

# Transport et diffusion

**G. ALLAIRE**

**Cours no. 6 — le 13/II/2013**

Méthodes numériques (suite)

- ➡ Equation de Boltzmann linéaire stationnaire
- ➡ Accélération par la diffusion
- ➡ Equation de Boltzmann instationnaire
- ➡ Différences finies en dimension  $N = 2$
- ➡ Autres méthodes

### (1) Equation de Boltzmann linéaire stationnaire

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu \frac{\partial u}{\partial x}(x, \mu) + \sigma(x)u(x, \mu) = \frac{\sigma^*(x)}{2} \int_{-1}^{+1} u(x, \mu') d\mu' + f(x, \mu) \\ \text{pour } (x, \mu) \in (-\ell, +\ell) \times (-1, +1) \\ u(-\ell, \mu) = 0 \text{ pour } \mu > 0, \quad u(+\ell, \mu) = 0 \text{ pour } \mu < 0. \end{array} \right.$$

Pour que le problème soit bien posé nous faisons l'hypothèse que

$$0 < \sigma_0 \leq \sigma(x) - \sigma^*(x) \text{ pour } x \in (-\ell, +\ell).$$

#### Méthode $S_N$ ou des ordonnées discrètes:

on discrétise à la fois en espace et en vitesse, points  $x_j$  et vitesses  $\mu_k$

$$\text{telles que } \int_{-1}^{+1} f(\mu) d\mu \approx \sum_k \omega_k f(\mu_k).$$

## Discrétisation en vitesse

Comment choisir la discrétisation en vitesse pour bien calculer les intégrales en  $\mu$ .

**Formule d'intégration numérique ou quadrature**

$$\int_{-1}^{+1} f(\mu) d\mu \approx \sum_k \omega_k f(\mu_k) \quad \text{avec des poids } \omega_k.$$

Pour des raisons de symétrie et de positivité on choisit  $2K$  vitesses

$$\mu_{-k} = -\mu_k, \quad \omega_{-k} = \omega_k \geq 0, \quad \text{pour tout } 1 \leq k \leq K,$$

$$-1 \leq \mu_{-K} < \mu_{-K+1} < \cdots < \mu_{-1} < 0 < \mu_1 < \cdots < \mu_{K-1} < \mu_K \leq +1.$$

Idée naïve: formule des trapèzes

Vitesses équidistribuées

$$\mu_k = (1/2 + k)/K \text{ pour } -K \leq k \leq -1, \quad \mu_k = (-1/2 + k)/K \text{ pour } 1 \leq k \leq K,$$

et formule des trapèzes sur chaque sous-intervalle

$$\omega_k = 1/K \quad \forall k.$$

On peut faire mieux !

## Polynômes de Legendre

$$P_0(\mu) = 1, \quad P_n(\mu) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{d\mu^n} \left( (\mu^2 - 1)^n \right) \quad \text{pour } n \geq 1.$$

### Propriétés des polynômes de Legendre

1. le degré de  $P_n$  est exactement  $n$ ,  $P_{2n}$  est pair et  $P_{2n+1}$  est impair,

2. orthogonaux au sens où:  $\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_n(\mu) P_m(\mu) d\mu = \frac{\delta_{nm}}{2n+1}$ ,

3. récurrence:  $\mu P_n(\mu) = \frac{1}{2n+1} \left( (n+1) P_{n+1}(\mu) + n P_{n-1}(\mu) \right)$ ,

4. équation différentielle:

$$(1 - \mu^2) \frac{d^2}{d\mu^2} P_n(\mu) - 2\mu \frac{d}{d\mu} P_n(\mu) + n(n+1) P_n(\mu) = 0,$$

5. les racines de  $P_n(\mu)$  sont toutes réelles, distinctes, comprises dans  $(-1; +1)$  et symétriques par rapport à l'origine.

## Quadrature de Gauss

Comme  $P_{2K}$  a  $2K$  racines distinctes non nulles, symétriques par rapport à 0, on les choisit pour être les  $2K$  vitesses discrètes  $(\mu_k)$  et on prend

$$\omega_k = \int_{-1}^{+1} \left( l_k(\mu) \right)^2 d\mu \quad \text{avec} \quad l_k(\mu) = \prod_{j=-K, j \neq 0, j \neq k}^K \frac{\mu - \mu_j}{\mu_k - \mu_j}.$$

Le polynôme  $l_k(\mu)$  est appelé polynôme d'interpolation de Lagrange.

**Lemme.** La formule de quadrature de Gauss, basée sur les vitesses discrètes  $(\mu_k)$  égales aux racines du polynôme de Legendre  $P_{2K}$  et sur les poids  $\omega_k$ , est exacte pour tous les polynômes d'ordre inférieur ou égal à  $4K - 1$ . On dit qu'elle est d'ordre  $4K - 1$ .

Preuve du lemme sur la quadrature de Gauss

Soit  $\mathcal{K}$  l'ensemble des indices  $-K \leq k \leq +K$  avec  $k \neq 0$ .

Les polynômes  $l_k(\mu)$  forment une base de  $\mathbb{P}_{2K-1}$  (ensemble des polynômes de degré  $\leq 2K - 1$ ). De plus

$$\forall q \in \mathbb{P}_{2K-1} \quad q(\mu) = \sum_{k \in \mathcal{K}} q(\mu_k) l_k(\mu).$$

La formule de quadrature

$$\sum_{k \in \mathcal{K}} \omega_k q(\mu_k) \quad \text{avec} \quad \omega_k = \int_{-1}^{+1} l_k(\mu) d\mu$$

est donc exacte pour  $q \in \mathbb{P}_{2K-1}$ .

Fin de la preuve du lemme

Soit  $q \in \mathbb{P}_{4K-1}$ . Par division euclidienne il existe des polynômes  $d$  et  $r$  tels que

$$q(\mu) = d(\mu) \prod_{k \in \mathcal{K}} (\mu - \mu_k) + r(\mu) \quad \text{avec} \quad d^\circ(d) \leq 2K - 1, \quad d^\circ(r) \leq 2K - 1$$

Or  $\prod_{k \in \mathcal{K}} (\mu - \mu_k) = P_{2K}(\mu)$  qui est orthogonal à  $\mathbb{P}_{2K-1}$ . Donc

$$\int_{-1}^{+1} q(\mu) d\mu = \int_{-1}^{+1} r(\mu) d\mu = \sum_{k \in \mathcal{K}} \omega_k r(\mu_k) = \sum_{k \in \mathcal{K}} \omega_k q(\mu_k),$$

c'est-à-dire que la formule de quadrature est exacte dans  $\mathbb{P}_{4K-1}$ .

En prenant  $q(\mu) = (l_k(\mu))^2 \in \mathbb{P}_{4K-1}$ , on vérifie que

$$\omega_k = \int_{-1}^{+1} l_k(\mu) d\mu = \int_{-1}^{+1} (l_k(\mu))^2 d\mu.$$

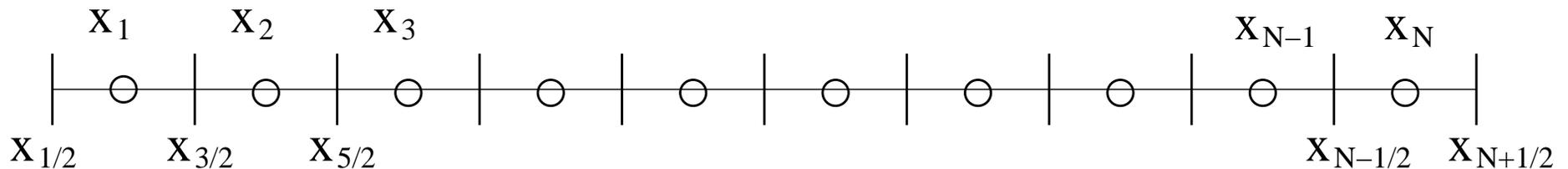
Rappel sur le maillage en espace.

L'intervalle  $(-\ell; +\ell)$  est discrétisé par  $N$  mailles  $(x_{j-1/2}; x_{j+1/2})$  avec

$$x_{j+1/2} = -\ell + j\Delta x \text{ pour } j \in \{0, 1, \dots, N\} \text{ et } \Delta x = \frac{2\ell}{N},$$

Les points milieux  $x_j$  sont définis comme les centre des mailles par

$$x_j = -\ell + (j - 1/2)\Delta x \text{ pour } j \in \{1, 2, \dots, N\}.$$



Ce changement de notation s'interprète comme une méthode de volumes finis.

Schéma diamant

$$\mu_k \frac{u_{j+1/2}^k - u_{j-1/2}^k}{\Delta x} + \sigma_j u_j^k = \sigma_j^* \bar{u}_j + f_j^k \quad \text{pour } 1 \leq j \leq N$$

avec la relation diamant  $u_j^k = \frac{u_{j+1/2}^k + u_{j-1/2}^k}{2}$ , et la moyenne angulaire

$$\bar{u}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k u_j^k.$$

Comme d'habitude  $\sigma_j$ ,  $\sigma_j^*$  et  $f_j^k$  sont des approximations de  $\sigma(x_j)$ ,  $\sigma^*(x_j)$  et  $f(x_j, \mu_k)$ . Les conditions aux limites de flux nul entrant sont

$$u_{1/2}^k = 0 \text{ pour } \mu_k > 0, \quad \text{et } u_{N+1/2}^k = 0 \text{ pour } \mu_k < 0.$$

On verra plus loin comment résoudre ces équations discrètes.

## Analyse du schéma diamant

**Lemme 1.** Le schéma diamant est consistant et précis à l'ordre 2 en espace.

**Preuve.** Faire un développement de Taylor autour du point  $x_j$ .

**Lemme 2.** Le schéma diamant est **inconditionnellement** stable et convergent en norme  $L^2$  au sens où

$$\|(u_j^k)\| \leq \frac{1}{\sigma_0} \|(f_j^k)\|.$$

**Lemme 3 (estimation d'énergie).** La solution exacte  $u(x, \mu)$  vérifie

$$\int_{-\ell}^{+\ell} \int_{-1}^{+1} |u(x, \mu)|^2 dx d\mu \leq \frac{1}{\sigma_0^2} \int_{-\ell}^{+\ell} \int_{-1}^{+1} |f(x, \mu)|^2 dx d\mu.$$

**Preuve.** Multiplier l'équation de transport par  $u$  et intégrer par parties.

## Analyse du schéma diamant (suite)

**Preuve du lemme 2.** Intégration par parties discrètes.

On introduit la norme discrète

$$\|(u_j^k)\|^2 = \sum_{j=1}^N \Delta x \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k |u_j^k|^2.$$

On multiplie le schéma par  $\Delta x \omega_k (u_{j+1/2}^k + u_{j-1/2}^k)$  et on somme sur  $j$  et  $k$ . Le terme de transport devient

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \mu_k \left( (u_{j+1/2}^k)^2 - (u_{j-1/2}^k)^2 \right) = \\ & \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \mu_k (u_{N+1/2}^k)^2 - \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \mu_k (u_{1/2}^k)^2 \geq 0 \end{aligned}$$

à cause des conditions aux limites imposées.

Par conséquent

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \Delta x \sigma_j \omega_k (u_{j+1/2}^k + u_{j-1/2}^k)^2 \leq \\ 4 \sum_{j=1}^N \Delta x \sigma_j^* (\bar{u}_j)^2 + \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \Delta x \omega_k (u_{j+1/2}^k + u_{j-1/2}^k) f_j^k. \end{aligned}$$

Or, par Cauchy-Schwarz,

$$\begin{aligned} (\bar{u}_j)^2 &= \left( \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \frac{u_{j+1/2}^k + u_{j-1/2}^k}{2} \right)^2 \\ &\leq \left( \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \right) \left( \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \frac{(u_{j+1/2}^k + u_{j-1/2}^k)^2}{4} \right) \\ &\leq \frac{1}{8} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k (u_{j+1/2}^k + u_{j-1/2}^k)^2 \end{aligned}$$

D'où l'on déduit

$$\sigma_0 \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \Delta x \omega_k (u_j^k)^2 \leq \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \Delta x \omega_k u_j^k f_j^k.$$

Une nouvelle application de l'inégalité de Cauchy-Schwarz permet de conclure à la stabilité.

La convergence s'obtient par le théorème de Lax.

## Résolution du schéma diamant

On ne résout pas **directement** les équations discrètes car il faudrait résoudre un **très grand système linéaire**.

**Algorithme d'itération sur les sources:** on calcule une suite de solutions approchées  $u_{j+1/2}^{k,n}$  indicées par  $n$ .

**Initialisation ( $n = 0$ ):**  $\bar{u}_j^0 = 0$

**Itérations ( $n \geq 1$ ):** les collisions sont considérées comme des sources

$$\mu_k \frac{u_{j+1/2}^{k,n} - u_{j-1/2}^{k,n}}{\Delta x} + \sigma_j \frac{u_{j+1/2}^{k,n} + u_{j-1/2}^{k,n}}{2} = \sigma_j^* \bar{u}_j^{n-1} + f_j^k$$

et on met à jour la moyenne angulaire

$$\bar{u}_j^n = \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \frac{u_{j+1/2}^{k,n} + u_{j-1/2}^{k,n}}{2}.$$

## Convergence de l'algorithme d'itération sur les sources

**Lemme.** La suite  $u_{j+1/2}^{k,n}$  converge, quand  $n \rightarrow +\infty$ , vers la solution  $u_{j+1/2}^k$  du schéma.

**Preuve.** *Forme matricielle de l'algorithme* avec  $U^n = (u_{j+1/2}^{k,n})$  et  $F = (f_j^k)$

$$TU^n = KU^{n-1} + F.$$

La méthode itérative converge ( $\forall F$ ) si et seulement si  $\rho(T^{-1}K) < 1$ .

Comme

$$\rho(T^{-1}K) \leq \|T^{-1}K\| \leq \|T^{-1}\| \|K\|,$$

il suffit de montrer que  $\|T^{-1}\| \|K\| < 1$ .

Calcul de  $\|T^{-1}\|$

Pour un second membre  $G$  on appelle  $U$  la solution de

$$TU = G.$$

On prend le produit scalaire de cette équation avec  $U$ . Rappelons la norme

$$\|U\| = \left( \sum_{j=1}^N \Delta x \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k |u_j^k|^2 \right)^{1/2}.$$

Par un calcul similaire à celui de la stabilité

$$\sigma \|U\|^2 \leq TU \cdot U = G \cdot U \leq \|G\| \|U\|,$$

c'est-à-dire que

$$\|T^{-1}G\| \leq \frac{1}{\sigma} \|G\|.$$

Calcul de  $\|K\|$

Par ailleurs, on vérifie que

$$\|KU\|^2 = (\sigma^*)^2 \sum_{j=1}^N \Delta x \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k |\bar{u}_j|^2 = 2(\sigma^*)^2 \sum_{j=1}^N \Delta x |\bar{u}_j|^2$$

et, par Cauchy-Schwarz pour  $\bar{u}_j = \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k u_j^k$ ,

$$\|KU\|^2 \leq (\sigma^*)^2 \sum_{j=1}^N \Delta x \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k |u_j^k|^2 = (\sigma^*)^2 \|U\|^2,$$

d'où l'on déduit que  $\|T^{-1}\| \|K\| \leq \sigma^*/\sigma < 1$  à cause de l'hypothèse de sous-criticité.

## (2) Accélération par la diffusion

Équation de Boltzmann

$$Tu = Ku + f,$$

et équation de diffusion (avec des conditions aux limites convenables)

$$D\bar{u} \equiv -\operatorname{div}(D\nabla\bar{u}) + \sigma_D\bar{u} = \bar{f}.$$

Algorithme d'itération sur les sources:

$$\begin{cases} Tv^n = Ku^{n-1} + f \equiv K\bar{u}^{n-1} + f, \\ u^n = v^n, \end{cases}$$

où on a introduit une inconnue supplémentaire, inutile ici,  $v^n$ .

L'idée est de modifier la relation donnant  $u^n$  en fonction de  $v^n$ .

En intégrant en vitesse l'équation de Boltzmann et en additionnant/soustrayant l'opérateur  $D$  on obtient

$$D\bar{u} = \bar{f} - \overline{(T - K - D)u}.$$

On propose alors le nouveau schéma itératif

$$\begin{cases} Tv^n = K\bar{u}^{n-1} + f, \\ D\bar{u}^n = \bar{f} - \overline{(T - K - D)v^n}. \end{cases}$$

La seconde équation est équivalente à

$$D\overline{(u^n - v^n)} = \bar{f} - \overline{(T - K)v^n} = \overline{K(v^n - u^{n-1})} = K(v^n - u^{n-1}),$$

où l'on a utilisé une moyenne de la première équation.

L'algorithme d'itération sur les sources accéléré par diffusion est

$$\begin{cases} Tv^n = K\bar{u}^{n-1} + f, \\ \bar{u}^n = \bar{v}^n + D^{-1}K(\bar{v}^n - \bar{u}^{n-1}). \end{cases}$$

### (3) Equation de Boltzmann instationnaire

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} + \mu \frac{\partial u}{\partial x} + \sigma(x)u = \frac{\sigma^*(x)}{2} \int_{-1}^{+1} u(x, \mu') d\mu' + f(x, \mu) \\ \text{pour } (t, x, \mu) \in \mathbb{R}^+ \times (-\ell, +\ell) \times (-1, +1) \\ \\ u(t = 0, x, \mu) = u^0(x, \mu) \quad \text{pour } (x, \mu) \in (-\ell, +\ell) \times (-1, +1) \\ \\ u(-\ell, \mu) = 0 \text{ pour } \mu > 0, \quad u(+\ell, \mu) = 0 \text{ pour } \mu < 0. \end{array} \right.$$

Nous faisons l'hypothèse que le milieu est sous-critique, à savoir

$$0 \leq \sigma(x) - \sigma^*(x) \text{ pour } x \in (-\ell, +\ell).$$

## Schéma diamant

$$\frac{u_j^{n+1,k} - u_j^{n,k}}{\Delta t} + \mu_k \frac{u_{j+1/2}^{n+1/2,k} - u_{j-1/2}^{n+1/2,k}}{\Delta x} + \sigma_j u_j^{n+1/2,k} = \sigma_j^* \bar{u}_j^{n+1/2} + f_j^{n+1/2,k}$$

avec les **deux** relations diamant

$$u_j^{n+1,k} + u_j^{n,k} = u_{j+1/2}^{n+1/2,k} + u_{j-1/2}^{n+1/2,k}$$

$$2u_j^{n+1/2,k} = u_{j+1/2}^{n+1/2,k} + u_{j-1/2}^{n+1/2,k}$$

et la moyenne angulaire

$$\bar{u}_j^{n+1/2} = \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k u_j^{n+1/2,k}.$$

**Attention !** L'indice  $n$  réfère au pas de temps  $t^n$  et plus à l'itération sur les sources...

La première relation diamant permet d'éliminer l'inconnue  $u_j^{n+1,k}$

$$u_j^{n+1,k} = u_{j+1/2}^{n+1/2,k} + u_{j-1/2}^{n+1/2,k} - u_j^{n,k}$$

tandis que la seconde relation diamant permet d'éliminer  $u_j^{n+1/2,k}$

$$2u_j^{n+1/2,k} = u_{j+1/2}^{n+1/2,k} + u_{j-1/2}^{n+1/2,k}$$

et d'obtenir un schéma implicite **de type stationnaire** pour les valeurs  $u_j^{n+1/2,k}$  en fonction des valeurs  $u_j^{n,k}$

$$\begin{aligned} \mu_k \frac{u_{j+1/2}^{n+1/2,k} - u_{j-1/2}^{n+1/2,k}}{\Delta x} + \left( \sigma_j + \frac{2}{\Delta t} \right) \frac{u_{j+1/2}^{n+1/2,k} + u_{j-1/2}^{n+1/2,k}}{2} \\ = \frac{\sigma_j^*}{2} (\bar{u}_{j+1/2}^{n+1/2} + \bar{u}_{j-1/2}^{n+1/2}) + f_j^{n+1/2,k} + \frac{2}{\Delta t} u_j^{n,k}. \end{aligned}$$

On résout encore par l'algorithme d'itérations sur les sources.

## Analyse du schéma diamant instationnaire

**Lemme.** Le schéma diamant est inconditionnellement stable  $L^2$  au sens où,  $\forall T > 0$ ,  $\exists C(T) > 0$  tel que pour tout  $n \leq T/\Delta t$

$$\|(u_j^{n,k})\|^2 \leq C(T) \left( \|(u_j^{0,k})\|^2 + \sum_{m=0}^n \Delta t \|f_j^{n+1/2,k}\|^2 \right).$$

avec la norme discrète définie par

$$\|(u_j^{n,k})\|^2 = \sum_{j=1}^N \Delta x \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k |u_j^{n,k}|^2.$$

Démonstration de la stabilité

On multiplie le schéma par  $\Delta t \omega_k (u_j^{n+1,k} + u_j^{n,k})$  et on utilise les deux relations diamant pour obtenir, après sommation,

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \left( |u_j^{n+1,k}|^2 - |u_j^{n,k}|^2 \right) + 2\Delta t \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k \sigma_j |u_j^{n+1/2,k}|^2 \\ & \leq 4\Delta t \sum_{j=1}^N \sigma_j^* |\bar{u}_j^{n+1/2}|^2 + \Delta t \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k f_j^{n+1/2,k} (u_j^{n+1,k} + u_j^{n,k}) \end{aligned}$$

car le terme de transport donne une contribution positive. Or, par Cauchy-Schwarz,

$$|\bar{u}_j^{n+1/2}|^2 \leq \frac{1}{2} \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k |u_j^{n+1/2,k}|^2$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \sum_{k=-K, k \neq 0}^K \omega_k f_j^{n+1/2, k} (u_j^{n+1, k} + u_j^{n, k}) &\leq \|f_j^{n+1/2, k}\| \left( \|u_j^{n+1, k}\| + \|u_j^{n, k}\| \right) \\ &\leq \|f_j^{n+1/2, k}\|^2 + \frac{1}{2} \left( \|u_j^{n+1, k}\|^2 + \|u_j^{n, k}\|^2 \right) \end{aligned}$$

d'où l'on déduit

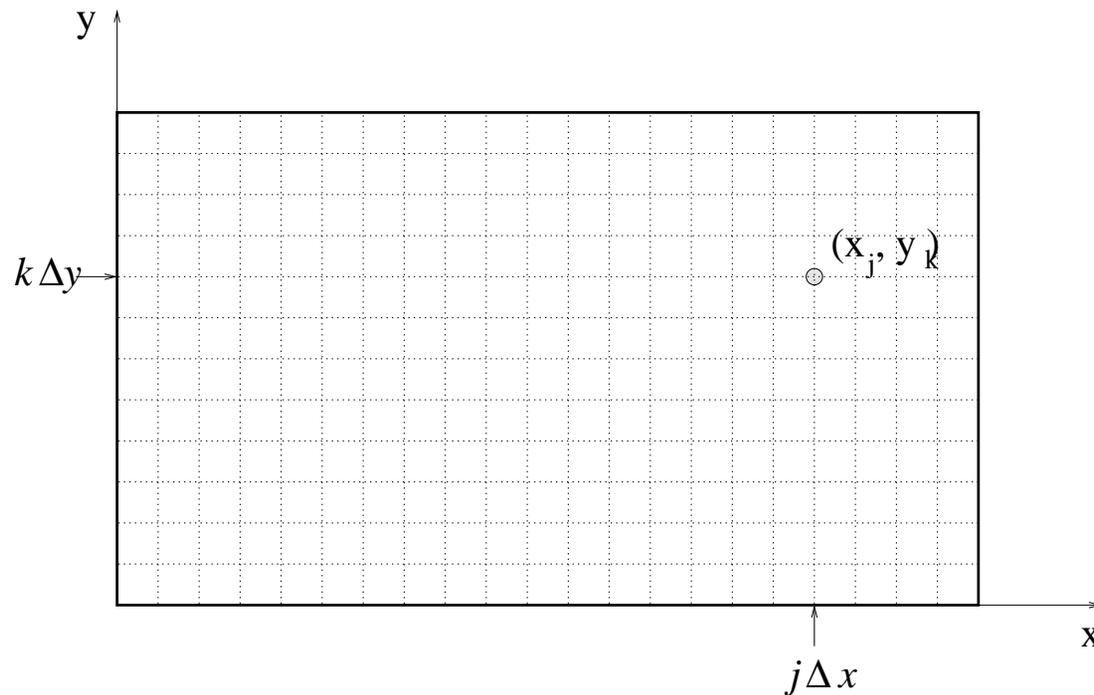
$$(1 - \Delta t/2) \|u_j^{n+1, k}\|^2 \leq (1 + \Delta t/2) \|u_j^{n, k}\|^2 + \Delta t \|f_j^{n+1/2, k}\|^2.$$

Comme  $\exists C > 0$  tel que, pour tout  $T > 0$  et  $\Delta t > 0$  petit, on a

$$\left( \frac{1 + \Delta t/2}{1 - \Delta t/2} \right)^{T/\Delta t} \leq e^{CT},$$

on en déduit la majoration voulue.

## (4) Différences finies en dimension $N = 2$



Pour discrétiser un domaine (**forcément rectangulaire**), on introduit deux pas d'espace  $\Delta x = L_x/(N_x + 1) > 0$  et  $\Delta y = L_y/(N_y + 1) > 0$ . Avec le pas de temps  $\Delta t > 0$ , on définit ainsi les noeuds d'un maillage régulier

$$(t_n, x_j, y_k) = (n\Delta t, j\Delta x, k\Delta y)$$

Equation de diffusion

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \text{ pour } (x, y, t) \in \Omega \times \mathbb{R}_*^+ \\ u(t = 0, x, y) = u_0(x, y) \text{ pour } (x, y) \in \Omega \\ u(t, x, y) = 0 \text{ pour } t \in \mathbb{R}_*^+, (x, y) \in \partial\Omega. \end{array} \right.$$

On note  $u_{j,k}^n$  la valeur d'une solution discrète approchée au point  $(t_n, x_j, y_k)$ .

Les conditions aux limites de Dirichlet se traduisent, pour  $n > 0$ , en

$$u_{0,k}^n = u_{N_x+1,k}^n = 0, \quad \forall k, \quad \text{et} \quad u_{j,0}^n = u_{j,N_y+1}^n = 0, \quad \forall j.$$

La donnée initiale est discrétisée par

$$u_{j,k}^0 = u_0(x_j, y_k) \quad \forall j, k.$$

## Schéma explicite

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1,k}^n + 2u_{j,k}^n - u_{j+1,k}^n}{(\Delta x)^2} + \nu \frac{-u_{j,k-1}^n + 2u_{j,k}^n - u_{j,k+1}^n}{(\Delta y)^2} = 0$$

La condition CFL est deux fois plus sévère.

**Lemme.** Le schéma explicite est stable en norme  $L^\infty$  sous la condition CFL

$$\frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{\nu \Delta t}{(\Delta y)^2} \leq \frac{1}{2}.$$

### Schéma implicite

$$\frac{u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k}^n}{\Delta t} + \nu \frac{-u_{j-1,k}^{n+1} + 2u_{j,k}^{n+1} - u_{j+1,k}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \nu \frac{-u_{j,k-1}^{n+1} + 2u_{j,k}^{n+1} - u_{j,k+1}^{n+1}}{(\Delta y)^2} = 0.$$

Il faut résoudre un très grand système linéaire !

Par exemple, on range les inconnues  $u_{j,k}^n$  “colonne par colonne” :

$$u^n = (u_{1,1}^n, \dots, u_{1,N_y}^n, u_{2,1}^n, \dots, u_{2,N_y}^n, \dots, u_{N_x,1}^n, \dots, u_{N_x,N_y}^n).$$

Avec cette convention, le schéma implicite requiert l'inversion d'une matrice symétrique tridiagonale “par blocs”.

$$M = \begin{pmatrix} D_1 & E_1 & & & 0 \\ E_1 & D_2 & E_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & E_{N_x-2} & D_{N_x-1} & E_{N_x-1} \\ 0 & & & E_{N_x-1} & D_{N_x} \end{pmatrix}$$

avec  $c_x = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta x)^2}$  et  $c_y = \frac{\nu \Delta t}{(\Delta y)^2}$ ,  $E_j = -c_x \text{Id}$  et

$$D_j = \begin{pmatrix} 1 + 2(c_y + c_x) & & & & & 0 \\ & -c_y & & & & \\ & & 1 + 2(c_y + c_x) & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots \\ & & & -c_y & 1 + 2(c_y + c_x) & & -c_y \\ & & & & & -c_y & 1 + 2(c_y + c_x) \end{pmatrix}$$

## Equation de transport

Vecteur vitesse  $\omega = (\omega_x, \omega_y)$  dans la sphère unité  $|\omega| = 1$ .

Domaine de calcul rectangulaire  $R = (0, \ell_x) \times (0, \ell_y)$ .

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_x \frac{\partial u}{\partial x} + \omega_y \frac{\partial u}{\partial y} + \sigma(x, y)u = f(x, y, \omega) \text{ dans } R \times \{|\omega| = 1\} \\ u(x, y, \omega) = 0 \text{ pour } (x, y, \omega) \in \Gamma^-, \end{array} \right.$$

où  $\Gamma^-$  est la frontière rentrante dans l'espace des phases

$$\Gamma^- = \{(x, y) \in \partial R \text{ tel que } n(x, y) \cdot \omega < 0\},$$

Maillage différent et résolution par la méthode des caractéristiques.

Maillage 2d de type volumes finis (points  $(x_j, y_k)$  au centre des mailles)

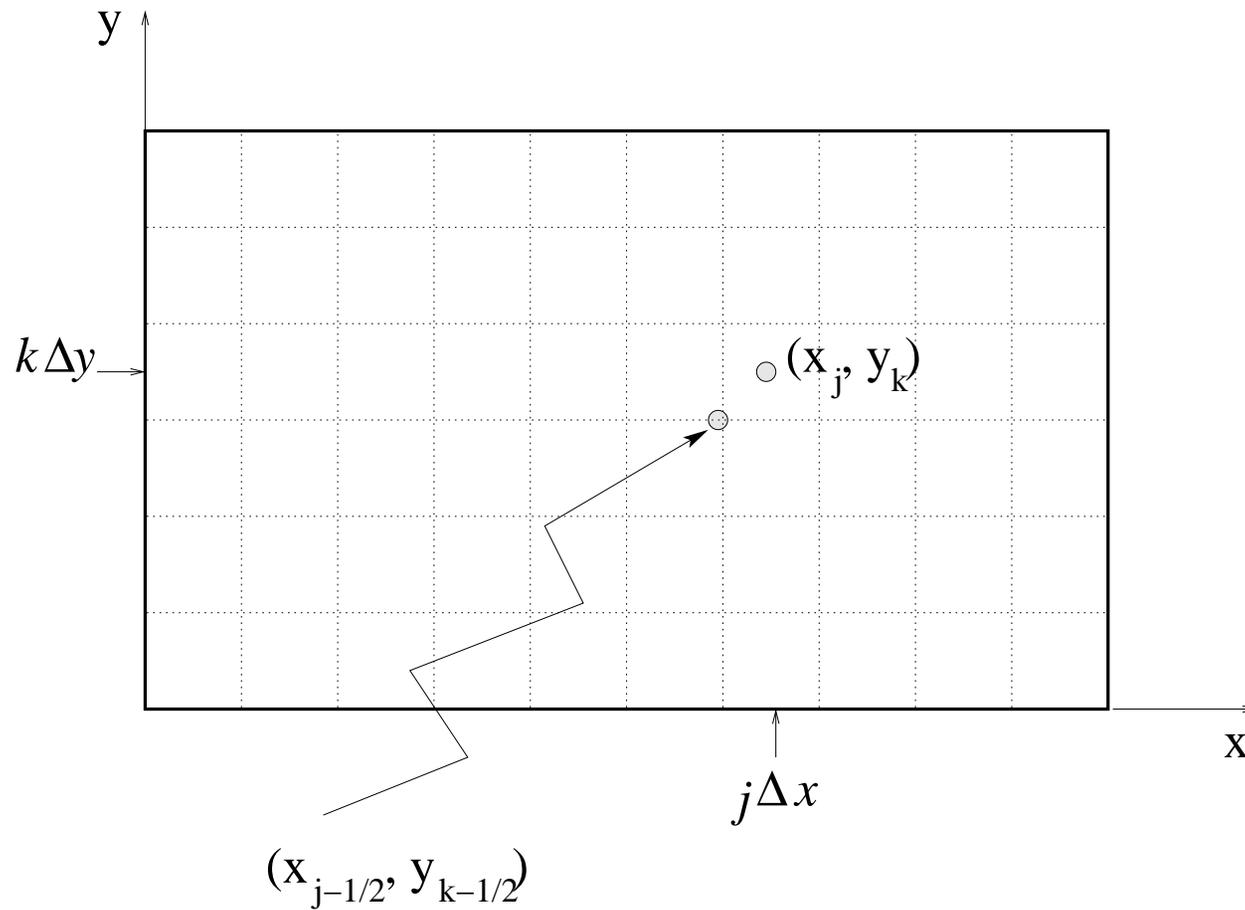


Schéma diamant

$$\omega_{p,x} \frac{u_{j+1/2,k}^p - u_{j-1/2,k}^p}{\Delta x} + \omega_{p,y} \frac{u_{j,k+1/2}^p - u_{j,k-1/2}^p}{\Delta y} + \sigma_{j,k} u_{j,k}^p = f_{j,k}^p$$

avec

$$u_{j,k}^p = \frac{u_{j+1/2,k}^p + u_{j-1/2,k}^p}{2} = \frac{u_{j,k+1/2}^p + u_{j,k-1/2}^p}{2}.$$

Nombre d'équations et d'inconnues, pour une vitesse  $\omega_p$  donnée:

- ✘ 3 équations par cellule ou point  $(x_j, y_k)$ , i.e.  $3N_x N_y$  équations.
- ✘  $N_x N_y$  inconnues  $u_{j,k}^p$ ,  $(N_x + 1)N_y$  inconnues  $u_{j+1/2,k}^p$  et  $(N_y + 1)N_x$  inconnues  $u_{j,k+1/2}^p$ , soit au total  $3N_x N_y + N_x + N_y$  inconnues.
- ✘  $N_x + N_y$  conditions aux limites sur  $\Gamma^-$ .

On a donc autant d'inconnues que d'équations !

## Résolution du schéma diamant par balayage

Analogie discret de la [méthode des caractéristiques](#):

on **balaye** le domaine de calcul  $R$  en partant des conditions aux limites et en suivant le sens des caractéristiques.

- (1) si  $\omega_{p,x} > 0$  et  $\omega_{p,y} > 0$ , on balaye de gauche à droite et de bas en haut,
- (2) si  $\omega_{p,x} > 0$  et  $\omega_{p,y} < 0$ , on balaye de gauche à droite et de haut en bas,
- (3) si  $\omega_{p,x} < 0$  et  $\omega_{p,y} > 0$ , on balaye de droite à gauche et de bas en haut,
- (4) si  $\omega_{p,x} < 0$  et  $\omega_{p,y} < 0$ , on balaye de droite à gauche et de haut en bas.

On réécrit aussi les relations diamant suivant le signe des composantes de  $\omega_p$  afin d'éliminer l'inconnue dans le membre de gauche des équation qui suivent:

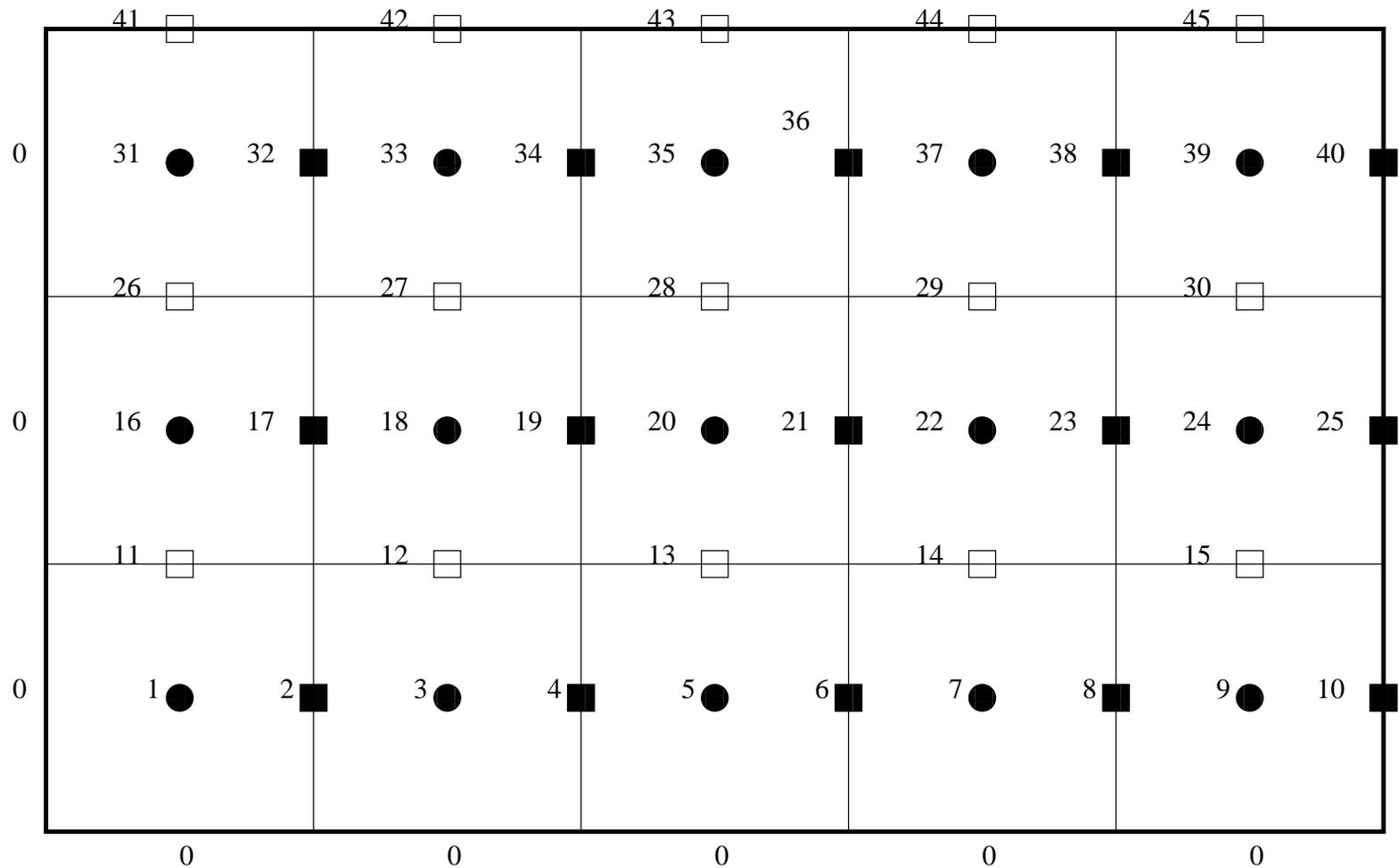
$$u_{j+1/2,k}^p = 2u_{j,k}^p - u_{j-1/2,k}^p \quad \text{si } \omega_{p,x} > 0,$$

$$u_{j-1/2,k}^p = 2u_{j,k}^p - u_{j+1/2,k}^p \quad \text{si } \omega_{p,x} < 0,$$

$$u_{j,k+1/2}^p = 2u_{j,k}^p - u_{j,k-1/2}^p \quad \text{si } \omega_{p,y} > 0,$$

$$u_{j,k-1/2}^p = 2u_{j,k}^p - u_{j,k+1/2}^p \quad \text{si } \omega_{p,y} < 0.$$

Balayage dans le cas  $\omega_{p,x} > 0$  et  $\omega_{p,y} > 0$



Balayage dans le cas  $\omega_{p,x} > 0$  et  $\omega_{p,y} > 0$  (suite)

Les valeurs aux centres des mailles (rond noir) se calculent avec

$$u_{j,k}^p = \frac{f_{j,k}^p + \frac{2\omega_{p,x}}{\Delta x} u_{j-1/2,k}^p + \frac{2\omega_{p,y}}{\Delta y} u_{j,k-1/2}^p}{\sigma_{j,k} + \frac{2\omega_{p,x}}{\Delta x} + \frac{2\omega_{p,y}}{\Delta y}}.$$

Les valeurs sur les arêtes horizontales (carré blanc) se calculent avec

$$u_{j,k+1/2}^p = 2u_{j,k}^p - u_{j,k-1/2}^p \quad \text{si } \omega_{p,y} > 0,$$

Les valeurs sur les arêtes verticales (carré noir) se calculent avec

$$u_{j+1/2,k}^p = 2u_{j,k}^p - u_{j-1/2,k}^p \quad \text{si } \omega_{p,x} > 0,$$

## (5) Autres méthodes numériques

- ➔ Méthodes intégrales
- ➔ Méthode du flux pair (éléments finis)
- ➔ Méthode de Monte-Carlo

## Méthodes intégrales

Considérons l'équation (sans collision pour simplifier)

$$\begin{cases} \partial_t f(t, x) + v \cdot \nabla_x f(t, x) + \sigma(x) f(t, x) = S(t, x), & x \in \mathbb{R}^N, t > 0, \\ f(0, x) = f^{in}(x), \end{cases}$$

qui admet une solution donnée par la formule de Duhamel

$$f(t, x) = f^{in}(x - tv) e^{-\theta(x, x - tv)} + \int_0^t e^{-\theta(x, x - (t-s)v)} S(t - s, x - sv) ds,$$

avec le **trajet optique**  $\theta$  défini par

$$\theta(x, x - tv) = \int_0^t \sigma(x - sv) ds.$$

La seule chose à calculer est le trajet optique et l'intégrale.

$e^{-\theta(x, x - tv)}$  est une **probabilité de collision**.

### Cas avec collisions: formulation intégrale

Sources dépendant du noyau de collision:

$$S(t, x) = \sigma^*(x) \int_{|v'|=1} f(t, x, v') dv' + Q(t, x),$$

Nouvelle formule de Duhamel dans ce cas:

$$\begin{aligned} f(t, x, v) &= \int_0^t e^{-\theta(x, x-(t-s)v)} \sigma^*(x - sv) \int_{|v'|=1} f(t-s, x - sv, v') dv' ds \\ &+ f^{in}(x - tv, v) e^{-\theta(x, x-tv)} + \int_0^t e^{-\theta(x, x-(t-s)v)} Q(t-s, x - sv) ds. \end{aligned}$$

On intègre cette équation en  $v$  pour faire apparaître la seule inconnue

$$\bar{f}(t, x) = \int_{|v|=1} f(t, x, v) dv$$

On obtient

$$\begin{aligned}\bar{f}(t, x) &= \int_0^t \int_{|v|=1} e^{-\theta(x, x-(t-s)v)} \sigma^*(x - sv) \bar{f}(t - s, x - sv) dv ds \\ &+ \int_{|v|=1} f^{in}(x - tv, v) e^{-\theta(x, x-tv)} dv \\ &+ \int_0^t \int_{|v|=1} e^{-\theta(x, x-(t-s)v)} Q(t - s, x - sv) ds dv.\end{aligned}$$

qui est une formulation intégrale du type

$$\bar{f} = \mathcal{T}\bar{f} + F[f^{in}, Q],$$

où  $\mathcal{T}$  est un opérateur intégral.

L'avantage est qu'on évite de discrétiser les dérivées partielles de l'opérateur de transport.

L'inconvénient est que la matrice discrétisant  $\mathcal{T}$  est pleine.

### Méthode du flux pair

On considère l'équation

$$v \cdot \nabla_x f(x, v) + \sigma(x)f(x, v) - \sigma^*(x) \int_{|v'|=1} f(x, v') dv' = S(x).$$

On introduit deux nouvelles inconnues: le **flux pair** défini par

$$f^+(x, v) = \frac{1}{2} \left( f(x, v) + f(x, -v) \right)$$

et le **flux impair**

$$f^-(x, v) = \frac{1}{2} \left( f(x, v) - f(x, -v) \right).$$

Bien sûr, on retrouve que

$$f(x, v) = f^+(x, v) + f^-(x, v) \quad \text{et} \quad f(x, -v) = f^+(x, v) - f^-(x, v).$$

L'équation de Boltzmann pour la vitesse  $-v$  est

$$-v \cdot \nabla_x f(x, -v) + \sigma(x)f(x, -v) - \sigma^*(x) \int_{|v'|=1} f(x, v') dv' = S(x).$$

Par addition de l'équation en  $+v$  et  $-v$  on obtient

$$v \cdot \nabla_x f^-(x, v) + \sigma(x)f^+(x, v) - \sigma^*(x) \int_{|v'|=1} f^+(x, v') dv' = S(x),$$

car  $\int_{|v'|=1} f dv' = \int_{|v'|=1} f^+ dv'$ , tandis que par soustraction

$$v \cdot \nabla_x f^+(x, v) + \sigma(x)f^-(x, v) = 0.$$

Si  $\sigma(x) > 0$ , on peut calculer  $f^-$  en fonction du courant de  $f^+$ . On en déduit

$$-v \cdot \nabla_x \left( \frac{1}{\sigma(x)} v \cdot \nabla_x f^+(x, v) \right) + \sigma(x)f^+(x, v) - \sigma^*(x) \int_{|v'|=1} f^+ dv' = S(x).$$

Condition aux limites

Si on note  $D$  le domaine spatial, les conditions aux limites de flux nul sont

$$f(x, v) = 0 \text{ pour } (x, v) \in \Gamma^- = \{(x, v) \in \partial D \times \{|v'| = 1\} \text{ tel que } v \cdot n < 0\}.$$

Elles deviennent

$$0 = f^+(x, v) + f^-(x, v) = f^+(x, v) - \frac{1}{\sigma(x)} v \cdot \nabla_x f^+(x, v) \text{ pour } v \cdot n(x) < 0.$$

Mais on a aussi que  $f(x, -v) = 0$  pour  $v \cdot n(x) > 0$  et donc que

$$0 = f^+(x, v) - f^-(x, v) = f^+(x, v) + \frac{1}{\sigma(x)} v \cdot \nabla_x f^+(x, v) \text{ pour } v \cdot n(x) > 0.$$

Au total la condition aux limites est équivalente à

$$v \cdot \nabla_x f^+(x, v) + \text{sign}(v \cdot n(x)) \sigma(x) f^+(x, v) = 0 \text{ pour } x \in \partial D.$$

Formulation variationnelle du flux pair

On introduit la forme bilinéaire symétrique

$$\begin{aligned}
 a(f, g) &= \int_D \int_{|v|=1} \left( \frac{1}{\sigma(x)} v \cdot \nabla_x f \ v \cdot \nabla_x g + \sigma(x) f g \right) dx \, dv \\
 &\quad - \int_D \sigma^*(x) \left( \int_{|v|=1} f \, dv \right) \left( \int_{|v|=1} g \, dv \right) dx + \int_{\partial D} \int_{|v|=1} f g |n \cdot v| \, dx \, dv
 \end{aligned}$$

et la forme linéaire

$$L(g) = \int_D \int_{|v|=1} g(x, v) S(x) \, dx \, dv.$$

**Lemme.** Soit une fonction régulière  $f^+(x, v)$ . Alors  $f^+$  est une solution de l'équation du flux pair si et seulement si  $f^+$  est une solution de la [formulation variationnelle](#),

$$\text{trouver } f^+ \in W \text{ tel que } a(f^+, g) = L(g) \quad \forall g \in W,$$

avec  $W = \{g(x, v) \in L^2(D \times \{|v| = 1\}) \text{ et } v \cdot \nabla_x g \in L^2(D \times \{|v| = 1\})\}$ .

## Méthode de Monte-Carlo

Densité de particules  $f(t, x, v)$

$$\begin{cases} \partial_t f + v \cdot \nabla_x f + \sigma f = \sigma \int_{|v'|=1} f(t, x, v') dv', & x \in \mathbb{R}^N, |v| = 1, t > 0, \\ f(0, x, v) = f^{in}(x, v), \end{cases}$$

- ➡ Voir le cours de C. Graham et D. Talay !
- ➡ Méthode probabiliste.
- ➡ **Méthode Lagrangienne** et non pas Eulérienne (comme les autres présentées ici).
- ➡ On simule des trajectoires de particules et on déduit par moyennisation les valeurs des densités ou flux.

Pour un grand nombre  $p$  de particules on calcule leurs trajectoires avec les ingrédients suivants.

- ✧ **Temps de libre parcours entre deux collisions:**  $(\tau_n)_{n \geq 0}$  suite de variables aléatoires indépendantes à valeurs dans  $\mathbb{R}_+$  distribuées sous la loi exponentielle de paramètre  $\sigma$ , c'est à dire que

$$\text{Prob}(\tau_n > t) = e^{-\sigma t}, \quad t \geq 0.$$

- ✧ **Temps discret:**  $T_n = \sum_{j=0}^{n-1} \tau_j, \quad n \geq 1.$

- ✧ **Vitesse après collision:**  $(V_n)_{n \geq 1}$  suite de vecteurs aléatoires indépendants distribués uniformément sur la sphère unité  $|V_n| = 1.$

- ✧ **Trajectoires:** pour  $T_n \leq t < T_{n+1}$  on pose

$$X(t) = X(T_n) - (t - T_n)V_n, \quad V(t) = V_n$$

La moyenne empirique, i.e. l'espérance, donne une approximation de la solution  $f(t, x, v).$