de Prandtl en introduisant des fréquences de collision dépendantes de la vitesse relative V . Ils s'écrivent sous la forme générique

$$R(f) = \omega(|V|, T) (\mathcal{M}_\omega - f).$$

Dans les trois cas, les fréquences de collisions sont ajustées de façon à retrouver le bon nombre de Prandtl tandis que les paramètres des Maxwelliennes sont définies implicitement par les relations de conservation. L'existence de \mathcal{M}_ω est un travail assez technique dans [21] même si un principe variationnel est évoqué. Dans [107], il est même dit que \mathcal{M}_ω n'est une Maxwellienne que si la fréquence ne dépend pas de $|V|$ (ce qui se révèle être faux). Quoi qu'il en soit, on peut dans tous ces cas se ramener au principe variationnel du théorème 3.1.7. \mathbf{u} et T étant fixés, $\omega(|V|, T)dv$ est une mesure à laquelle on associe l'espace L_ω^1 des fonctions intégrable et d'énergie intégrable pour cette mesure. On définit alors l'entropie

$$\mathcal{H}_\omega(f) = \int_{\mathbb{R}^3} f (\ln f - 1) \omega(|V|, T) dv. \quad (4.1.13)$$

Le théorème 3.1.7 se généralise aisément et on a

Corollaire 1. *Soient $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^3$ et $T > 0$. Alors pour toute fonction f positive, non nulle de vitesse moyenne \mathbf{u} , température T et dans L_ω^1 , il existe une unique fonction \mathcal{M}_ω solution du problème de minimisation*

$$\mathcal{M}_\omega = \min_{g \in C_f} \mathcal{H}_\omega(g), \quad (4.1.14)$$

où

$$C_f = \{g \geq 0, \int (1, v, |v|^2) (g - f) \omega(|V|, T) d\mathbf{v} = 0\}.$$

Cette fonction s'écrit

$$\mathcal{M}_\omega(v) = \frac{n_\omega}{(2\pi T_\omega)^{3/2}} \exp\left(-\frac{(v - u_\omega)^2}{2T_\omega}\right) \quad (4.1.15)$$

où $(n_\omega, u_\omega, T_\omega)$ sont déterminés de façon unique par la relation $\mathcal{M}_\omega \in C_f$.

4.2 Modèle de Fick pour un mélange de gaz [22]

Se dessine désormais une feuille de route pour la construction de modèles à suivre. Elle passe par l'écriture formelle de contraintes de relaxation de moments, son identification via la limite fluide et enfin la construction de la (des) fonction(s) de relaxation via le problème de minimisation. Le problème de réalisabilité ainsi que l'obtention du théorème H se feront dans un second temps. Dans le cas d'un mélange de gaz, l'écriture des équations de Navier-Stokes n'est pas unique. D'un point de vue physique, les phénomènes connus sont les lois de Fick, Soret, Dufour, Fourier et Newton. Seulement, le passage de l'équation de Boltzmann à celle de Navier-stokes ne rend pas directement compte de ces lois. Nous identifions dans un premier temps la bonne formulation comme étant celle issue de la thermodynamique des processus irréversibles [80] [39]. Dans un second temps, l'obtention des coefficients et moments de relaxation se fera en utilisant les propriétés de la matrice de Onsager.

Après avoir introduit les notations, nous consacrons la première partie à établir une écriture synthétique de la matrice de Onsager à partir de l'opérateur de collision linéarisé. Nous calculons ensuite les contraintes qui nous permettront dans la troisième partie de construire le modèle de Fick. Finalement, outre une description rapide des propriétés de ce modèle, la bonne limite hydrodynamique est recalculée sous forme d'un *erratum* par rapport à la version publiée de l'article. Nous en profitons au passage pour introduire la "version" de l'équation de Navier-Stokes que nous utiliserons par la suite [111] [61] [52].

4.2.1 Notations et équation(s) de Boltzmann

On considère un gaz composé de p espèces différentes auxquelles on associe pour chacune d'elles une fonction de distribution f_i . Les quantités macroscopiques liées à cette espèce sont notées respectivement n^i , ρ^i , u^i et T^i et sont successivement le nombre de molécules par unité de volume, la masse volumique $\rho^i = m_i n^i$ où m_i est la masse de la molécule, la vitesse moyenne et enfin la température. Leurs définitions à partir de la fonction $f_i(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ est usuelle. Les quantités macroscopiques

pour le gaz sont définies par

$$\begin{aligned} n &= \sum_{k=1}^p n^k, \quad \rho = \sum_{k=1}^p \rho^k, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^p \rho^k \mathbf{u}^k, \\ E &= \mathcal{E} + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{u}\|^2 = \sum_{k=1}^p \left(\frac{3}{2} n^k k_b T^i + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{u}^i\|^2 \right), \quad \mathcal{E} = \frac{3}{2} k_B T. \end{aligned} \quad (4.2.16) \quad \text{macro1}$$

L'équation de Boltzmann s'écrit

$$\forall i \in [1, p], \quad \partial_t f_i + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i = Q_i(\mathbf{f}), \quad (4.2.17)$$

où nous ne détaillons pas l'écriture des termes de collisions (voir par exemple [39] [61]). Les invariants de collisions sont les vecteurs $\boldsymbol{\phi}^l, l \in [1, p+4]$ définis par

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} m_1 v_x \\ m_2 v_x \\ \vdots \\ m_p v_x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} m_1 v_y \\ m_2 v_y \\ \vdots \\ m_p v_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} m_1 v_z \\ m_2 v_z \\ \vdots \\ m_p v_z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} m_1 \mathbf{v}^2 \\ m_2 \mathbf{v}^2 \\ \vdots \\ m_p \mathbf{v}^2 \end{pmatrix},$$

et on note \mathbb{K} l'espace engendré par ces vecteurs. L'entropie H associée aux équations (4.2.17) s'écrit

$$H(\mathbf{f}) := \sum_{i=1}^{i=p} \int_{\mathbb{R}^3} (f_i \ln(f_i) - f_i) d\mathbf{v}.$$

et on note $\mathbf{M} = (\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_p)$ la liste des Maxwelliennes

$$\forall i \in [1, p], \quad \mathcal{M}_i = \frac{n^i}{(2\pi k_B T / m_i)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{m_i (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2k_B T}\right), \quad (4.2.18) \quad \text{maxw}$$

qui caractérisent les états d'équilibre et annulent la dissipation d'entropie. Finalement, pour toute liste de fonctions $\boldsymbol{\Psi}$ et $\boldsymbol{\Phi}$, on introduit le produit scalaire

$$\langle \boldsymbol{\Psi}, \boldsymbol{\Phi} \rangle = \sum_{i=1}^{i=p} \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \phi_i \mathcal{M}^i dv, \quad (4.2.19)$$

qui se généralise à toute liste de tenseurs en appliquant une contraction complète.

4.2.2 Sur le lien entre Boltzmann et Onsager

Bien que l'obtention des équations de Navier-Stokes pour les gaz multi-espèces ne soit pas nouvelle [33] [111] [61] - notamment celle qui permet d'obtenir la formulation thermodynamique [39]- nous revisitons celle-ci à l'aide d'outils "modernes". Rappelons tout d'abord la formulation thermodynamique de ces équations.

$$\begin{aligned}\forall i \in [1, p], \partial_t n^i + \nabla \cdot (n^i \mathbf{u} + \mathbf{J}_i) &= 0, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbb{P} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \mathbb{J}_u) &= 0, \\ \partial_t E + \nabla \cdot (E \mathbf{u} + \mathbb{P}[\mathbf{u}] + \mathbb{J}_u[\mathbf{u}] + \mathbf{J}_q) &= 0,\end{aligned}\tag{4.2.20} \quad \text{ns}$$

où les flux sont définis par

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_i &= \sum_{j=1}^{j=p} L_{ij} \nabla \left(\frac{\mu_j}{T} \right) + L_{i\mathbf{q}} \nabla \left(-\frac{1}{T} \right), \\ \mathbf{J}_q &= \sum_{j=1}^{j=p} L_{qj} \nabla \left(\frac{-\mu_j}{T} \right) + L_{q\mathbf{q}} \nabla \left(-\frac{1}{T} \right), \\ \mathbb{J}_u &= L_{uu} \mathbb{D}(\mathbf{u}),\end{aligned}\tag{4.2.21} \quad \text{fluxaffinity}$$

et μ_i est le potentiel chimique de l'espèce i

$$\frac{\mu_i}{T} = k_B \left(\ln(n_i) - \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi k_B T}{m_i} \right) \right).\tag{4.2.22} \quad \text{mui}$$

Pour obtenir ces équations à partir de l'équation de Boltzmann, nous généralisons une interprétation des équations d'Euler due à Levermore. On réécrit l'ensemble des Maxwelliennes \mathbf{M} sous la forme

$$\forall i \in [1, p], \mathcal{M}_i = \exp \left(\left(\frac{\mu_i}{k_B T} - m_i \frac{\mathbf{u}^2}{2k_B T} \right) + \frac{\mathbf{u}}{k_B T} \cdot m_i \mathbf{v} - \frac{m_i \mathbf{v}^2}{2k_B T} \right),\tag{4.2.23} \quad \text{expcoef}$$

de telle sorte que pour n'importe quel opérateur de dérivation ∂ on a

$$\forall i \in [1, p], \partial \mathcal{M}_i = \mathcal{M}_i \partial (\alpha_i + \beta \cdot m_i \mathbf{v} + \gamma m_i \mathbf{v}^2) \equiv \mathcal{M}_i \partial V_i,$$

où les valeurs de $(\alpha_i)_i$, β et γ sont explicitement définies à partir de (4.2.23). On constate immédiatement que le vecteur $\partial \mathbf{V} = (\partial V_1, \dots, \partial V_p)$ est un élément de \mathbb{K} . L'équation d'Euler s'écrit alors de manière synthétique

$$\langle \partial_t \mathbf{V} + \mathbf{v} \cdot \nabla_x \mathbf{V}, \phi^k \rangle = 0, \quad \forall k \in [1, p+4].$$

Autrement dit, la projection de $\mathbf{v} \cdot \nabla_x \mathbf{V}$ sur \mathbb{K} est l'inverse de celle de $\partial_t \mathbf{V}$ qui appartient à \mathbb{K} . On en déduit que la perturbation $\mathcal{M}\mathbf{g}$ d'ordre ε dans le développement de Chapman-Enskog vérifie l'équation

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_B(\mathbf{g}) &= (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) \mathbf{v} \cdot \nabla_x \mathbf{V}, \\ &= \sum_{j=1}^{j=p} k_B^{-1} (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) (\mathbf{C}_j) \cdot \nabla \left(\frac{\mu_j}{T} \right) + \mathbb{A} : \mathbb{D}(\mathbf{u}) + \mathbf{B} \cdot \nabla \left(-\frac{1}{T} \right), \end{aligned} \quad (4.2.24) \quad \text{order0}$$

où $\mathcal{L}_B := (\mathcal{L}_{B,1}, \dots, \mathcal{L}_{B,p})$ est l'opérateur de Boltzmann linéarisé et \mathbb{A} et \mathbf{B} sont les listes de tenseurs dont les composantes sont

$$\begin{aligned} (\mathbb{A})_i &= \frac{m_i}{k_B T} \left[(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{u}) - \frac{1}{3} \|\mathbf{v} - \mathbf{u}\|^2 \mathbb{I} \right], \\ (\mathbf{B})_i &= (\mathbf{v} - \mathbf{u}) \left[\frac{1}{2} m_i (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 - \frac{5}{2} k_B T \right]. \end{aligned}$$

Enfin \mathbf{C}_j est la liste de vecteurs dont la j^{eme} composante est $\mathbf{v} - \mathbf{u}$ et les autres 0. En plus de \mathbb{A} et \mathbf{B} , on voit ainsi apparaître un nouvel espace orthogonal à \mathbb{K} qui va jouer une importance capitale.

mathC **Définition 4.2.2.**

$$\mathbb{C} = [(\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) \mathbf{C}_1, \dots, (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) \mathbf{C}_p]. \quad (4.2.25) \quad \text{spaceC}$$

De (4.2.24) on tire une écriture synthétique de la matrice de Onsager.

diff **Proposition 2.**

$$L_{ij} = \frac{1}{3} k_B^{-1} \langle \mathcal{L}_B^{-1} [(\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) (\mathbf{C}_i)], (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) (\mathbf{C}_j) \rangle, \quad (4.2.26)$$

$$L_{iq} = L_{qi} = \frac{1}{3} \langle \mathcal{L}_B^{-1} (\mathbf{B}), (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) (\mathbf{C}_i) \rangle, \quad (4.2.27)$$

$$L_{uu} = \frac{1}{10} \langle \mathcal{L}_B^{-1} (\mathbb{A}), \mathbb{A} \rangle, \quad (4.2.28)$$

$$L_{qq} = \frac{1}{3} \langle \mathcal{L}_B^{-1} (\mathbf{B}), \mathbf{B} \rangle. \quad (4.2.29)$$

Et puisque \mathcal{L}_B est auto-adjoint et négatif sur \mathbb{K}^\perp , la matrice de Onsager est symétrique négative et son noyau est engendré par $(m_1, \dots, m_p, 0)^T \in \mathbb{R}^{p+1}$.

Les propriétés de la matrice de Onsager reposent entièrement sur celles de $(Q_i(\mathbf{f}))_i$ et de l'opérateur linéarisé \mathcal{L}_B . Nous définissons ainsi une classe d'opérateurs qui permettent de reproduire "proprement" ce passage cinétique \rightarrow macroscopique.

Définition 4.2.3. *Un opérateur \mathcal{R} est dit proprement défini si*

1. son espace d'invariants de collision est \mathbb{K} ,
2. il vérifie le théorème H,
3. les états d'équilibre sont caractérisés par les Maxwelliennes,
4. son opérateur linéarisé \mathcal{L}_R a pour noyau \mathbb{K} et est auto-adjoint, symétrique et négatif sur \mathbb{K}^\perp .

Il est important de remarquer qu'un opérateur proprement défini ne redonne pas à priori la bonne matrice de Onsager. Seules les propriétés de celle-ci sont conservées.

4.2.3 Construction de l'opérateur de Fick

Avant de définir cet opérateur sur les bases que nous avons énoncées, attardons nous sur l'interprétation de cette méthode de relaxation sur les moments. Il s'agit moins de dire "nous voulons retrouver la bonne limite hydrodynamique" que d'essayer de s'approcher au plus près de l'opérateur de Boltzmann. Mais les limites imposées au début du chapitre 4 sont celles de la linéarité. Du coup, l'opérateur que nous construisons est plus proche de \mathcal{L}_B que de $(Q_i(\mathbf{f}))_i$. D'une certaine façon, notre construction reproduit au niveau cinétique ce qui est issu de la théorie des petites perturbations en physique statistique [73]. Nous nous limitons maintenant à n'imposer des contraintes que sur les moments relatifs à l'espace \mathbb{C}

$$\varrho \sum_{j=1}^{j=p} \int_{\mathbb{R}^3} (G_j - f_j) \mathbf{w}_{r,j} = -\lambda_r \sum_{j=1}^{j=p} \int_{\mathbb{R}^3} f_j \mathbf{w}_{r,j}, \quad r = 1, \dots, p-1, \quad (4.2.30)$$

(la contrainte portant sur le p -ième moment doit juste traduire la conservation de la quantité de mouvement). En vertu de la proposition 2, la recherche de ces moments ne pourra s'appuyer que sur la connaissance de $(L_{ij})_{i,j=1,\dots,p}$ ou de façon équivalente sur la loi de Fick. Si $(L_{ij})_{i,j=1,\dots,p}$ est donné soit par une approximation, soit par des valeurs expérimentales, la seule condition requise est que cette matrice

bgkrel

soit symétrique négative avec un noyau engendré par (m_1, \dots, m_p) . Toute notre construction repose sur ces propriétés. Le programme est identique à celui de l'interprétation des modèles ESBGK : identifier les contraintes (4.2.30) linéarisées avec la loi recherchée. On suppose au préalable que $\mathbf{R}(\mathbf{f})$ est proprement défini et que $\mathcal{L}_R^{-1}(\mathbb{C}) \perp \mathbf{B}$. On peut alors toujours écrire $\mathbf{w}_r = \sum \alpha_{r,s} \mathbf{C}_s$ (avec une condition ad-hoc sur $(\alpha_{r,s})_s$ pour tout $r < p$). En introduisant d'une part l'équation vérifiée par la perturbation (4.2.24) dans le membre de gauche de l'équation (4.2.30) et d'autre part la loi de Fick dans le membre de droite, on obtient, en tenant compte du fait que l'égalité doit être valable pour toutes des valeurs quelconques des $\nabla(\mu_j/T)$, les égalités suivantes

$$k_B^{-1} \alpha_{rj} \|\mathbf{C}_j\|^2 = -\lambda_r \sum_{s=1}^p \alpha_{rs} L_{sj}, \quad \forall r = 1, \dots, p-1, j = 1, \dots, p \quad (4.2.31) \quad \text{lin1}$$

que l'on complète avec

$$0 = \sum_{s=1}^p \alpha_{ps} L_{sj}, \quad \forall j = 1, \dots, p. \quad (4.2.32) \quad \text{lin2}$$

Remarquons que l'on obtient une écriture symétrique de ces équations en posant $\alpha_{rj} = W_{rj} / \|\mathbf{C}_j\|$. Cette formulation fait alors apparaître la matrice L^* définie par

$$L_{ij}^* := \frac{k_B L_{ij}}{\|\mathbf{C}_i\| \|\mathbf{C}_j\|}, \quad (4.2.33) \quad \text{Lstar}$$

ainsi que la matrice W . L^* possède les mêmes propriétés que L (réduite à ces $(p-1) \times (p-1)$ éléments) de sorte que (4.2.31) (4.2.32) sont l'expression de la diagonalisation de L^* par une matrice orthonormale W . Les moments à relaxer s'écrivent alors

$$\mathbf{w}_r = \sum_{s=1}^p W_{rs} \frac{\mathbf{C}_s}{\|\mathbf{C}_s\|}, \quad r = 1, \dots, p-1, \quad \mathbf{w}_p = \sum_s \sqrt{\frac{\rho_s}{\rho}} \frac{\mathbf{C}_s}{\|\mathbf{C}_s\|} \in \mathbb{K} \quad (4.2.34) \quad \text{wrelax}$$

tandis que les coefficients de relaxation sont associés aux valeurs propres $(d_r^*)_r$ de L^* par les relations

$$\lambda_r = -(d_r^*)^{-1} \quad \forall r = 1, \dots, p-1, \quad \lambda_p = 0. \quad (4.2.35) \quad \text{coefrelax}$$

On vérifie aisément que pour tout $r < p$, le moment $\mathbf{w}_r \in \mathbb{C}$ par orthonormalité de la matrice W et de la base $(\mathbf{C}_i / \|\mathbf{C}_i\|)_i$.

4.2.4 Réalisabilité et définition de $\mathcal{R}(f)$

Aux contraintes (4.2.30) s'ajoutent les lois de conservation

$$\forall l \in [1, p+4], \quad \sum_{i=1}^{i=p} \int_{\mathbb{R}^3} R_i(\mathbf{f}) \phi_i^l d\mathbf{v} = 0. \quad (4.2.36) \quad \boxed{\text{K}}$$

On écrit

$$R_i(\mathbf{f}) = \varrho(G_i - f_i), \quad i = 1, \dots, p$$

et sans avoir encore évoqué le problème de minimisation de l'entropie, on est amené à vérifier si l'ensemble C_f des fonctions qui vérifient l'ensemble des contraintes contient des ensembles de fonctions (g_1, \dots, g_p) positives et non nulles. Les contraintes (4.2.30) permettent d'établir une relation entre $\bar{\mathbf{U}} = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^p)^T$ et $\underline{\mathbf{U}} = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p)^T$

$$\underline{\mathbf{U}} - \mathbf{U} = \mathbf{N}^{-1} \mathbf{W}^T \left(\mathbf{I} - \frac{1}{\varrho} \Lambda \right) \mathbf{W} \mathbf{N} (\bar{\mathbf{U}} - \mathbf{U}), \quad (4.2.37) \quad \boxed{\text{UU}}$$

où on a noté \mathbf{N} et Λ les matrices diagonales ayant pour termes $(\sqrt{\rho_1}, \dots, \sqrt{\rho_p})$ et $(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$. On déduit ensuite de la conservation de l'énergie que

$$\frac{3}{2} n k_B T^* = \frac{3}{2} n k_B T - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p \frac{1}{2} \rho_i (u_i - u)^2, \quad (4.2.38)$$

où on a défini la température moyenne T^* par

$$\frac{3}{2} n k_B T^* = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^p m_i \int_{\mathbb{R}^3} (v - u_i)^2 g_i dv.$$

Il suffit alors de s'assurer que T^* est strictement positive pour que C_f soit non vide. De l'équation (4.2.37), on déduit le résultat suivant.

Lemme 4.2.2. *Pour toute valeur de $\varrho \geq \max_r \lambda_r/2$, on a $T^* > 0$.*

Proposition 3. *Les fonctions qui minimisent l'entropie sous les contraintes (4.2.36) et (4.2.30) s'écrivent*

$$\forall i \in [1, p], \quad G_i = \frac{n^i}{(2\pi k_B T^*/m_i)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_i (\mathbf{v} - \mathbf{u}_i)^2}{2k_B T^*}\right), \quad (4.2.39) \quad \boxed{\text{G}}$$

où T^* est défini par (4.2.38) et (4.2.37).

Ce résultat définit entièrement notre modèle. Si l'on voulait en écrire proprement la démonstration, il nous faudrait généraliser le théorème 3.1.7. Disons que les contraintes s'élevant sur des polynômes d'ordre 2, nous pouvons directement exhiber la solution par multiplicateurs de Lagrange.

Remarque 5. La contrainte du lemme 4.2.2 sur la fréquence de collision porte sur l'inverse des valeurs propres de L^* , ou encore de la matrice de Fick. Les valeurs des λ_r seront d'autant plus grandes que les effets de diffusion (sur les densités) seront petits. On peut espérer que dans un certain régime, la viscosité vérifie

$$\mu \geq \frac{\max_r \lambda_r}{nk_B T} \quad (4.2.40) \quad \text{condmu}$$

auquel cas il suffit de poser comme pour le modèle BGK classique $\varrho = nk_B T / \mu$ pour retrouver la bonne viscosité à la limite hydrodynamique. On peut alors dire dans ce cas que $1/\varrho$ n'est autre que le temps de retour pour que le mélange revienne à l'équilibre thermodynamique [32].

4.3 Propriétés de l'opérateur et limite hydrodynamique

Il est clair que les lois de conservation sont respectées puisque incluses dans les contraintes. Le théorème H repose sur un argument technique et de type mathématique. Nous en donnerons une version thermodynamique plus générale dans l'article incluant la chimie. Il en est de même pour la caractérisation des états d'équilibre et on a

$$\mathbf{R}(\mathbf{f}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{G} = \mathbf{f} = \mathbf{M} \Leftrightarrow \sum_i \int (G_i - f_i) \ln f_i = 0.$$

Finalement, on peut effectuer un calcul direct pour obtenir la forme de l'opérateur linéarisé et on a

$$\mathcal{L}_R = \varrho (\mathcal{P}_{\mathbb{K}} + R \circ \mathcal{P}_{\mathbb{C}} - \mathcal{I}), \quad (4.3.41) \quad \text{Lfick}$$

où $R : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ est défini par

$$\forall r \in [1, p-1], R(\mathbf{w}_r) = \left(1 - \frac{\lambda_r}{\varrho}\right) \mathbf{w}_r.$$

On en déduit que \mathcal{L}_R est auto-adjoint négatif sur \mathbb{K}^\perp et de noyau \mathbb{K} . En conclusion l'opérateur $\mathbf{R}(\mathbf{f})$ est proprement défini et on peut maintenant procéder au calcul de la limite hydrodynamique de notre modèle. Nous allons maintenant corriger une erreur commise dans [22] et aussi dans [27].

4.3.1 Erratum

erratum

En réalité, le calcul de $(\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) \mathbf{v} \cdot \nabla_x \mathbf{V}$ donne $\tilde{\mathbf{B}}$ et non \mathbf{B} dans (4.2.24) où $\tilde{\mathbf{B}}$ est défini par

$$\tilde{\mathbf{B}}_i = m_i(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \left(\frac{1}{2}(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 - \frac{5nk_B T}{2\rho} \right). \quad (4.3.42) \quad \text{tildeB}$$

Bien qu'appartenant à \mathbb{K}^\perp , ce vecteur n'est pas dans \mathbb{C}^\perp (voir définition 4.2.2). Ce qui veut dire par exemple que l'on a pas

$$\mathbf{J}_i = \sum_{j=1}^p L_{ij} \nabla \left(\frac{\mu_j}{T} \right),$$

contrairement à ce qui a été écrit dans notre article. Il manque donc un terme en $\nabla(1/T)$. Les vecteurs $(\mathbf{w}_r)_r$ et les coefficients $(\lambda_r)_r$ restent inchangés puisque calculés sur la seule connaissance de $(L_{ij})_{i,j=1,\dots,p}$. Mais ils ne sont pas explicites et le calcul de $\mathcal{L}_R^{-1}(\tilde{\mathbf{B}})$ peut s'avérer difficile. Nous proposons de contourner cette difficulté en utilisant le lien qui unit la formulation thermodynamique à celle où (voir par exemple [61] [52])

$$m_i \mathbf{J}_i = - \sum_{j=1}^p \rho^i D_{ij} \frac{\nabla p_j}{p} - \rho^i \theta_i \frac{\nabla T}{T}, \quad \forall i \in \{1; p\}. \quad (4.3.43) \quad \text{fluxgio}$$

Le lien entre ces deux formulations a été établi par Kurochkin, Makarenko and Tirskaa [69] et consiste essentiellement à trouver comment passer d'un jeu de variable à l'autre. La matrice de diffusion $D = (D_{ij})_{i,j=1,\dots,p}$ est directement reliée à $(L_{ij})_{i,j=1,\dots,p}$ par la relation

$$D_{ij} = - \frac{nk_B L_{ij}}{n^i n^j}, \quad (4.3.44) \quad \text{DL}$$

(attention, les relations établies dans [69] valent pour les flux de masses volumique). D'un autre côté, les coefficients de diffusion thermique valent

$$n^i \theta_i = \frac{5}{2} k_B \sum_{k=1}^p L_{ik} - \frac{1}{T} L_{i\mathbf{q}}.$$

L'intérêt est que

$$\theta_i = \frac{1}{3} \langle \Psi^{D_i}, \mathcal{L}_R^{-1}(\mathbf{B}) \rangle,$$

où l'ensemble des vecteurs Ψ^{D_i} sont définis par

$$\Psi_j^{D_i} = \frac{1}{p_j} \left(\delta_{ij} - \frac{\rho_j}{\rho} \right) (\mathbf{v} - \mathbf{u}), \quad i = 1, \dots, p. \quad (4.3.45) \quad \text{psiD}$$

Mais $\Psi^{D_i} \in \mathbb{C}$ et donc $\theta_i = 0$. On en déduit que

$$\tilde{L}_{i\mathbf{q}} = \tilde{L}_{\mathbf{q}i} = \frac{5}{2} k_B T \sum_{j=1}^{j=p} L_{ij},$$

qui remplace la vraie valeur (4.2.27) dans (4.2.21). On peut encore écrire en terme de flux de masse volumique

$$m_i \mathbf{J}_i = - \sum_{j=1}^p \rho^i D_{ij} \frac{\nabla p_j}{p}. \quad (4.3.46)$$

Par le même type de calcul, la vraie valeur de $L_{\mathbf{q}\mathbf{q}}$ (4.2.29) doit être remplacée par

$$\tilde{L}_{\mathbf{q}\mathbf{q}} = - \frac{5 k_B^2 T^3}{2 \varrho} \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{m_i} + \left(\frac{5 k_B^2 T}{2 \varrho} \right)^2 \sum_{i,j=1}^p L_{ij},$$

et on peut aussi écrire

$$\mathbf{J}_{\mathbf{q}} = -\hat{\lambda} \nabla T + \sum_{i=1}^p h_i m_i \mathbf{J}_i, \quad (4.3.47)$$

où la conductivité thermique partielle $\hat{\lambda}$ et les enthalpies spécifiques $(h_i)_i$ valent

$$\hat{\lambda} = \frac{5 k_B^2 T}{2 \varrho} \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{m_i}, \quad h_i = \frac{5 k_B T}{2 m_i} \quad \forall i.$$

4.3. PROPRIÉTÉS DE L'OPÉRATEUR ET LIMITE HYDRODYNAMIQUE 59

Finalement

$$\mathbb{J}_{\mathbf{u}} = -\tilde{\mu}\mathbb{D}(\mathbf{u}) \quad \text{avec } \tilde{\mu} = \frac{n k_B T}{\rho}, \quad (4.3.48)$$

et on a égalité entre $\tilde{\mu}$ et la vraie viscosité μ (4.2.28) sous la condition (4.2.40).

Chapitre 5

Gaz polyatomiques avec réactions chimiques ”lentes”

5.1 Un cas simplifié ^{BS3} [27]

Nous décidons avec Stéphane Brull d’exploiter d’un côté les propriétés de notre modèle pour les mélanges et de l’autre les modèles de l’équipe de Parme ^{BS2} [59] [14] pour une collision chimique bi-moléculaire



avec un seul niveau d’énergie interne E_i par molécule. On peut trouver par exemple dans [97] le système d’équations de Boltzmann correspondant à ce système. Les collisions mécaniques sont purement élastiques et on peut donc utiliser directement le modèle de Fick. Si l’on se met dans le cadre où les temps caractéristiques des collisions mécaniques sont petits devant les temps caractéristiques chimiques, il est relativement naturel de séparer les opérateurs visant à approcher chacun des phénomènes. En l’occurrence, tirer avantage des travaux précédents et des modèles pour la chimie. On peut séparer les modèles de Spiga & al en deux groupes :

1- Modèle BGK basé sur l’approche de Andriès, Aoki et Perthame pour les molécules Maxwelliennes ^{BS1} [1]. Les contributions chimiques doivent redonner sous l’hypothèse d’équilibre thermodynamique (approximation chimie lente) les bonnes moyennes pour chaque espèce de la quantité de mouvement, de l’énergie cinétique et des taux de production moléculaires. Cependant, le modèle est mal posé (possibilité de température

négative) et le théorème H n'est valable qu'à l'équilibre thermodynamique.

2- Opérateur de type BGK construit à partir de fréquences de collision quelconques, respectant les lois de conservation et fermé par une loi d'action des masses. Caractéristiques : théorème H mais pas d'approximation des taux de production moléculaires.

A noter que ces deux types de modèle incluent phénomènes mécaniques et chimique en un seul opérateur de type BGK. Il est cependant aisé d'en effectuer un *splitting*. Nous choisissons d'ajouter au modèle de Fick le modèle de type 2 afin d'assurer la décroissance de l'entropie. Pour résumer (un peu drastiquement) l'article, la difficulté principale sera le calcul de la perturbation à l'ordre ε des termes de production chimique dans le développement de Chapman-Enskog. Il s'agit d'établir les variations des états d'équilibres thermodynamiques et chimiques dues aux variations de densités et de température.

5.2 Un modèle pour la simulation de mélanges de gaz polyatomiques raréfiés avec réactions chimiques [103]

1- Préambule

Poussons un peu plus loin l'analyse de la pertinence d'une approche cinétique basée sur [27]. Il nous faut supposer que les temps caractéristiques des collisions mécaniques et de relaxation des énergies internes sont petits devant les temps chimiques mais pas suffisamment petits devant le temps caractéristique d'évolution des variables macroscopiques. En d'autres termes, nous nous autorisons un déséquilibre un peu supérieur à celui de l'équation de Navier-Stokes. Nous voulons tirer avantage à la fois de la modélisation du régime "Boltzmann linéarisé" proposé au chapitre 4 et de la connaissance des processus chimiques à l'équilibre thermodynamique. Ce régime particulier n'inclut évidemment pas le cas de forts déséquilibres vibrationnels pour lesquels on peut, à nouveau sous certaines hypothèses concernant les nombres de Knudsen associés à chaque degré de liberté (par exemple pour les écoulements hypersoniques), revenir à des systèmes aux moments où la population de chaque niveau d'énergie de vibration pour chaque espèce hérite de sa propre équation avec notamment un terme de cinétique chimique

[89].

Dans le régime que nous traitons, il n'est pas concevable de traiter séparément les collisions chimiques, c'est à dire pour chaque niveau d'énergie interne de chaque réactif et produit, et ceci pour des raisons de coût. On ne peut donc pas additionner des modèles chimiques du type 1 ou 2. Il nous faut construire un opérateur englobant l'ensemble des collisions pour chaque réaction, capable d'approcher les taux de production moléculaire, bien posé et entropique contrairement au modèle de type 1 [59]. Il faut enfin que l'ensemble des paramètres requis pour cette construction soit calculable ou bien donné par des formules empiriques.

2- Notations et généralités

Nous adoptons des notations proches de celles du chapitre 4 mais adaptées au cas des molécules avec plusieurs niveaux d'énergie interne. On considère un mélange de gaz polyatomiques. L'ensemble des espèces est noté S . A chaque espèce i du mélange est associée une fonction de distribution $f_i(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, I)$ où l'indice muet I représente n'importe quel niveau d'énergie dans un ensemble Ω_i . La I^{eme} valeur de l'énergie interne dans ω_i est notée E_{iI} . C'est la somme du I^{eme} état d'énergie quantique et de l'énergie de formation de l'espèce i . Les densités, masses volumiques, vitesses moyennes par espèce où vitesse moyenne générale sont obtenues de la même façon que dans le chapitre 4 en ajoutant aux moyennes sur les vitesses la somme sur les ensembles de niveaux d'énergie adéquats. Par exemple, l'énergie interne \mathcal{E} par unité de volume est définie par

$$\mathcal{E} = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int \left(\frac{1}{2} m_i (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2 + E_{iI} \right) f_i(t, x, v, E_{iI}) d\mathbf{v}. \quad (5.2.2) \quad \text{Etot}$$

La notion de température générale est plus complexe. Elle est décrite via l'annulation de la production d'entropie non réactive une fois que l'espace des invariants collisionnels \mathbb{K} associé aux termes de collisions mécaniques a été identifié. Sans entrer dans les détails sur la forme de ces termes que nous noterons $S_i(f)$ (voir [111] [52]), \mathbb{K} est engendré par

l'ensemble des vecteurs $\boldsymbol{\psi}^l, l \in [1, \#S + 4]$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} m_1 v_x \\ m_2 v_x \\ \vdots \\ m_n v_x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} m_1 v_y \\ m_2 v_y \\ \vdots \\ m_n v_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} m_1 v_z \\ m_2 v_z \\ \vdots \\ m_n v_z \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{2} m_1 \mathbf{v}^2 + E_{1I} \\ \frac{1}{2} m_2 \mathbf{v}^2 + E_{2I} \\ \vdots \\ \frac{1}{2} m_n \mathbf{v}^2 + E_{nI} \end{pmatrix}.$$

On définit ensuite l'entropie physique

$$\mathcal{S}^{\text{kin}}(\mathbf{f}) = -k_{\text{B}} \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int f_i (\log(\beta_{iI} f_i) - 1) d\mathbf{v}, \quad (5.2.3) \quad \boxed{\text{Skin}}$$

où

$$\beta_{iI} = \frac{h_{\text{P}}^3}{a_{iI} m_i^3},$$

(h_{P} est la constante de Planck et a_{iI} la dégénérescence du niveau d'énergie E_{iI}). Finalement, le terme de production d'entropie liée aux chocs mécaniques s'écrit

$$\mathbf{v}^S = -k_{\text{B}} \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \int S_i(f) \log(\beta_{iI} f_i) d\mathbf{v}_i.$$

Ce dernier s'annule si et seulement si les fonctions f_i sont de la forme

$$\mathcal{M}^i = \frac{1}{\beta_{iI}} \frac{n_i}{Q_i} \exp \left\{ -\frac{m_i}{2k_{\text{B}}T} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v})^2 - \frac{E_{iI}}{k_{\text{B}}T} \right\}, \quad (5.2.4) \quad \boxed{\text{maxw}}$$

où Q_i est le produit des fonctions de partitions translationnelle

$$Q_i^{\text{tr}} = \left(\frac{2\pi m_i k_{\text{B}}T}{h_{\text{P}}^2} \right)^{3/2},$$

et de l'énergie interne

$$Q_i^{\text{int}} = \sum_{I \in \Omega_i} a_{iI} \exp \left(-\frac{E_{iI}}{k_{\text{B}}T} \right). \quad (5.2.5)$$

Ainsi, T est définie implicitement par la relation (5.2.2) en remplaçant f_i par \mathcal{M}^i pour tout $i \in S$. Plus précisément, on a

$$\mathcal{E} = \sum_{i \in S} n^i \left(\frac{3}{2} k_{\text{B}}T + \bar{E}_i(T) \right), \quad \bar{E}_i(T) = \frac{1}{Q_i^{\text{int}}(T)} \sum_{I \in \Omega_i} a_{iI} E_{iI} \exp \left(-\frac{E_{iI}}{k_{\text{B}}T} \right). \quad (5.2.6)$$

5.2. UN MODÈLE POUR LA SIMULATION DE MÉLANGES DE GAZ POLYATOMIQUES RARÉFIÉS A

Pour ce qui concerne la chimie au niveau cinétique, nous nous bornerons à quelques notions élémentaires et proposons au lecteur intéressé de lire dans un ordre historique [72] [70] [60] [52]. D'autres travaux permettent de substituer aux probabilités de collision chimique des sections différentielles (voir par exemple [75] et [42] pour les propriétés requises). Nous considérons le cas de collisions au plus triples (succession de deux collisions) et les réactions chimiques sont notées

$$\sum_{k \in \mathbf{F}^r} \mathbf{M}_k \rightleftharpoons \sum_{l \in \mathbf{B}^r} \mathbf{M}_l, \quad r \in R, \quad (5.2.7)$$

où \mathbf{F}^r et \mathbf{B}^r sont respectivement les indices des (espèces) réactifs et des produits. Dans le même ordre les coefficients stoechiométriques pour une espèce i dans cette réaction r sont ν_{ir}^b et ν_{ir}^f et on note $\nu_{ir} = \nu_{ir}^b - \nu_{ir}^f$. Même si ces coefficients sont nécessairement nuls lorsque l'espèce i n'est pas présente dans la réaction, nous introduisons pour la clarté du propos les sous-espaces S_r des réactifs et produits (comptés une seule fois) de la réaction r . Le terme source pour une espèce i correspondant à la réaction r est noté $C_i^r(f)$ et la somme de toutes les contributions $C_i(f)$. Il va de soi que les collisions chimiques respectent la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie globale mais que contrairement au cas mécanique, ce sont les masses volumiques relatives à chaque atome qui sont conservées. Si \tilde{m}_l est la masse d'un atome l et a_{il} le nombre d'atomes l dans l'espèce i , les invariants chimiques sont les masses volumiques relatives à chaque atome qui sont présentes dans le mélange

$$\tilde{\rho}_l = \tilde{m}_l \sum_{i \in S} a_{il} n^i, \quad \forall l. \quad (5.2.8)$$

Pour finir, le système d'équations de Boltzmann à résoudre est le suivant

$$\partial_t f_i + \mathbf{v} \cdot \nabla_x f_i = S_i(f) + C_i(f), \quad i \in S. \quad (5.2.9)$$

3- Modèle mécanique

La construction de $\mathcal{R}^M(\mathbf{f})$ ne varie en rien de celle opérée au paragraphe 4.2. Nous préférons toutefois opérer la première étape en se basant sur la la matrice de diffusion $D = (D_{ij})_{i,j \in S}$ (4.3.43) (paragraphe

4.3.1) plutôt que sur la matrice issue de la thermodynamique. Ainsi la construction repose sur la diagonalisation dans une base orthonormée de $D^* = -L^*$ définie via le changement de variables opéré dans [69]

$$D_{ij}^* = \frac{\sqrt{\rho_i \rho_j}}{nk_B T} D_{ij}, \quad i, j \in S. \quad (5.2.10) \quad \text{Dstar}$$

Une fois ce travail effectué, les contraintes (4.2.30) conduisent à la définition des vitesses $(\mathbf{u}_i)_{i \in S}$ (4.2.37) des fonctions relaxation $(g_i)_i$. On doit ensuite y ajouter les lois de conservation dont notamment celle de l'énergie interne

$$\mathcal{E} = \sum_{i=1}^p \frac{1}{2} \rho^i (\mathbf{u}^i - \mathbf{u})^2 + \mathcal{E}^* = \sum_{i=1}^p \frac{1}{2} \rho^i (\mathbf{u}_i - \mathbf{u})^2 + \mathcal{E}_*,$$

où

$$\mathcal{E}^* = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \frac{1}{2} m_i \int (\mathbf{v} - \mathbf{u}^i)^2 f_i d\mathbf{v}, \quad \mathcal{E}_* = \sum_{\substack{i \in S \\ I \in \Omega_i}} \frac{1}{2} m_i \int (\mathbf{v} - \mathbf{u}_i)^2 g_i d\mathbf{v}. \quad (5.2.11) \quad \text{EE}$$

Il est clair que la relation $\mathcal{E}_* \geq \mathcal{E}^*$ est une condition suffisante pour la réalisabilité du problème de maximisation de l'entropie sous les contraintes énoncées ci-dessus (cf proposition 3). Nous allons voir que cette condition est bien plus importante que cela. Nous améliorerons dans un premier temps le résultat obtenu dans le lemme 4.2.2 en utilisant l'orthonormalité de la matrice W et la relation (4.2.37). La condition optimale portant sur la fréquence de relaxation ϱ^M pour que l'inégalité sur les énergies internes ait lieu est

$$\tilde{\varrho}^M = \frac{\sum_i \lambda_i^2 \|\bar{\mathbf{V}}_i\|^2}{\sum_i \lambda_i \|\bar{\mathbf{V}}_i\|^2} \quad \text{avec} \quad \bar{\mathbf{V}} = W \mathbf{N} (\bar{\mathbf{U}} - \mathbf{U}). \quad (5.2.12) \quad \text{tvarrho}$$

Nous en tirons une première conclusion (qui d'ailleurs peut être aussi déduite du lemme 4.2.2). Le modèle est à priori bien posé dans la limite où les fonctions $(f_i)_i$ tendent vers l'équilibre thermodynamique, c'est à dire dans la limite où les termes de diffusion s'annulent ($\lambda_i \rightarrow 0$). Le deuxième intérêt pratique est d'optimiser la contrainte portant sur ϱ^M de façon à ce que si possible la fréquence de relaxation ait un sens physique. Dans le régime Boltzmann linéarisé et pour un seul gaz, le

5.2. UN MODÈLE POUR LA SIMULATION DE MÉLANGES DE GAZ POLYATOMIQUES RARÉFIÉS A

temps caractéristique τ de relaxation des énergies internes dépend de la viscosité volumique α [61]

$$\tau = \frac{3}{2p} \frac{\mathbf{c}_v}{\mathbf{c}^{\text{int}}} \alpha,$$

où \mathbf{c}^{int} et \mathbf{c}_v sont respectivement la chaleur spécifique due à l'énergie interne et la capacité calorifique à volume constant par molécule. Nous prenons ce même temps pour le mélange. Rappelons que la pression p est alors définie à partir de la masse molaire moyenne \bar{m}

$$p = \rho \frac{R}{\bar{m}} T, \quad \bar{m} = \frac{\mathcal{N} \rho}{\sum_{i=1}^4 \frac{\rho^i}{m_i}}, \quad (5.2.13) \quad \text{p}$$

où R est la constante des gaz parfaits et \mathcal{N} le nombre d'Avogadro. On pose alors

$$\varrho^M = \max \left(\frac{2}{3} \frac{p}{\alpha} \frac{\mathbf{c}^{\text{int}}}{\mathbf{c}_v}, \tilde{\varrho}^M \right), \quad (5.2.14) \quad \text{num2}$$

et en tenant compte des contraintes de conservations et de la relation (4.2.37), on obtient un résultat similaire à celui obtenu dans [22].

defickrel

Définition 5.2.4. *La maximisation de l'entropie sous les contraintes ci-dessus définit de façon unique l'ensemble de fonctions $\mathbf{M}^M = (\mathcal{M}_1^M, \dots, \mathcal{M}_p^M)$ où*

$$\mathcal{M}_i^M = \frac{1}{\beta_{iI} Q_i(T_*)} \exp \left\{ -\frac{m_i}{2k_B T_*} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_i)^2 - \frac{E_{iI}}{k_B T_*} \right\}, \quad (5.2.15) \quad \text{maxG}$$

et T_* est défini implicitement par la relation

$$\mathcal{E}_* = \sum_{i \in S} n^i \left(\frac{3}{2} k_B T_* + \bar{E}_i(T_*) \right), \quad (5.2.16)$$

(voir (5.2.6)). L'opérateur $\mathcal{R}^M(\mathbf{f})$ s'écrit alors

$$\mathcal{R}^M(\mathbf{f}) = \varrho^M (\mathbf{M}^M - \mathbf{f}). \quad (5.2.17) \quad \text{fickop}$$

freq

Remarque 6. *La construction même du modèle mécanique impose pour l'instant un unique temps de retour vers l'équilibre pour l'ensemble des molécules. Ceci est un handicap lorsqu'il s'agit de comparer ce temps aux temps caractéristiques de chaque réaction chimique. On peut évidemment imposer en plus de (5.2.14) que ϱ^M soit supérieur à toutes*

les fréquences de collisions mécaniques ϱ_r^M pour que l'hypothèse d'une chimie lente soit à coup sûr vérifiée. Le modèle proposé dans [1] tient compte de ces différentes fréquences mais n'est valable que pour les molécules Maxwelliennes. De plus, son essence est bien loin de celle des MRM. Il serait donc intéressant d'étudier la possibilité d'inclure différentes fréquences de collisions dans le cadre des méthodes proposées au chapitre 4.

Le dernier point que nous allons évoquer pour le modèle mécanique est celui du théorème H.

Théorème 5.2.11. *Le modèle mécanique vérifie le théorème H avec caractérisation des états d'équilibre par les fonctions $(\mathcal{M}^i)_i$ (5.2.4) si et seulement si $\mathcal{E}_* \geq \mathcal{E}^*$.*

Nous voulons donner ici une interprétation thermodynamique de ce théorème. En premier lieu, l'entropie des fonctions $(f_i)_{i \in S}$ et des fonctions $(\mathcal{M}_i^M)_{i \in S}$ (5.2.15) ne dépend pas de la vitesse moyenne de chacune de ces fonctions. Une fois que la conservation de la quantité de mouvement est respectée entre ces deux ensembles, ces fonctions peuvent être assimilés à des ensembles où toutes ces vitesses sont nulles. On maximise dans un premier temps l'entropie pour le premier ensemble de fonctions sous les contraintes de densité, vitesse moyenne nulle pour chaque fonction et énergie interne \mathcal{E}^* fixées. On obtient ainsi un premier état du mélange caractérisé par des fonctions à l'équilibre thermodynamique \mathbf{M}^* . De façon identique, on obtient pour les mêmes conditions avec énergie interne \mathcal{E}_* un deuxième système à l'équilibre \mathbf{M}_* . L'entropie de chacun de ces états du mélange peut être comparée grâce au second principe de la thermodynamique

$$\mathbb{D}\mathcal{S} = \frac{1}{T}\mathbb{D}\mathcal{E} - \sum_{i \in S} \frac{g_i}{T}\mathbb{D}\rho^i, \quad (5.2.18)$$

où $g_i = (k_B T / m_i) \ln(n^i / Q_i)$ sont les fonctions de Gibbs spécifiques et \mathbb{D} la dérivée totale. Ici, l'entropie comme l'énergie interne sont des fonctions thermodynamiques construites à partir de \mathcal{S}^{kin} (5.2.3) appliquée aux états d'équilibre (voir [52]). Cette forme différentielle étant totale exacte, on peut l'intégrer sur le chemin $\gamma(t) = (1-t)A + tB$ pour $t \in [0, 1]$ avec $A = (\mathcal{E}^*, (\rho^i)_i)$ et $B = (\mathcal{E}_*, (\rho^i)_i)$. On obtient ainsi

$$\mathcal{S}(B) - \mathcal{S}(A) = \int_{\gamma} d\mathcal{S} = \int_0^1 \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \mathcal{E}}(\gamma(t)) (\mathcal{E}_* - \mathcal{E}^*) dt = (\mathcal{E}_* - \mathcal{E}^*) \int_0^1 \frac{1}{T(\gamma(t))} dt,$$

d'où la CNS du théorème.

4- Chimie

Comme nous l'avons mentionné en préambule, l'hypothèse d'une chimie lente au regard des phénomènes mécaniques nous amène comme dans [59] à approcher les taux de production moléculaires par $\sum_{I \in \Omega_i} \int C_i^r(\mathbf{M}) d\mathbf{v}$. Sans rentrer dans les détails, cette approximation n'est compatible avec les lois de conservation chimiques que si l'on ne traite qu'une réaction. Lorsqu'il y a plusieurs réactions, il n'y a aucune raison pour que les valeurs moyennées sur ensemble S_r donné correspondent à celles des Maxwelliennes issues d'un processus de relaxation vers des états d'équilibre globaux. Plus précisément, la vitesse moyenne \mathbf{u}^r et l'énergie interne \mathcal{E}^r définies par

$$\begin{aligned} \rho^r &= \sum_{i \in S_r} \sum_{I \in \Omega_i} \int m_i f_i d\mathbf{v}, \\ \rho^r \mathbf{u}^r &= \sum_{i \in S_r} \sum_{I \in \Omega_i} \int m_i \mathbf{v} f_i d\mathbf{v}, \\ \frac{1}{2} \rho^r |\mathbf{u}^r|^2 + \mathcal{E}^r &= \sum_{i \in S_r} \sum_{I \in \Omega_i} \int (\frac{1}{2} m_i \mathbf{v}^2 + E_{iI}) f_i(t, x, v, E_{iI}) d\mathbf{v}, \end{aligned} \tag{5.2.19} \quad \text{macror}$$

ne correspondent en pas à celles que l'on obtiendrait en remplaçant les fonctions de distribution $(f_i)_{i \in S_r}$ par $(\mathcal{M}_i)_{i \in S_r}$. Par exemple $\mathbf{u}^r \neq \mathbf{u}$ en général. A l'approximation $\sum_{I \in \Omega_i} \int C_i^r(\mathbf{M}) d\mathbf{v}$ nous substituons donc une seconde approximation $\sum_{I \in \Omega_i} \int C_i^r(\mathbf{M}^r) d\mathbf{v}$ où les Maxwelliennes $(\mathcal{M}_i^r)_{i \in S_r}$ ne dépendent que des valeurs ci-dessus.

Un autre problème évoqué pour les modèles BGK de type 1 cherchant à approcher les taux de production moléculaire ainsi que d'autres moments de $C_i^r(\mathbf{f})$ est celui du théorème H. Nous pensons qu'il ne peut pas être prouvé (et n'est d'ailleurs pas vrai) car les fonctions de relaxation ne respectent pas les lois de conservation chimique. Un moyen de contourner cette difficulté est de n'introduire qu'une fréquence de relaxation pour l'ensemble des espèces présentes dans la réaction r . La réponse que nous apportons aux contraintes : approximation du taux de production moléculaire + production d'entropie consiste à introduire séparément pour chaque réaction le système d'équations qui la décrit dans un cadre homogène, à l'énergie interne \mathcal{E}^r constante et à l'équilibre

thermodynamique

$$\begin{cases} d_s \rho_i(s) = m_i \nu_{ir} \bar{\tau}_r(s), & \forall i \in S_r, \\ \rho_i(0) = m_i n^i(t, \mathbf{x}), \\ \mathcal{E}^r(s) = \mathcal{E}^r(t, \mathbf{x}), & \forall s \geq 0. \end{cases} \quad (5.2.20) \quad \text{hom}$$

$\bar{\tau}_r(s)$ est le taux de progression "Maxwellien" (ou encore à l'ordre 0) de la réaction r . Ce taux dépend à chaque instant de $n_i(s)$ et de la température $T_r(s)$ qui est définie implicitement par une équation du type (5.2.6). La progression de la réaction r au temps s est au signe près

$$\xi^r(s) = \int_0^s \bar{\tau}_r(u) du.$$

En considérant les densités $n_i(s)$, solutions de (5.2.20) à l'instant s

$$n_i = n^i + \nu_{ir} \xi^r(s), \quad \forall i \in S_r, \quad (5.2.21) \quad \text{solhom}$$

et les Maxwelliennes

$$\mathcal{M}_i^r(s, \mathbf{v}) = \frac{1}{\beta_{iI}} \frac{n_i}{Q_i(T_r(s))} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{m_i (\mathbf{v} - \mathbf{u}^r)^2}{k_B T_r(s)} - \frac{E_{iI}}{k_B T_r(s)} \right\}, \quad i \in S_r, \quad (5.2.22)$$

nous proposons dans un premier temps le modèle suivant

$$\mathcal{R}_i^r(f_i) = \frac{\bar{\tau}_r(0)}{\xi^r(s)} (\mathcal{M}_i^r - f_i). \quad (5.2.23) \quad \text{modelr}$$

On a pour tout $s > 0$ et pour tout $i \in S_r$

$$\sum_{I \in \Omega_i} \int \mathcal{R}_i^r(f_i) d\mathbf{v} = \nu_{ir} \bar{\tau}_r((n^i), \mathcal{E}^r) = \sum_{I \in \Omega_i} \int C_i^r(\mathbf{M}^r) d\mathbf{v}.$$

Les lois de conservation, et notamment celles des densités des masses atomiques sont respectées par construction. La production d'entropie est une conséquence immédiate du fait que pour chaque réaction, l'entropie \mathcal{S}^{kin} (5.2.3) appliquées aux Maxwelliennes $(\mathcal{M}_i^r(s, \mathbf{v}))_{i \in S_r}$

$$\mathcal{S}^{\text{kin},r}(\mathbf{M}^r) = \sum_{i \in S_r} n_i \left(\frac{5}{2} k_B + \frac{\bar{E}_i}{T_r} - k_B \log \frac{n_i}{Q_i(T_r)} \right), \quad (5.2.24)$$

5.2. UN MODÈLE POUR LA SIMULATION DE MÉLANGES DE GAZ POLYATOMIQUES RARÉFIÉS A

est l'entropie du système (5.2.20). Le choix de s est plus délicat. Il faudrait en principe considérer le temps caractéristique de la réaction la plus rapide et celui de la variation des variables macroscopiques. En procédant de la sorte, l'ensemble des modèles construits ci-dessus aurait un sens global : une sorte de splitting du système homogène global (càd de type (5.2.20)) traduisant l'évolution de toutes les masses volumiques dues aux réactions chimiques ($\mathcal{E}(t, \mathbf{x})$ étant fixé). Malheureusement, les déséquilibres par rapport aux Maxwelliennes globales (\mathcal{M}^i) _{$i \in S$} (5.2.4) engendrent des termes de relaxations parasites du type

$$\sum_{I \in \Omega_i} \int m_i \mathbf{v} \mathcal{R}_i^r(\mathbf{f}) d\mathbf{v} = m_i \mathbf{u}^r \nu_{ir} \bar{\tau}_r(0) + \frac{\bar{\tau}_r(0)}{\xi^r(s)} \rho^i(\mathbf{u}^r - \mathbf{u}^i),$$

$$\boxed{\text{R}\equiv} \quad \mathbf{u}^r \frac{d\rho^i}{ds}(0) + \frac{\bar{\tau}_r(0)}{\xi^r(s)} \rho^i(\mathbf{u}^r - \mathbf{u}^i).$$

Afin de minimiser ces termes et faute de mieux on pose $s = +\infty$ dans (5.2.23). On note alors $\xi^r(+\infty) = \xi^{r,eq}$. Remarquons au passage que $\bar{\tau}_r(0)/\xi^{r,eq}$ n'est pas une fréquence de collision. C'est le taux exact de "relaxation" à l'instant 0 de la concentration massique $\rho_i(0)$ de chaque espèce $i \in S_r$ vers sa valeur à l'équilibre chimique. Sans entrer dans les détails, on prouve le résultat de stabilité

$$\lim_{\xi^{r,eq} \rightarrow 0} \frac{\bar{\tau}_r(0)}{\xi^{r,eq}} = \alpha^{r,eq} < +\infty,$$

où $\alpha^{r,eq}$ ne dépend que des valeurs macroscopiques à l'équilibre. Il faut comprendre cette limite comme étant celle où les conditions initiales du système (5.2.20) sont proches de l'équilibre réactionnel. A nouveau, un problème se pose car $\alpha^{r,eq}$ peut être non nul pour des réactions où un réactif et un produit ne sont pas présents, c'est à dire lorsque la réaction ne peut pas se produire. On pose alors

$$\mathcal{R}_i^r(f_i) = \frac{\bar{\tau}_r(0)}{\xi^{r,eq}} H(\bar{\tau}_r) (\mathcal{M}_i^{r,eq} - f_i), \quad (5.2.25)$$

$$= \varrho^r (\mathcal{M}_i^{r,eq} - f_i), \quad (5.2.26)$$

où H est la fonction de Heaviside.

Pour finir nous proposons un seul terme chimique pour chaque espèce i qui prend en compte toutes les réactions auxquelles elle participe. Cet opérateur est construit en calculant des valeurs macroscopiques à

partir de celles des Maxwelliennes $\mathcal{M}_i^{r,eq}$ pondérées par chaque taux de réaction non nul. Par exemple

$$\begin{aligned} n_i^C &= \frac{1}{\sum_{r/ i \in S_r} \varrho^r} \sum_{r/ i \in S_r} \varrho^r \sum_{I \in \Omega_i} \int \mathcal{M}_i^{r,eq} d\mathbf{v}, \\ &= \frac{1}{\sum_{r/ i \in S_r} \varrho^r} \sum_{r/ i \in S_r} \varrho^r n_i^{r,eq}. \end{aligned} \quad (5.2.27)$$

On calcule de la même façon une vitesse \mathbf{u}_i^C et une énergie interne \mathcal{E}_i^C . A $(n_i^C, \mathbf{u}_i^C, \mathcal{E}_i^C)$ est associé une unique Maxwellienne

$$\mathcal{M}_i^C = \frac{1}{\beta_{iI}} \frac{n_i^C}{Q_i(T_i^C)} \exp \left\{ -\frac{m_i}{2k_B T_i^C} (\mathbf{v} - \mathbf{u}_i^C)^2 - \frac{E_{iI}}{k_B T_i^C} \right\}, \quad (5.2.28) \quad \boxed{\text{MiC}}$$

A nouveau T_i^C est défini implicitement par

$$\mathcal{E}_i^C = n_i^C \left(\frac{3}{2} k_B T_i^C + \bar{E}_i(T_i^C) \right). \quad (5.2.29) \quad \boxed{\text{TiC}}$$

Le modèle final s'écrit

RiC **Définition 5.2.5.**

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_i^C(f_i) &= \left(\sum_{r/ i \in S_r} \varrho^r \right) (\mathcal{M}_i^C - f_i) \\ &= \varrho_i^C (\mathcal{M}_i^C - f_i). \end{aligned} \quad (5.2.30)$$

On retrouve tout d'abord le taux de production moléculaire à l'ordre 0

$$\varrho_i^C \sum_{I \in \Omega_i} \int (\mathcal{M}_i^C - f_i) d\mathbf{v} \sum_{r/ i \in S_r} \nu_{ir} \bar{\tau}_r((n^i)_i, \mathcal{E}^r).$$

Ensuite, les propriétés de conservation de ces modèles sont identiques à celles des opérateurs chimiques $(C_i(\mathbf{f}))_{i \in S}$. Enfin la production d'entropie chimique globale est positive ou nulle puisque chaque opérateur est construit d'une part par combinaison convexe des Maxwelliennes $(\mathcal{M}_i^{r,eq})_r$ et d'autre part par maximisation de l'entropie.

5- Etude globale

Le système d'équations s'écrit maintenant

$$\partial_t f_i + \mathbf{v} \cdot \nabla_x f_i = \varrho^M (\mathcal{M}_i^M - f_i) + \varrho_i^C (\mathcal{M}_i^C - f_i), \quad \forall i \in \mathcal{S} \quad (5.2.31)$$

On caractérise dans un premier temps les états où la production d'entropie globale est nulle. Nous avons le résultat général suivant.

Htheorem
Théorème 5.2.12.

$$\mathbf{v}^{\text{kin}} = \mathbf{v}^M + \mathbf{v}^C \geq 0,$$

(ici \mathbf{v}^C est le terme de production d'entropie chimique). De plus $\mathbf{v}^{\text{kin}} = 0$ est équivalent à chacune des assertions suivantes

i) $f_i = \mathcal{M}^i$, $\forall i \in S$ et tous les taux de production chimique $\bar{\tau}_r$ sont nuls,

ii) $\varrho^M (\mathcal{M}_i^M - f_i) + \varrho_i^C (\mathcal{M}_i^C - f_i) = 0$, $\forall i \in S$.

Il est à noter que ce résultat est équivalent à celui obtenu par Giovangigli dans le cadre de la thermodynamique chimique [52]. Nous nous attaquons ensuite au calcul de la limite hydrodynamique.

Proposition 4. Le développement de Chapman-Enskog de (5.2.31) sous l'hypothèse de phénomènes mécaniques rapides (ε^{-1} devant ϱ^{ME} dans (5.2.31)) conduit au système d'équations de Navier-Stokes (vrai à $O(\varepsilon^2)$ près)

$$\partial_t \rho^i + \nabla \cdot (\rho^i \mathbf{u}) + \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{J}_i = m_i \bar{\omega}_i^0 + \varepsilon m_i \bar{\omega}_i^1,$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbb{I}) + \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{J}_u = 0,$$

$$\partial_t \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \mathcal{E} \right) + \nabla \cdot \left(\left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \mathcal{E} + p \right) \mathbf{u} \right) + \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{J}_q = 0,$$

où les flux valent

$$\mathbf{J}_i = - \sum_{j=1}^p \rho^i D_{ij} \frac{\nabla p_j}{p}, \quad i \in S,$$

$$\mathbf{J}_u = p^{\text{reac}} \mathbb{I} - \tilde{\alpha} (\nabla_x \cdot u) \mathbb{I} - \tilde{\eta} \mathbb{D}(\mathbf{u}),$$

$$\mathbf{J}_q = -\hat{\lambda} \nabla T + \sum_{i=1}^p h_i \mathbf{J}_i.$$

Ici $(D_{ij})_{ij}$ est la matrice de diffusion provenant du "vrai" opérateur de collision (Boltzmann). Les viscosités volumiques et de cisaillement dépendent de la fréquence ϱ^M

$$\tilde{\alpha} = \frac{2}{3} \frac{p}{\varrho^M} \frac{\mathbf{c}^{\text{int}}}{\mathbf{c}_v}, \quad \tilde{\eta} = \frac{p}{\varrho^M},$$

où \mathbf{c}^{int} et $\mathbf{c}_v = 3/2k_B + \mathbf{c}^{\text{int}}$ sont les capacités calorifiques spécifiques. La pression due aux réactions chimiques est définie par la formule suivante

$$p^{\text{reac}} = \frac{1}{2\varrho^M} \sum_{i \in S} \varrho_i^C (n_i^C k_B T_i^C - n^i k_B T) - \frac{k_B T}{2\varrho^M} \sum_{i \in S} \bar{\omega}_i^0 + \frac{k_B}{2\varrho^M \mathbf{c}_v} \sum_{i \in S} m_i \bar{\omega}_i^0 e_i,$$

où ϱ_i^C , n_i^C et T_i^C sont définis en (5.2.30) (5.2.27) (5.2.29) et $e_i = (\frac{3}{2}k_B T + \bar{E}_i)/m_i$ est l'énergie spécifique de l'espèce i . La conductivité thermique partielle est donnée par

$$\hat{\lambda} = k_B T \sum_{i \in S} \frac{n^i}{m_i} \left(\frac{5}{2} k_B + \frac{d\bar{E}_i}{dT} \right) = k_B T \sum_{i \in S} \frac{n^i}{m_i} \left(\frac{5}{2} k_B + \mathbf{c}_i^{\text{int}} \right).$$

Enfin, $h_i = (\frac{5}{2}k_B T + \bar{E}_i)/m_i$ est l'enthalpie spécifique de l'espèce i . En ce qui concerne les termes sources chimiques, $\bar{\omega}_i^0$ est le taux de production moléculaire à l'ordre 0

$$\bar{\omega}_i^0 = \sum_r \nu_{ir} \bar{\tau}_r = \sum_{I \in \Omega_i} \int C_i(\mathbf{M}) d\mathbf{v}.$$

La perturbation à l'ordre 1 de ce terme vaut

$$\bar{\omega}_i^1 = \sum_{r/j \in S_r} \frac{\alpha_r}{\sum_{k \in S_r} \rho_k \mathbf{c}_{vk}(T)} \nu_{jr} \frac{d\bar{\tau}_r}{dT}, \quad (5.2.32) \quad \text{limitr}$$

où \mathbf{c}_{vk} est la capacité volumique spécifique de l'espèce k et

$$\begin{aligned} \alpha_r = & -\frac{1}{\varrho^M} k_B T \left(\left(\sum_{j \in S_r} n^j \right) \frac{\mathbf{c}^{\text{int}}}{\mathbf{c}_v} - n \sum_{j \in S_r} \frac{\mathbf{c}_j^{\text{int}}}{\mathbf{c}_v} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} \\ & + \frac{1}{\varrho^M} \sum_{j \in S_r} \varrho_j^C (\mathcal{E}_j^C - \mathcal{E}_j) - \frac{1}{\varrho^M} \sum_{j \in S_r} m_j \bar{\omega}_j^0 e_j \\ & + \frac{1}{\varrho^M} \left(\sum_{j \in S} m_j \bar{\omega}_j^0 e_j \right) \times \left(\sum_{j \in S_r} \rho_j \mathbf{c}_{vj}(T) \right) / \left(\sum_{j \in S} \rho_j \mathbf{c}_{vj}(T) \right), \end{aligned}$$

5.2. UN MODÈLE POUR LA SIMULATION DE MÉLANGES DE GAZ POLYATOMIQUES RARÉFIÉS A

Quelques mots sur cette limite. L'erratum 4.3.1 sur la limite du modèle de Fick a été trouvée dans cet article. Elle concerne une notion d'orthogonalité. Il est étonnant de constater que, contrairement à la formulation (4.2.24) portant sur la perturbation \mathbf{g} et qui conduit directement à la matrice de Onsager, l'écriture de celle-ci lorsque l'on fait intervenir les gradients des pressions partielles respecte d'orthogonalité entre les différents "vecteurs" de tenseurs. Et pourtant, sans que cela ne soit jamais évoqué de façon nette (voir par exemple [11] [61]). L'annulation des coefficients de diffusion thermique pour le modèle de Fick en est une conséquence immédiate (voir la forme de l'opérateur de Fick linéarisé (4.3.41)). On peut penser dès lors penser que les premiers auteurs ont surtout voulu se "débarrasser" des fonctions de partition pour y substituer des grandeurs phénoménologiques. L'autre remarque concerne les perturbations des taux de production (5.2.32) qui, comme pour la limite obtenue en partant de l'équation de Boltzmann, font apparaître des termes en $\nabla_x \cdot u$. Le calcul de ces termes est la tâche la plus difficile. Elle nécessite d'étudier les perturbations des états d'équilibre des réactions chimiques dues aux variations de densités mais aussi d'énergie interne. C'est le travail réalisé sur les écoulements à l'équilibre chimique dans [52] qui permet de lever la grosse difficulté quand à la variation de la température par rapport à l'énergie interne (celle-ci se devait et est effectivement strictement monotone sans quoi les termes de perturbations auraient pu exploser sous certaines conditions physiques!).

6- Aspects pratiques

L'orientation vers une modélisation qui tient compte des aspects pratiques est au centre de ce travail. On pourrait objecter que le présent modèle repose sur des hypothèses physiques ad-hoc mais il n'en est rien. Il est dans la continuité des MRM dont la validité est réduite au régime Boltzmann linéarisé. Le calcul des coefficients dont dépend le modèle est fait de la façon suivante.

Pour l'opérateur mécanique : Les algorithmes et logiciel développés par Ern et Giovangigli [48] [47] permettent d'approcher la matrice de diffusion D et donc aussi D^* (5.2.10) tout en respectant les propriétés de symétrie et de positivité requises pour sa diagonalisation dans une base orthonormée. Il en est de même pour la viscosité volumique α de telle sorte qu'à chaque étape de temps et dans chaque volume de

la discrétisation en espace, l'opérateur $\mathcal{R}^M(\mathbf{f})$ (5.2.17) est entièrement défini. Il est difficile de dire sans en avoir fait l'essai si c'est le calcul des paramètres de l'opérateur ou bien son application qui coûte le plus cher.

Pour les opérateurs chimiques : Hormis "la cerise sur le gâteau" qui consiste à passer de tous les opérateurs chimiques $\mathcal{R}_i^r(f_i)$ (5.2.30) à un seul opérateur $\mathcal{R}_i^C(f_i)$ (??), la définition effective de ce dernier repose sur deux choses.

1. Remplacer les taux de progression $\bar{\tau}_r$ à l'ordre 0 par forme plus commune en chimie

$$\frac{\bar{\tau}_r}{\mathcal{N}} = K_r^f \prod_{k \in S} (\gamma^k)^{\nu_{kr}^f} - K_r^b \prod_{k \in S} (\gamma^k)^{\nu_{kr}^b}, \quad (5.2.33)$$

où $\gamma^k = n^k/\mathcal{N} = \rho^k/(\mathcal{N}m_k)$. La constante $K_r^f(T)$ peut alors être approchée par une formule empirique empreinte de la loi d'Arrhenius. Comme il est stipulé dans [52] et démontré dans [52], $K_r^b(T)$, pour être compatible avec la création d'entropie, doit alors être définie à partir de la relation $K_r^b(T) = K_r^f(T)/K_r^e(T)$ où $K_r^e(T)$ est la constante d'équilibre de la réaction r . Celle-ci dépend directement de la variation d'énergie libre de Gibbs pendant la réaction. Nous noterons symboliquement $-RT \ln K_r^e(T) = \Delta_r G$ où le second membre est calculable à partir des données physiques.

2. Le point crucial est celui du calcul des concentrations et de la température à l'équilibre pour chaque réaction r (5.2.20). r étant fixé, ces valeurs sont obtenues en maximisant l'entropie sur l'ensemble

$$X_r = \{(\rho^i + \nu_{ir} m_i x)_{i \in S_r}, \forall x \in \mathbb{R}\} \cap (\mathbb{R}^+)^{\dim S_r}, \quad (5.2.34) \quad \boxed{X}$$

où X_r est construit à partir des données initiales $(\rho^i(t, \mathbf{x}))_{i \in S_r}$ dans (5.2.20) et des lois de conservation des masses volumiques relatives à chaque atome (5.2.8) et réduites à l'ensemble S_r . A nouveau, des logiciels tels que STANJAN [106] sont dédiés à de tels calculs. Il faut cependant noter que ce n'est pas l'entropie "cinétique" $\mathcal{S}^{\text{kin},r}$ (5.2.24) qui est utilisée pour obtenir ce résultat mais l'entropie physique (i.e construite à partir de valeurs des capacités calorifiques). En cela, la production d'entropie telle qu'énoncée dans le théorème (5.2.12) peut être légèrement perturbée.

Chapitre 6

Conclusion

Nous avons vu au cours des chapitres comment et pourquoi nous en sommes venus à construire des opérateurs de relaxation. On peut évoquer parmi les difficultés rencontrées le coût de calcul, les problèmes mathématiques (stabilité de schémas), physique (conservations, production d'entropie, potentiel d'interaction quelconque, etc) mais aussi le manque de données expérimentales. On peut apparenter cette catégorie d'opérateurs au modèle BGK bien que l'approche en soit fondamentalement différente : le point de départ était bel et bien celui d'une approximation de l'opérateur de collision de type Galerkin (chapitre 3). Cette approximation se limitait malheureusement aux molécules Maxwelliennes. L'approche par relaxation des moments est une conséquence directe de cette première tentative. Elle permet en un certain sens de répondre au problème finesse de description/coût de calcul dans des situations complexes (gaz multi espèces monoatomique ou polyatomique). Comme toujours, le domaine de validité de ces opérateurs reste celui de l'équation de Boltzmann linéarisée. Hors de ce domaine et compte-tenu de la complexité du terme de collision originel, on ne peut que se réjouir de la venue de nouvelles méthodes numériques. Deux avancées typiques sont les méthodes spectrales [87] et les schémas AP [15]. Nous ne réduisons évidemment pas ces progrès à ces seuls auteurs et renvoyons le lecteur à l'article de Dimarco et Pareschi [44] pour une plus large bibliographie. Dans l'optique d'une complexité croissante des phénomènes abordés, c'est à dire en se tournant vers les mélanges de gaz avec ou sans chimie, le problème est avant tout une question de modélisation (sans exclure pour autant l'aspect numérique). Dans la continuité de nos travaux, il apparaît nécessaire d'aborder les points

suivants.

1. Simulation et comparaison avec les résultats existants.
2. Généralisation du modèle de Fick basé sur tous les coefficients de la matrice de Onsager.
3. Modèle adapté aux lois de Stefan-Maxwell.
4. Affranchissement de la condition nécessaire de réalisabilité sur la fréquence de relaxation (lemme 4.2.2 et formule (5.2.14)) pour notamment inclure la(les) bonne(s) viscosité(s).
5. Modèle(s) à plusieurs températures pour les mélanges de gaz polyatomiques.
6. Introduction de plusieurs fréquences de relaxation/collisions (i.e. une pour chaque espèce) notamment dans le cas des réactions chimiques lentes (voir remarque 6).
7. Forts déséquilibres et chimie.

Pour ce qui concerne le premier point, il semble qu'une méthode particulière avec approche Monté-Carlo pour le calcul des termes de relaxation soit envisageable [2]. Il n'est pourtant pas acquis que cette discrétisation soit compatible avec le calcul de la matrice de diffusion (représentativité des espèces suffisante?). Un cadre plus "naturel" est évidemment celui des modèles à répartition discrète des vitesses pour lesquels il s'agit essentiellement de remplacer les termes intégraux par des sommes discrètes. A première vue, cela ne semble pas poser de problème pour la construction d'opérateur BGK tel que celui de Fick. Rappelons aussi que les questions relatives aux lois de conservation et à la résolution numérique pour les MDV ont été abondamment discutées et abordées dans [99] [96] et évidemment dans [82] pour les modèles BGK. Cette approche pourrait néanmoins se heurter à la "gourmandise" des molécules polyatomique en terme de capacité mémoire, dessinant en cela une limite à l'approche cinétique pure (méthode Monté-Carlo excepté). Il n'est donc pas raisonnable de distinguer les niveaux d'énergie interne de rotation et de vibration. Impossible alors de s'attaquer aux gaz avec forts déséquilibres sur les énergies de vibration. Par contre, cela n'interdit en rien de construire des modèles à deux températures pour espérer retrouver les bonnes viscosités (point 5). En ce qui concerne la construction de modèles basés sur la connaissance de la matrice complète de Onsager ainsi qu'un modèle adapté au cadre plus général des lois de Stefan-Maxwell, des travaux sont en cours. Le premier problème

est particulièrement ardu car il nécessite d'écrire des relations de relaxation sur des moments d'ordre supérieur. La "fermeture" du modèle par minimisation de l'entropie est alors sujette au problème de réalisabilité abordé au chapitre 3, mais aussi à la difficulté de construire des schémas stables lorsque les fonctions sont proches de l'état d'équilibre. Ce dernier problème a notamment été soulevé par Junk dans sa thèse et plus récemment dans [63]. Pour finir, les points 4 et 6 sont assez techniques et des travaux sont aussi en cours.

Le dernier thème est une perspective sans idée particulière. La pertinence de modèles BGK se heurte aux forts déséquilibres et à une description de la chimie dans de telles situations. Dans le modèle présenté au chapitre 5, la non linéarité inhérente aux processus chimiques a été introduite essentiellement dans les coefficients de relaxation et le modèle présenté est limité aux régimes proches de l'équilibre thermodynamique. N'étant pas BGK-iste par conviction mais plutôt par cheminement d'idées, il faut mesurer avec beaucoup de précaution les domaines d'application d'une telle démarche. En dehors des domaines où le régime linéarisé (non chimique) est suffisant pour donner des valeurs physiques pertinentes, il faut plutôt penser en terme de première approximation. Un coût moins élevé pour se donner une idée de ce qui se passe et espérer donner des ordres de grandeur. La chimie hors équilibre est un autre problème qui relève d'autres techniques/approches. Dès lors, si les modèles cinétiques simplifiés n'ont peut-être pas leur place pour les rentrées atmosphériques, on peut au moins espérer qu'ils résisteront à l'épreuve de phénomènes moins raides.

Bibliographie

- [1] P.Andries, K.Aoki, B.Perthame, *A consistent BGK-type model for gas mixtures*, Journ.Stat.Phys., 106, No 5/6, 993-1018, 2002.
- [2] P.Andries-J.F.Bourgat-P.LeTallec-B.Perthame, *Numerical comparison between the Boltzmann and the ES BGK models for rarefied flows*. Comp.Meth.Appl.Mech.Eng. 191, 3369-3390, 2002.
- [3] N. I. Akhiezer- M. Krein, *Some Questions in the Theory of Moments*, *Transl. of Math. Monographs*, Vol. 2, 1962.
- [4] N. I. Akhiezer- M. Krein, *The classical moment problem and some related questions in analysis*, Oliver & Boyd, 1965.
- [5] P.Andries-P.LeTallec-J.P.Perlat-B.Perthame *Entropy condition for the ES BGK model of Boltzmann equation for mono and polyatomic gases*. European J.Mechanics (B fluids) 19, 813-830, 2000.
- [6] L. Arkeryd, *On the Boltzmann equation, I, II*, Arch. Rational Mech. Anal., 45, 1-34, 1972.
- [7] H. Babovsky, *A convergence proof for Nanbu's Boltzmann simulation scheme*, Eur. J. Mech., B/Fluids, 8, No 1, 41-55, 1989.
- [8] H. Babovsky- R. Illner *A convergence proof for Nanbu's simulation method for the Boltzmann equation*, SIAM J. Numer. Anal. 26, N°1, 45-65, 1989.
- [9] V.Bagland-P.Degond-M.Lemou. *Moment systems derived from relativistic kinetic equations*, J. Stat. Phys. 125, no. 3, 621-659, 2006.
- [10] C. Bourdarias, F. Bouchut, B. Perthame, *A muscl method satisfying all the numerical entropy inequalities*, Mathematics of Computation, 65, 1439-1461, 1996.
- [11] C. Baranger, J. Claudel, N. Hérouard, L. Mieussens, *Locally refined discrete velocity grids for stationary rarefied flow simulations*, J. Comput. Phys., 257(15), 572-593, 2014.

- [12] G.A.Bird. Phys. Fluids. 6, 1518, 1963.
- [13] G.A.Bird. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows*, Oxford Engineering Science Series, 42, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford University Press, 1995.
- [14] M.Bisi, M.Groppi, G Spiga, *Kinetic Problems in Rarefied Gas Mixtures*, Rarefied Gas Dynamics, 26th Symposium, American Institute of Physics, 2009.
- [15] M.Bennoune, M.Lemou, L.Mieussens, *Uniformly stable numerical schemes for the Boltzmann equation preserving the compressible Navier-Stokes asymptotics*, J. Comput. Phys. 227, no. 8, 3781-3803, 2008.
- [16] P.L.Bhatnagar-E.P.Gross-M.Krook. *A model for collision processes in gases*, Phy.Rev., 94-511, 1954.
- [17] S. Brull, L. Mieussens, *Local discrete velocity grids for deterministic rarefied flow simulations*, à paraître dans J. Comput. Phys, 2014.
- [18] A.V.Bobylev. *Exact solutions of the nonlinear Boltzmann equation and the theory of the relaxation of a Maxwellian gaz*, Teoret. Mat. Fiz. 60, no. 2, 280-310, 1984.
- [19] , L.Boltzmann. *Leçons sur la théorie des gaz*, Ed. Jacques Gabay, Gauthier-Villars, Paris, 1987.
- [20] A. Bressan, G. Crasta, B. Benedetto, *Well-posedness of the Cauchy problem for $n \times n$ systems of conservation law*, Mem. Amer. Math. Soc., vol 146,
- [21] F.Bouchut, B.Perthame., *A BGK model for small Prandtl number in the Navier-Stokes approximation*. J.Stat.Phys., 71(1-2) :191-207, 1993.
- [22] S.Brull, V.Pavan, J.Schneider, *Derivation of BGK models for mixtures*. Eur.J.Mechanics (B-Fluids), 33, 74-86, 2012.
- [23] J. Broadwell. *Study of a rarefied shear flow by discrete velocity model*, J. Fluid Mech., 19, 367-370, 1964.
- [24] A.V.Bobylev, J. Struckmeier, *Implicit and iterative methods for the Boltzmann equation*, Transport Theory and Statistical Physics, Vol. 25, No. 2, 175-195, 1996.
- [25] S.Brull, J.Schneider : *A new approach of the Ellipsoidal Statistical Model*, Cont.Mech.Thermodyn. 20, no.2, 63-74, 2008.

- [26] S.Brull, J.Schneider *On the Ellipsoidal Statistical Model for polyatomic gases*, Cont.Mech.Thermodyn. 20, no.8, 489-508, 2009.
- [27] S. Brull, Jacques Schneider, *Derivation of a BGK model for reacting gas mixtures*, Comm. Math. Sciences, Vol 12, No 7, 1199-1223, 2014.
- [28] C. Buet. *A discrete-velocity scheme for the Boltzmann operator of rarefied gas dynamics*, Transport Theory Statist. Phys. 25, no. 1, 33–60, 1996.
- [29] H. Cabannes. *The Discrete Boltzmann Equation (Theory and Application)*, Lectures Notes, University of California, Berkeley, 1980.
- [30] T. Carleman, *Sur la théorie de l'équation intégrodifférentielle de Boltzmann*, Acta Math, 1932.
- [31] T. Carleman. *Problèmes mathématiques dans la théorie cinétique des gas*, Publ. Scient. Inst. Mittag-Leffler, 1957.
- [32] C.Cercignani. *The Boltzmann equation and its applications*. Scottish Academic Press, 40-103, 1988.
- [33] S.Chapman-T.G.Cowling. *The Mathematical Theory of non-uniform gases*, Cambridge Mathematical Library, third edition, 1970.
- [34] F.G. Cheremissine, *Numerical Methods for the Integration of the Boltzmann Equation*, Numerical Methods in the Theory of Rarefied Gases, Moscou, Center of the Academy of Sciences, 1969.
- [35] F. Coquel,P.-G. LeFloch, *An entropy satisfying MUSCL scheme for systems of conservation laws*, Numer. Math., 74(1), 1-33, 1996.
- [36] F. Coquel, P. Helluy, J. Schneider, *Second-order entropy diminishing scheme for the Euler equations*, Int. J. Numer. Meth. Fluids, 50, 1029-1061, 2006.
- [37] R.E.Caffisch, L.Pareschi, *An implicit Monte Carlo method for rarefied gas dynamics I : The space homogeneous case*, J. Computational Physics, 154, pp. 90-116, 1999.
- [38] F. Coquel-F. Rogier-J. Schneider.*Une méthode déterministe pour la résolution de l'équation de Boltzmann*, La Recherche Aérospatiale, n°3 (mai-juin), 1-10, 1992.
- [39] S.R. de Groot, P. Mazur, *Nonequilibrium Thermodynamics*, North-Holland, Amsterdam, 1962.

- [40] G. DiBlasio, *Differentiability of spatially homogeneous solutions of the Boltzmann equation in the non-Maxwellian case*, Comm ; Math. Phys., 38, 331-340, 1974.
- [41] L.Desvilletes-S.Mischler. *About the splitting algorithm for Boltzmann and B.G.K. equations*, Math. Models Methods Appl. Sci. 6, no. 8, 1079-1101, 1996.
- [42] L. Desvilletes, R. Monaco, F. Salvarani *A Kinetic Model Allowing to Obtain the Energy Law of Polytopic Gases in the Presence of Chemical Reactions* Eur.J.Mechanics (B-Fluids), vol. 24, (2005), 219-236.
- [43] R. J. DiPerna-J. L. Lions *On the Cauchy problem for Boltzmann equations : global existence and weak stability*, Ann. of Math. (2) 130, no. 2, 321-366, 1989.
- [44] G. Dimarco, L. Pareschi, *Numerical methods for kinetic equations*, Acta Numerica, Vol 23, 369-520, 2014.
- [45] W. Duke *Hyperbolic distribution problems and half-integers weight Mass form*, Invent. Math 92, 73-90, 1988.
- [46] W. Duke - R. Shulze-Pillot *Representation of integers by positive ternary forms and equidistribution of lattice points on ellipsoids*, Invent. Math. 99, 49-57, 1990.
- [47] A.Ern, V.Giovangigli, *EGlibServer and User's Manual*, <http://www.cmap.polytechnique.fr/www.eglib/>
- [48] A.Ern, V. Giovangigli, *Multicomponent Transport Algorithms*, Lecture Notes in Physics, New Series Monographs, 1994.
- [49] L. Fainsilber, P. Kurlberg, B. Wennberg, *Lattice points on circles and discrete velocity models for the Boltzmann equation*, SIAM J. Math. Anal. 37 (6), 1903-1922, 2006.
- [50] J.H. Ferziger, H.G. Kaper, *Mathematical theory of transport processes in gases*, North-Holland publishing company, Amsterdam, 1972.
- [51] R. Gatignol. *Théorie Cinétique des gaz à répartition discrète des vitesses*, Lecture Notes in Physics, 36, Springer Verlag, 1975.
- [52] V.Giovangigli, *Multicomponent flow modeling*, Birkhauser, Boston-Basel-Berlin, 1998.

- [53] D. Goldstein-B.Sturtevant-J.E.Broadwell. *Investigation of the motion of discrete-velocity gases*, in "Rarefied Gas Dynamics : Theoretical and Computational Techniques", E. P. Muntz, D. P. Weaver and D. H. Campbell Eds., Progress in Astronautics and Aeronautics 118, 100-117, 1989.
- [54] V. Garzo- A. Santos- J.J. Brey *A kinetic model for a multicomponent gas*, Phys. of Fluid A 1 N°2 (1989), 380-383.
- [55] D.Goldstein-B.Sturtevant. *Discrete velocity gasdynamics simulations in a parallel processing environment*, AJAA Paper, N° 89-1668, 1989.
- [56] E.Goldmann, L.Sirovitch, *Equations for gas mixtures*, The Physics of Fluids, Vol. 10, N° 9, 1928-1940, 1967.
- [57] E. P. Golubeva- O. M. Fomenko *Asymptotic equidistribution of integral points on the three-dimensional sphere*, (en Russe) Zap. Nauchn. Sem. Leningrad Otdel. Mat. Inst. S teklov 160, 54-71, 1987.
- [58] H.Grad *On the Kinetic Theory of Rarefied Gases*, Comm. Pure & Appl. Math, 2, 331-407, 1949.
- [59] M. Groppi, G. Spiga, *A Bhatnagar-Gross-Krook approach for chemically reacting mixtures*, Phys. Fluids, (2004), 16, no 12, 4273-4284.
- [60] C. Grunfeld, *On a Class of Kinetic Equations for Reacting Gas Mixtures with Multiple Collisions*, C. R. Acad. Sci. Paris, 316, Série I, 953-958, 1993.
- [61] J.H. Ferziger, H.G. Kaper, *Mathematical theory of transport processes in gases*, North-Holland publishing company, Amsterdam, 1972.
- [62] G.H Hardy-E.M Wright E.M *An Introduction to the Theory of Numbers*, Oxford at the Clarendon Press, 1938.
- [63] C.D. Hauck, C.D. Levermore, A. L. Tits, *Convex Duality and Entropy-Based Moment Closures : Characterizing Degenerate Densities* SIAM J. Control and Optimization, 47, 1977-2015, 2008.
- [64] H. Iwaniec *Fourier coefficients of modular forms of half integer weight*, Invent. Math., 87, 385-401, 1987.
- [65] S. Jin, Y. Shi, *A micro-macro decomposition based asymptotic-preserving scheme for the multispecies Boltzmann equation*, SIAM J. for Scientific Computing, Volume 31, No 6, 2010

- [66] Junk M., Domain of Definition of Levermore's Five Moments System, *J. Stat. Phys.*, Vol 93, 1143-1167, 1998.
- [67] Junk M., Maximum entropy for reduced moment problems, *M3AS*, Vol. 10, 1001-1025, 2000.
- [68] M. Junk- A. Unterreiter, *Maximum entropy moment systems and Galilean Invariance*, *Cont. Mech. Thermodyn.*, 14, 563-576, 2002.
- [69] V.I.Kurochkin, S.F.Makarenko, G.A.Tirskii, *Transport coefficients and the Onsager relations in the kinetic theory of dense gas mixtures*, *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 25, 218-225, 1984.
- [70] I. Kuscer, *Dissociation and Recombination in an Inhomogeneous Gas*, *Physica A*, 176, 542-556, 1991.
- [71] C.D.Levermore. *Moment closure hierarchies for kinetic theories*, *Journ.Stat.Phys.* 83 1996 1021-1065.
- [72] G. Ludwig, M. Heil *Boundary-Layer Theory with Dissociation and Ionization*, *Advances in Applied Mechanics*, Volume VI, Academic Press, 39-118, 1960.
- [73] E.M. Lifshitz- L.P. Pitaevski *Statistical Physics Part 2*. Pergamon Press, 1980.
- [74] Y. W. Linnik, *Ergodic properties of algebraic fields*, *Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete* 45, New York : Springer-Verlag New York Inc, 1968.
- [75] J.C. Light, J. Ross, K.E. Schuler, *Rate coefficients, reaction cross sections and microscopic reversibility*, *Kinetic Processes in Gases and Plasmas*, Academic Press, New York, 1969.
- [76] A. Lukschin, H. Neunzert, J. Struckmeier, *Coupling of Navier-Stokes and Boltzmann regions*, Final Report of the Project DPH 6473/91, Department of Mathematics, University of kaiserslautern, Allemagne, 1991.
- [77] L.H.Holway, *Kinetic theory of shock structure using an ellipsoidal distribution function*, In *rarefied Gas Dynamics*, vol I (Proc. Fourth Internat.Sympos.Univ.Toronto, 1964). Academic Press, New York, 193-215, 1966.
- [78] H. O. Kreiss, *Initial Boundary Value Problems for Hyperbolic Systems*, *Comm. Pure Appl. Math.*, 23, 277-298, 1970.

- [79] S. Kosuge, *Model Boltzmann equation for gas mixtures : Construction and numerical comparison*, Eur.J.Mech B/Fluids, 170-184, 2009.
- [80] J.Meixner, *Zur Thermodynamik der irreversiblen Prozesse in Gasen mit chemisch reagierenden, dissoziirenden und anregbaren Komponenten*, Ann. der Phys., 43, 244-270, 1943.
- [81] P. Michel- J. Schneider *Approximation simultanée de réels par des nombres rationnels et noyau de collision de l'équation de Boltzmann*, C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math. 330, no. 9, 857-862, 2000.
- [82] L.Mieussens *Discrete velocity model and implicit scheme for the BGK equation of rarefied gas dynamics*, Math. Models Methods Appl. Sci. 10, no. 8, 1121–1149, 2000.
- [83] L.Mieussens-H.Struchtrup, *Numerical comparison of BGK-models with proper Prandtl number*, Phys.Fluids 16(8), 2797-2813, 2004.
- [84] S. Mischler, *Convergence of discrete velocity schemes for the Boltzmann equation*, Arch. Rational Mech. Anal., 140, 53-77, 1997.
- [85] Y. Morchoisne. *Une methode de différences finies pour la résolution de l'équation de Boltzmann : traitement du terme de collision*, C.R.A.S., t. 313, Série II, 1513-1518, 1991.
- [86] B. Z. Moroz *On the representation of large integers by integral ternary positive quadratic forms*, Astérisque 209, 275–278, 1992.
- [87] C. Mouhot, L. Pareschi, *Fast algorithms for computing the Boltzmann collision operator*, Math. Comp. 75(256), 1833-1852, 2006.
- [88] C. Mouhot, L. Pareschi, T. Rey, *Convolutional decomposition and fast summation methods for discrete-velocity approximations of the Boltzmann equation*, Math. Mod. Num. Anal. 47, 1515-1531, 2013.
- [89] E. Nagnibeda, E. Kustova, *Non-Equilibrium Reacting Gas Flows*, Springer-Verlag, 2009.
- [90] K.Nanbu. *Direct simulation scheme derived from the Boltzmann equation*, J. Phys. Soc. Japan 49, no. 8, 2042–2049, 1980.
- [91] R. Narashima, *The Contribution of the Bhatnagar-Gross-Krook Model to the Development of Rarefied Gas Dynamics in the early years of the space age*, International. Journal of Modern Physics C, 25, Issue 01, 2014.

- [92] V.A Panferov, A. G. Heintz, Alexei G, *A new consistent discrete velocity model for the Boltzmann equation*, Math. Methods Appl. Sci. 25, no. 7, 571-593, 2002.
- [93] A. Palczewski, J. Schneider, *Existence, Stability, and Convergence of Solutions of Discrete Velocity Models to the Boltzmann Equation*, Journal of Statistical Physics, 91, No 1/2, 307-326, 1998.
- [94] A. Palczewski- J. Schneider- A. V. Bobylev *A consistency result for a discrete velocity model of the Boltzmann equation*, SIAM J. Numer. Anal. 34, No. 5, 1865–1883, 1997.
- [95] V. Pavan, *General Entropic Approximations for Canonical Systems Described by Kinetic Equations*, Journal of Statistical Physics 142(4), 792-827.
- [96] F. Rogier-J. Schneider *A direct method for solving the Boltzmann equation*, proceedings of Colloque Euromech n0287 Discrete Models in Fluid Dynamics, Transport Theory and Statistical Physics, Vol. 23, No. 1-3, 1994.
- [97] A.Rossani, G.Spiga *A note on the kinetic theory of chemically reacting gases*, Physica A, 272, (1999), 563-573.
- [98] P. Sarnak *Some applications of modular forms*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [99] J.Schneider *Une méthode déterministe pour la résolution de l'équation de Boltzmann*, thèse de doctorat de l'université Pierre et Marie Curie, Paris, 1993.
- [100] J. Schneider, *Direct coupling of fluid and kinetic equations*, Transport Theory and Statistical Physics, Vol 25, No 6, pp. 681-698, 1996.
- [101] J. Schneider, A. Palczewski, *A Multi-Scale Approach of Discrete Velocity Models*, First European Symposium on Applied Kinetic Theory, INSA Toulouse, mai 98.
- [102] J. Schneider, *Moment realizability in Levermore's moment closure for kinetic equations : classical and relativistic cases*, Journées Nice-Toulon-Marseille, Porquerolles, 2006.
- [103] J. Schneider, *On a well-posed simulation model for multicomponent reacting gases*, Comm. Math. Sciences, Vol 13, N° 5, 1075–1103, 2015.

- [104] J.Schneider *Entropic approximation in kinetic Theory*, M2AN, vol.38 no3, 541-561, 2004.
- [105] C. L. Siegel *Über die Klassenzahl quadratischer Zahlkörper*, Acta Arith. 1, 83-86, 1935.
- [106] B.Reynolds, *The Element Potential Method for Chemical Equilibrium Analysis*, <http://www.stanford.edu/>
- [107] H.Struchtrup *The BGK model with velocity dependent collision frequency* Cont.Mech.Thermodyn. 9, 23-31, 1997.
- [108] F. G. Tcheremissine, *Numerical methods for the integration of the Boltzmann equation*, Numerical Methods in the Theory of Rarefied Gases, Computer center of the Academy of Sciences, Moscou, 1969.
- [109] C. Villani, *Fisher information bounds for Boltzmann's collision operator*, J. Math. Pures Appl., 77, 821-837, 1998.
- [110] W. Wagner, *A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation*, J. Statist. Phys. 66, No 3-4, 1011-1044, 1992.
- [111] L. Waldmann und E. Trüdenbacher, *Formale Kinetische Theorie von Gasgemischen aus Anregbaren Molekülen*, Zeitschr. Naturforschg., 17a, 363-376, 1962.
- [112] C. S. Wang Chang, G. E. Uhlenbeck, *On the Propagation of Sound in Monoatomic Gases*, University of Michigan Press, Project 999, Ann Arbor, 1952. Reprinted in *The Kinetic Theory of Gases*, Studies in Statistical Mechanics, vol V, North-Holland, Amsterdam, 1970.