

Ecole doctorale  
Université de Bordeaux  
Institut des mathématiques de Bordeaux

Mémoire en vue d'obtenir  
l'Habilitation à Diriger des Recherches  
en Mathématiques

CONTRIBUTIONS À L'ANALYSE MATHÉMATIQUE,  
À LA MODÉLISATION ET À LA SIMULATION DE  
QUELQUES ÉQUATIONS  
CINÉTIQUES ET FLUIDES.

*Mémoire de synthèse*

Stéphane BRULL

Université de Bordeaux I

Soutenu le lundi 19 novembre devant le jury composé de

<b>R. Abgrall</b>	Président	Université de Bordeaux
<b>C. Berthon</b>	Rapporteur	Université de Nantes
<b>J.A. Carrillo</b>	Rapporteur	Université de Barcelone
<b>P. Charrier</b>	Invité	Université de Bordeaux
<b>L. Desvillettes</b>	Rapporteur	ENS Cachan-IUF
<b>B. Dubroca</b>	Examineur	Ingénieur-chercheur CEA
<b>V. Giovangigli</b>	Examineur	Ecole Polytechnique Palaiseau
<b>L. Mieussens</b>	Examineur	Université de Bordeaux
<b>A. Nouri</b>	Examinatrice	Université de Marseille



# Table des matières

Table des matières	I
Introduction	6
<b>I Modèles cinétiques.</b>	<b>7</b>
<b>1 Equation de Boltzmann stationnaire à plusieurs composantes</b>	<b>9</b>
1.1 Le modèle mathématique	9
1.2 Description des résultats	10
<b>2 Effet fantôme pour un système d'équations cinétiques</b>	<b>13</b>
2.1 Modèle mathématique	13
2.2 Développement asymptotique	15
2.3 Etude du reste.	15
2.3.1 Problème linéarisé.	16
2.3.2 Décomposition du reste.	16
2.3.3 Contrôle du reste.	17
2.3.4 Estimations $L^2$ sur le reste du problème linéarisé.	17
2.3.5 Estimation sur le reste du problème linéarisé	18
<b>3 Equations de coagulation-fragmentation</b>	<b>19</b>
3.1 Position du problème	19
3.2 Description des résultats	20
3.2.1 Cas du transport pur.	20
3.2.2 Cas du transport et de la diffusion.	20
<b>II Modèles pour les régimes transitionnels.</b>	<b>23</b>
<b>4 Dérivation de modèles BGK.</b>	<b>25</b>
4.1 Introduction	25
4.2 Cas monoatomique. ([44])	26
4.3 Cas polyatomique ([45])	27
4.3.1 Notations	27
4.3.2 Construction du modèle.	28
4.3.3 Retour vers l'équilibre.	29
4.4 Cas des mélanges ([43]).	29
4.4.1 Notations	29
4.4.2 Propriétés à vérifier pour l'opérateur de relaxation	30
4.4.3 Système de Navier-Stokes	31
4.4.4 Calcul des coefficients de relaxation	31
4.4.5 Définition de l'opérateur de relaxation de Fick	32

4.4.6	Limite hydrodynamique	33
4.5	Cas des mélanges réactifs	33
4.5.1	Prise en compte du terme chimique	34
4.5.2	Propriété du modèle	35
4.5.3	Limites hydrodynamiques pour les réactions lentes	35
<b>5</b>	<b>Modèles aux moments <math>M_n</math></b>	<b>37</b>
5.1	Principe de la fermeture aux moments angulaire	37
5.2	Equation cinétique classique	38
5.3	Problème de réalisabilité	39
5.4	Le modèle $M_1$	40
5.4.1	Propriétés entropiques du modèle continu	40
5.4.2	Semi-discrétisation du problème	41
5.4.3	Domaine de réalisabilité et propriétés entropiques du schéma	42
5.4.4	Résultats numériques	42
5.5	Généralisation à un nombre quelconque de moments	46
5.5.1	Equation cinétique semi-discrétisée	48
5.5.2	Modèle aux moments continu	49
5.5.3	Modèle à N moments pour l'équation semi-discrétisée	50
<b>6</b>	<b>Méthodes numériques basées sur des grilles locales en vitesse</b>	<b>53</b>
6.1	Un modèle cinétique 1D et sa discrétisation en vitesse standard	53
6.2	Une nouvelle approche par grille locale en vitesse	54
6.2.1	La méthode	54
6.2.2	Etape d'interpolation	56
6.2.3	Grille locale en vitesse non symétrique	56
6.3	Résultats numériques	57
6.3.1	Cas test de Sod	57
6.3.2	“Two interacting blast waves”	58
6.3.3	Problème de transfert de chaleur	58
<b>III</b>	<b>Modèles fluides</b>	<b>63</b>
<b>7</b>	<b>Modèles fluides dérivés à partir de modèles cinétiques</b>	<b>65</b>
7.1	Equation de Boltzmann inélastique	65
7.1.1	L'équation de Boltzmann linéaire inélastique	65
7.1.2	Limite hydrodynamique et équation d'Euler	66
7.2	Modèles hydrodynamiques quantiques	67
7.2.1	Dérivation du système de Navier-Stokes quantique	67
7.2.2	Le système dans le cas irrotationnel	68
<b>8</b>	<b>Modèles fluides pour les plasmas</b>	<b>71</b>
8.1	Problèmes de diffusion anisotrope	72
8.1.1	Présentation de la méthode	72
8.1.2	Discrétisation spatiale	73
8.1.3	Résultats numériques pour le problème elliptique	74
8.2	Application au système d'Euler-Lorentz en régime de dérive ([38])	76
8.2.1	Présentation du modèle	76
8.2.2	Résultats numériques pour Euler-Lorentz en régime de dérive	77
8.3	Problème diffusif anisotrope non linéaire ([39])	78
8.3.1	Cadre linéaire	78
8.3.2	Linéarisation du problème non linéaire	81
8.3.3	Méthode numérique	82
8.3.4	Résultats numériques pour le schéma AP	83

8.3.5	Convergence de l'algorithme de Gummel . . . . .	83
8.4	Généralisation au système d'Euler-Lorentz bi-fluide ([37]) . . . . .	86
8.4.1	Schémas AP pour le modèle bifluide d'Euler-Lorentz régularisé . . . . .	87
8.4.2	Résultats numériques . . . . .	88
8.4.3	Impact du paramètre de perturbation $C$ . . . . .	89
<b>9</b>	<b>Milieux poreux.</b>	<b>91</b>
9.1	Le modèle mathématique . . . . .	91
9.2	Description des résultats . . . . .	92
<b>IV</b>	<b>Perspectives</b>	<b>95</b>



# Remerciements

 Je suis d'abord reconnaissant envers José Antonio Carrillo, Christophe Berthon et Laurent Desvillettes qui ont accepté de rapporter sur ce mémoire d'habilitation. Je les remercie pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail. J'en suis très honoré.

Je remercie également Rémi Abgrall pour avoir accepté de présider mon jury malgré son emploi du temps surchargé.

Je tiens également à remercier Luc Mieussens pour avoir accepté de faire partie de ce jury et pour les collaborations que nous avons eues ensemble.

Un grand merci à Anne Nouri qui n'a pas pu être présente pour ma soutenance mais qui m'a accompagné lors de mes premiers pas dans la recherche.

Un grand merci à Vincent Giovangigli pour avoir accepté de faire partie de mon jury et de m'avoir initié à CHEMKIN. Son ouvrage sur "Multicomponent Flow Modeling" reste pour moi une source d'inspiration.

Une mention très spéciale pour Jacques Schneider à qui je dois beaucoup et qui est devenu plus qu'un collaborateur. Ses travaux sur la réalisabilité sont pour moi une référence. Notre collaboration a débuté à l'ISITV lorsque j'étais ATER et j'espère qu'elle se continuera encore de nombreuses années. Dans la même lignée, un grand merci au mécanicien Bourbakiste pourfendeur de l'oeuvre de Cercignani Vincent Pavan pour nos discussions sur la physique des modèles cinétiques.

Une seconde mention spéciale à Bruno Dubroca pour ses encouragements incessants et sa gentillesse. Il m'a toujours accordé sa confiance pour l'encadrements de nos doctorants et a toujours su me communiquer son enthousiasme. Nos discussions de travail se terminant en franche rigolade resteront inoubliables. Qu'il reçoive toute mon amitié.

Une troisième mention spéciales à Pierre Charrier qui fut il y a déjà 6 ans rapporteur de ma thèse. Dès mon arrivée à Bordeaux, il a su judicieusement orienter mes recherches en me faisant part de son expérience. Merci maître Yoda pour tous vos précieux conseils!!!!

Toute ma gratitude va également à mes collaborateurs avec qui j'ai beaucoup appris. En particulier, je tiens à remercier Florian Méhats pour notre collaboration sur les modèles quantiques et pour son accueil chaleureux à chacune de mes visites à Rennes. Un grand merci également à Pascal Azérad pour ses encouragements et son soutien sans faille. Je salue également Jessy Mallet que j'ai eu l'occasion d'accompagner au cours de sa thèse. Je lui souhaite bonne chance pour sa jeune carrière. J'exprime toute ma reconnaissance à Leif Arkeryd pour son accueil à Göteborg lorsque j'étais un petit thésard et pour la disponibilité dont il a toujours fait preuve pour répondre à mes questions. Les trois mois passés à Chalmers resteront inoubliables.

Ma reconnaissance va également à Pierre Degond qui m'a accueilli à Toulouse en post-doc et qui m'a initié aux plasmas. Il a su m'ouvrir sa porte à l'époque où j'étais à la recherche d'un poste de permanent. Un grand merci à Fabrice Deluzet pour m'avoir initié à la programmation ainsi qu'à Alexandre Mouton pour les collaborations que nous avons eues en particulier lors du CEMRACS 2010.

Un grand merci également à tous ceux qui ont cru en moi en particulier dans les moments difficiles et qui m'ont porté par leurs encouragements. Je pense en particulier à mon professeur de Marseille Gérard Fardoux.

Je tiens à nouveau à remercier Pierre Charrier et Bruno Dubroca pour leur aide lors de la préparation de la soutenance de cette habilitation.

Je remercie très chaleureusement les personnes collègues ou amis que j'ai pu rencontrer des divers laboratoires que j'ai parcourus (Marseille, Toulon, Montpellier, Toulouse, Bordeaux, ...) ou au gré des

conférences. Je remercie en particulier Frédérique Charles, Laurent Boudin, Mihai Bostan, Sylvain Maire, Cédric Galusinski, Frédéric Golay, Marie-Hélène Vignal, Mohammed Lemou, Ayman Moussa, Nicolas Crouseille, le regretté Naoufel Ben Abdallah ainsi que mes collègues bordelais : Mario, Marc, Jérémy, Monsieur Bony, Denise, Pietro, Gilles, Rafik, Alain . . .

Et enfin le meilleurs pour la fin. Je remercie Sophie, Ludovic et Raphaël pour leur amour au quotidien. Ce mémoire leur est dédié.

# Introduction

**S**E mémoire est consacré à l'étude de quelques équations cinétiques et fluides tant du point de vue de l'analyse mathématique, de la modélisation que de la simulation numérique. Je me suis intéressé plus précisément à l'étude mathématique et numérique de problèmes de physique, principalement en dynamique des fluides mais aussi en physique des plasmas et en théorie quantique. Ces modèles possèdent trois niveaux de description pour lesquels la théorie cinétique intervient comme un outil fondamental : le niveau macroscopique (Euler, Navier-Stokes, Euler-Lorentz, ...), le niveau mésoscopique (BGK, modèles  $M_n$ , ...) et le niveau microscopique (Boltzmann, ...).

Ce document est alors divisé en trois parties, chacune traitant d'un des niveaux de description cités ci-dessus.

Dans la suite de cette introduction, nous proposons ci-dessous un résumé succinct de l'ensemble de ces trois parties.

## I - Modèles cinétiques

Dans les deux premiers chapitres de cette partie, on démontre avec des outils totalement différents un théorème d'existence pour l'équation de Boltzmann stationnaire.

Le premier chapitre porte sur l'équation de Boltzmann stationnaire pour un mélange de deux gaz raréfiés dans un domaine en espace situé entre deux plans infinis parallèles et une variable de vitesse tridimensionnelle. Ce modèle physique est relié aux problèmes d'évaporation condensation largement étudiés dans l'équipe japonaise de Kyoto. Plus précisément, l'une des deux composantes du gaz possède des conditions aux limites rentrantes imposées tandis que la seconde vérifie des conditions de type Maxwell diffuses. La stratégie de preuve est alors de construire dans un premier temps, par des techniques de point fixe une solution d'un problème approché par des procédés standards de régularisation en espace et de troncature en vitesse. On passe ensuite à la limite sur les solutions approchées ainsi obtenues. On obtient alors pour des molécules pouvant être différentes, des solutions renormalisées pour des potentiels mous et des solutions faibles pour des potentiels durs.

Dans le second chapitre, on considère le même modèle que précédemment mais proche d'un état d'équilibre. Ainsi nous montrons un théorème d'existence pour deux situations physiques différentes par des argument de type perturbatif. La solution du problème est construite comme un développement asymptotique et un reste. Plus précisément, on effectue un développement de type Hilbert par rapport à un petit paramètre qui peut être identifié au nombre de Knudsen jusqu'à l'ordre 2. L'ordre 0 se réduit aux équations de Navier Stokes incompressibles stationnaires avec vitesse nulle. A l'ordre 1, apparaît dans l'équation sur la température le terme d'ordre 1 qui modifie le terme d'ordre 0 de la température. C'est ce que l'on appelle le "Ghost-effect" qui a été introduit par Sone. On obtient finalement une hiérarchie de modèles fluides que l'on ferme. Ensuite l'obtention des conditions aux limites adéquates pour les termes du développement s'obtient en rajoutant des couches de Knudsen. Enfin, la dernière partie du problème consiste alors à contrôler ce reste. Ce contrôle s'opère en généralisant à un cadre multifluide l'approche d'Esposito, Lebowitz et Marra ([93], [94]).

Nous achevons cette partie par un chapitre sur les modèles de coagulation-fragmentation. Dans ce chapitre, un théorème d'existence est démontré pour un modèle de coagulation-fragmentation discret

couplé à un terme de transport et un terme de diffusion.

## II - Modèles pour les régimes transitionnels

Cette partie est consacrée aux modèles intermédiaires entre les modèles cinétiques et les modèles fluides. Plus précisément, on construit dans un premier chapitre des modèles BGK. Leur usage est en effet pertinent en régime raréfié mais plutôt proche du régime fluide. Dans un second chapitre, on s'intéresse aux modèles aux moments angulaires  $M_n$  du point de vue de la modélisation et de la simulation numérique. Enfin, dans le dernier chapitre, on développe une nouvelle méthode numérique déterministe adaptative sur la variable de vitesse microscopique.

Dans un premier chapitre, nous exposons une nouvelle méthode pour établir des modèles de relaxation permettant d'ajuster de bons coefficients de transport à la limite hydrodynamique. L'idée générale de la construction est d'introduire des moments non conservés avec des taux de relaxation qui leur sont associés, puis de résoudre un problème de minimisation d'entropie sous contrainte. Ces taux sont ensuite déterminés au cours d'un développement de Chapman-Enskog pour ajuster les coefficients de transport. Nous proposons ainsi une nouvelle approche de l'Ellipsoidal Statistical Model dans le cas monoatomique puis polyatomique avec une nouvelle preuve du théorème H. On construit ensuite un modèle BGK pour un mélange de gaz permettant de donner une bonne matrice de Fick. Ce modèle jouit de plus de bonnes propriétés mathématiques (positivité de la fonction de distribution, théorème H, lois de conservation). Enfin ce dernier modèle est étendu à des mélange de gaz réactifs via un splitting avec un opérateur BGK chimique.

Le second chapitre traite des modèles aux moments  $M_n$  pour les plasmas qui constituent des modèles intermédiaires entre les modèles fluides et les modèles cinétiques. La motivation est d'obtenir des modèles qui soient un bon compromis entre la précision des modèles cinétiques et le faible coût de calcul des modèles fluides. L'idée de la construction est de développer la fonction de distribution selon sa partie isotrope et sa première anisotropie, d'effectuer une prise aux moments angulaires sur les modèles cinétiques et de définir une fermeture par un principe de minimisation d'entropie pour obtenir des systèmes fermés. On obtient ainsi le modèle  $M_1$  à partir des opérateurs de Landau et Fokker-Planck. On définit ensuite un schéma entropique que l'on valide sur une batterie de cas tests. Puis, on étend le modèle  $M_1$  à un modèle  $M_n$  avec un nombre arbitraire de moments. Une approximation de l'opérateur de Fokker-Planck est alors à nouveau proposée afin de surmonter le problème de la non-conservation du domaine de réalisabilité des moments par l'approximation usuelle. Enfin, on dérive un schéma numérique en appliquant la méthode aux moments à un système préalablement discrétisé en énergie que l'on montre être entropique. Lors de la construction du schéma, le point clé est l'usage d'une moyenne entropique qui garantisse l'équivalence au niveau discret de la forme de Landau et celle de Rosenbluth de l'opérateur de collision. Cela garantit alors le caractère entropique du schéma.

Dans le dernier chapitre, on développe une nouvelle méthode numérique déterministe basée sur l'usage de grilles locales en vitesse. Les méthodes standards sont basées sur l'usage de grilles globales fixes au cours du temps et identiques en chacun des points de l'espace physique. Elles offrent ainsi une certaine simplicité lors de la mise en oeuvre de la méthode. Cependant elles sont inopérantes, car trop coûteuses, dans les situations physiques comportant de forts gradients de température ou de vitesse. Cette situation se produit par exemple pour les problèmes de corps de rentrée dans l'atmosphère. La méthode est ensuite développée et testée pour un modèle BGK qui correspond au modèle utilisé dans la pratique. Un des résultats les plus probants pour la méthode concerne le cas test intitulé "Two interacting Blast Waves". La méthode classique nécessite 2551 points dans la grille de vitesse tandis que la présente méthode se contente de 30 points pour des résultats comparables.

## III - Modèles fluides

Dans cette dernière partie, on s'intéresse aux modèles fluides sur plusieurs plans : la construction de modèles fluides à partir de modèles cinétiques, la mise au point de schémas AP pour le modèle d'Euler-Lorentz et enfin la preuve de l'existence d'un théorème pour un modèle poreux diphasique.

Le premier chapitre est consacré à la construction de modèles fluides dérivés à partir de modèles

cinétiques. Pour établir ces modèles, il est nécessaire d’avoir une fermeture. Dans un premier problème, le point de départ est un modèle cinétique de type Boltzmann linéaire inélastique modélisant l’évolution d’impuretés dans un fluide ambiant et collisionnant avec ce dernier de manière inélastique. Nous établissons alors un système d’Euler dissipatif avec des termes mesurant les relaxations de l’impulsion et de l’énergie. Le second problème concerne la dérivation d’un modèle de Navier-Stokes quantique à partir de l’équation de Wigner-BGK. Les travaux de Degond et Ringhoffer qui généralisent sur le plan formel ceux de Levermore à un cadre quantique permettent de définir des Maxwelliennes locales “quantiques”. Ainsi en effectuant un développement de Chapman-Enskog, on établit formellement des termes visqueux quantiques.

Dans le second chapitre, on présente des méthodes numériques performantes pour l’approximation des équations de la physique des plasmas magnétisés (ITER). Plus précisément, on s’intéresse à la construction de schémas numériques pour le système d’Euler isotherme de la mécanique des fluides soumis à une force de Lorentz de grande amplitude. Il s’agit de construire des schémas numériques stables et précis qui soient uniformément stables par rapport à certains paramètres du modèle et qui soient en plus consistant avec le modèle limite. De tels schémas sont appelés “Asymptotic preserving” (AP). Par ailleurs, on souhaite également obtenir une méthode indépendante de la géométrie du champ magnétique, ce qui est en rupture avec les méthodes développées dans la pratique. Pour cela, on est ramené à résoudre un problème elliptique fortement anisotrope pour la vitesse parallèle le long des lignes de champ. Par ailleurs, pour pouvoir traiter des modèles de type Euler complet comportant des lois de pression non linéaires, il est alors nécessaire de pouvoir résoudre des problèmes diffusifs fortement anisotropes non linéaires. Nous présentons alors pour ce dernier modèle diffusif un schéma AP qui s’appuie sur une méthode itérative de Gummel. Nous achevons enfin cette étude par un système d’Euler-Lorentz isotherme bifluide couplé via l’équation de neutralité. Cela permet alors de traiter des modèles physiquement plus réalistes. Nous présentons à nouveau un schéma numérique AP pour ce modèle en limite de dérive.

Enfin, le dernier chapitre de cette partie traite d’un résultat d’existence concernant un modèle compressible diphasique pour les milieux poreux. Ce modèle se compose de deux équations de conservation de masse couplées par une loi de Darcy. On fait alors l’hypothèse de faible pression capillaire qui permet de décrire le modèle avec la pression globale et la variable de saturation de la première composante. Ainsi on montre que le système considéré possède une solution lorsque la porosité dépend de la pression globale. On étend ainsi des résultats de C.Galusinski et M.Saad où cela n’avait pas été pris en compte.

## IV Publications

### 1. Modèles cinétiques.

A1 *The stationary Boltzmann equation for a two component gas in the slab for soft forces.* Math. Meth. Appl. Sci. (2008), 31, 153-178.

A2 *The stationary Boltzmann equation for a two component gas in the slab for hard forces.* Math. Meth. Appl. Sci. (2008), 31, 1653-1666.

A3 *The stationary Boltzmann equation for a two component gas in the slab for different masses.* Advances in Differential equations (2010), Vol 15, No 11-12.

A4 *Problem of evaporation-condensation for a two component gas in the slab.* Kinetic and Related Models, (2008) Vol 1, No 2, 185-221.

A5 *Ghost effect for vapor-vapor mixture.* Kinetic and Related Models, (2012), vol 5, No 1.

A6 *Discrete coagulation-fragmentation equations with transport and diffusion.* Annales de la Faculté de Toulouse, (2008), vol XVII, no3, pp 1-22.

### 2. Modèles pour les régimes transitionnels.

A7 *A new approach of the Ellipsoidal Statistical Model.* Cont. Mech. Thermodyn. 20 (2008), no.2, 63-74. Avec J.Schneider

A8 *On the Ellipsoidal Statistical Model for polyatomic gases.* Cont. Mech. Thermodyn. 20 (2009), no.8, 489-508. Avec J.Schneider.

A9 *Derivation of BGK models for mixtures.* European J.Mechanics (B fluids) (2012), 74-86. Avec V.Pavan et J.Schneider

- A10 *Derivation of BGK models for reactive mixtures.* Soumis. Avec J.Schneider.
- A11 *Angular momentum model for the classical and relativistic Maxwell-Fokker-Planck equation of electrons* Avec J.Mallet et B.Dubroca. En révision.
- A12 *Maximum entropy for N-moment system* Avec J.Mallet et B.Dubroca. En révision.
- A13 *A new numerical method for kinetic equations based on local grids* Avec L.Mieussens. En finalisation.

Comptes-rendus d'acte de conférences :

- P01 *A BGK model for gas mixtures.* Rarefied Gas Dynamics : 29<sup>th</sup> International Symposium, Avec V.Pavan et J.Schneider

### 3. Modèles fluides

- A14 *Degenerate anisotropic elliptic problem and magnetized plasma simulations.* CICP 11 (2012), pp 147-178. Avec P.Degond et F.Deluzet.
- A15 *Numerical resolution of an anisotropic non-linear diffusion problem.* (soumis) Avec F.Deluzet et A.Mouton.
- A16 *Asymptotic-Preserving scheme for a bi-fluid Euler-Lorentz model.* Kinet. Relat. Models. no 4, (2011), 991-1023. Avec P.Degond, F.Deluzet et A.Mouton.
- A17 *Dissipative hydrodynamic models for the diffusion of impurities in a gas,* Appl.Math.Lett. 19 (2006), no.6, 516-521. Avec L.Pareschi.
- A18 *Derivation of viscous correction terms for the isothermal quantum Euler model.* Zamm Volume 90 Issue 3, (2010). Avec F.Méhats.
- A19 *Two compressible immiscible fluids in porous media : The case where the porosity depends on the pressure.* Adv. Diff. equ. (2008), Vol 13, No 7-8, 781-800.

Comptes-rendus d'acte de conférences :

- P02 S. Brull P. Degond, F. Deluzet, A. Mouton, *Asymptotic-preserving scheme for a two-fluid Euler-Lorentz model.* CEMRACS'10 research achievements : numerical modeling of fusion, ESAIM Proc., 32, EDP Sci., Les Ulis, (2011), 18-22.

Première partie  
Modèles cinétiques.



# Chapitre 1

## Equation de Boltzmann stationnaire à plusieurs composantes.

Ce chapitre décrit les travaux obtenus dans ([30, 32, 35]) pour l'équation de Boltzmann stationnaire à plusieurs composantes.

### 1.1 Le modèle mathématique

On étudie dans cette sous partie l'équation de Boltzmann stationnaire à deux composantes A et B en régime raréfié. On se placera pour la variable d'espace sur l'intervalle  $[-1, 1]$ . Dans ce cas, l'équation de Boltzmann stationnaire s'écrit

$$\begin{aligned}\xi \frac{\partial}{\partial x} f^A(x, v) &= Q_{AA}(f^A, f^A)(x, v) + Q_{AB}(f^A, f^B)(x, v), \\ \xi \frac{\partial}{\partial x} f^B(x, v) &= Q_{BB}(f^B, f^B)(x, v) + Q_{BA}(f^B, f^A)(x, v),\end{aligned}\tag{1.1.1}$$

$$x \in [-1, 1], v \in \mathbb{R}^3.$$

L'opérateur de Boltzmann se définit pour tous  $\{\alpha, \beta\} \in \{A, B\}$  par

$$Q_{\alpha, \beta}(f^\alpha, f^\beta)(v) = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{S}^2} B^{\alpha, \beta}(f^\alpha(x, v'_*) f^\beta(x, v') - f^\beta(x, v_*) f^\alpha(x, v)) d\omega dv_*\tag{1.1.2}$$

où

$$v'^{(\beta\alpha)} = v + \frac{2m^\beta}{m^\alpha + m^\beta} \langle v_* - v, \omega \rangle \omega, \quad v_*'^{(\beta\alpha)} = v_* - \frac{2m^\beta}{m^\alpha + m^\beta} \langle v_* - v, \omega \rangle \omega.\tag{1.1.3}$$

La variable de vitesse  $v \in \mathbb{R}^3$  a pour coordonnées  $(\xi, \eta, \chi)$  et  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  représente le produit scalaire euclidien dans  $\mathbb{R}^3$ . Soit  $\omega \in \mathbb{S}^2$  représenté par l'angle polaire (avec l'axe  $v - v_*$ ) et l'angle azimutal  $\phi$ . Plus précisément, on considère des noyaux de collision du type

$$B^{\alpha, \beta}(v - v_*, \omega) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left( \frac{d^\alpha + d^\beta}{2} \right)^2 |v - v_*|^\beta b(\theta),$$

avec  $b \in L^1_+([0, 2\pi])$ ,  $b(\theta) \geq c > 0$  *p.p.*. De plus, pour  $0 \leq \beta < 2$  on parlera de potentiels durs et pour  $-3 \leq \beta < 0$  on parlera de potentiels mous.

On définit ensuite la fréquence de collision comme le vecteur  $(\nu_A, \nu_B)$ ,

$$(\forall \alpha \in \{A, B\}), \quad \nu_\alpha = \sum_{\beta \in \{A, B\}} \int B^{\alpha, \beta} f_\beta d\omega dv_*.$$

Sur le bord du domaine la composante  $A$  possède un profil de type donnée rentrante,

$$f_A(-1, v) = kM_-(v), \xi > 0, \quad f_A(1, v) = kM_+(v), \xi < 0, \quad (1.1.4)$$

où  $k$  est une constante positive fixée au cours de la construction. Elle dépend de la masse de l'espèce  $A$ . La composante  $B$  vérifie des conditions de bord de type Maxwell diffuse,

$$\begin{aligned} f_B(-1, v) &= \left( \int_{\xi' < 0} |\xi'| f_B(-1, v') dv' \right) M_-(v), \quad \xi > 0, \\ f_B(1, v) &= \left( \int_{\xi' > 0} \xi' f_B(1, v') dv' \right) M_+(v), \quad \xi < 0. \end{aligned} \quad (1.1.5)$$

$M_+$  et  $M_-$  sont les Maxwelliennes normalisées

$$M_-(v) = \frac{1}{2\pi T_-^2} e^{-\frac{|v|^2}{2T_-}} \quad \text{et} \quad M_+(v) = \frac{1}{2\pi T_+^2} e^{-\frac{|v|^2}{2T_+}}.$$

Les solutions du problème sont alors étudiées sous la contrainte suivante

$$\int (1 + |v|)^\beta f_A(x, v) dx dv = M_A, \quad \int (1 + |v|)^\beta f_B(x, v) dx dv = M_B. \quad (1.1.6)$$

Ces quantités seront alors appelées  $\beta$ -normes.

Dans ([151]), un problème physique analogue d'évaporation/condensation est considéré. Les auteurs montrent numériquement qu'un tel système admet une solution lorsque l'opérateur de Boltzmann est remplacé par le modèle BGK de Garzo et al ([103]) lorsque  $k = 1$  dans 1.1.4. Signalons au passage que nous reviendrons plus en détail sur les modèles BGK dans la section 4.4 et que l'obtention de bons modèles BGK pour les mélanges constituent un problème important du point de vue des applications.

## 1.2 Description des résultats

Dans ce travail, les solutions faibles du problème stationnaire seront considérées au sens de la définition 1.2.1.

**Définition 1.2.1.** Soient  $M_A$  et  $M_B$  deux quantités positives données.  $(f_A, f_B)$  est une solution faible du problème de Boltzmann stationnaire de  $\beta$ -normes  $M_A$  et  $M_B$ , si  $f_A, f_B, \nu_A$  et  $\nu_B \in L_{loc}^1((-1, 1) \times \mathbb{R}^3)$ , si la contrainte 1.1.6 est satisfaite, et s'il existe une constante  $k > 0$  telle que pour toute fonction  $\varphi \in C_c^1([-1, 1] \times \mathbb{R}^3)$   $\varphi$  s'annulant dans un voisinage de  $\xi = 0$ , et sur  $\{(-1, v); \xi < 0\} \cup \{(1, v); \xi > 0\}$ ,

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 \int_{\mathbb{R}^3} (\xi f^A \frac{\partial \varphi}{\partial x} + Q_{AA}(f^A, f^A) + Q_{AB}(f^A, f^B) \varphi)(x, v) dx dv \\ &= k \int_{\mathbb{R}^3, \xi < 0} \xi M_+(v) \varphi(1, v) dv - k \int_{\mathbb{R}^3, \xi > 0} \xi M_-(v) \varphi(-1, v) dv, \\ & \int_{-1}^1 \int_{\mathbb{R}^3} (\xi f^B \frac{\partial \varphi}{\partial x} + Q_{BB}(f^B, f^B) + Q_{BA}(f^B, f^A) \varphi)(x, v) dx dv, \\ &= \int_{\xi' < 0} |\xi| M_+(v) \varphi(1, v) dv \left( \int_{\xi' > 0} \xi' f_B(1, v') dv' \right) \\ & \quad - \int_{\xi' > 0} \xi M_-(v) \varphi(-1, v) dv \left( \int_{\xi' < 0} \xi' f_B(-1, v') dv' \right). \end{aligned}$$

On considère ensuite des solutions renormalisées au sens suivant. Soit  $g$  définie pour  $x > 0$  par  $g(x) = \ln(1 + x)$ .

**Définition 1.2.2.** Soient  $M_A$  et  $M_B$  deux quantités positives données.  $(f_A, f_B)$  est une solution renormalisée du problème de Boltzmann stationnaire de  $\beta$ -normes  $M_A$  et  $M_B$ , si  $f_A$  satisfait 1.1.6 et s'il existe

une constante  $k > 0$  telle que pour toute fonction test  $\varphi \in C_c^1([-1, 1] \times \mathbb{R}^3)$  s'annulant dans un voisinage de  $\xi = 0$  et sur  $\{(-1, v); \xi < 0\} \cup \{(1, v); \xi > 0\}$ ,

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^1 \int_{\mathbb{R}^3} (\xi g(f_A) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{Q_{AA}(f_A, f_A)}{1 + f_A} \varphi + \frac{Q_{AB}(f_A, f_B)}{1 + f_A} \varphi)(x, v) dx dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3, \xi < 0} \xi g(kM_+(v)) \varphi(1, v) dv - \int_{\mathbb{R}^3, \xi > 0} g(\xi kM_-(v)) \varphi(-1, v) dv, \\ & \int_{-1}^1 \int_{\mathbb{R}^3} (\xi g(f_B) \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{Q_{BB}(f_B, f_A + f_B)}{1 + f_B} \varphi + \frac{Q_{BA}(f_B, f_A)}{1 + f_B} \varphi)(x, v) dx dv, \\ &= \int_{\xi < 0} \xi g\left(\int_{\xi' > 0} \xi' f_B(1, v') dv'\right) M_+(v) \varphi(1, v) dv \\ &\quad - \int_{\xi > 0} \xi g\left(\int_{\xi' < 0} \xi' f_B(-1, v') dv'\right) M_-(v) \varphi(-1, v) dv. \end{aligned}$$

Cette situation a été étudiée pour des gaz à une composante dans ([8], [9]). L'importance de ces résultats est due au fait que la théorie de Di Perna-Lions ([86]) ne couvre pas le cas stationnaire. Dans ([8]), les auteurs considèrent l'équation de Boltzmann stationnaire à une composante avec les conditions de type (1.1.4) tandis que ([9]) traite des conditions de bord de type Maxwell diffusées (1.1.5). Notons au passage que dans ([9]), les auteurs utilisent un changement d'inconnue en exploitant au passage le caractère linéaire des conditions de bord ainsi que le caractère monodimensionnel en espace du modèle. Cette transformation étant inopérante dans ([8]), nous avons procédé autrement. Par ailleurs, signalons au passage que dans ([141]), des résultats analogues à ([8, 9]) ont été obtenus pour l'équation de Povzner stationnaire.

Les principaux résultats de cette partie sont les suivants

**Théorème 1.2.1.** *Soient  $\beta$  avec  $0 \leq \beta < 2$ ,  $M_A > 0$  et  $M_B > 0$  il existe une solution faible au problème stationnaire de  $\beta$ -normes égales à  $M_A$  et  $M_B$ .*

*Soit  $\beta$  avec  $-3 < \beta < 0$   $M_A > 0$  et  $M_B > 0$ . Alors il existe une solution renormalisée au problème stationnaire de  $\beta$ -normes égales à  $M_A$  et  $M_B$ .*

Ces théorèmes d'existence sont basés dans un premier temps sur une méthode de point fixe de type Schauder sur un problème approché construit à partir de procédés classiques de régularisation en espace et de troncature en vitesse. Ensuite, on passe à la limite dans la suite d'approximations via des lemmes de compacité (lemmes de moyenne ...). Un des points cruciaux dans ce passage à la limite est l'obtention d'une estimation d'entropie pour la suite des approximations dans le but d'en extraire de la compacité faible. Dans ([30], [32]), cette propriété est obtenue en contrôlant l'entropie du mélange  $f^j = f_A^j + f_B^j$  qui satisfait à une équation de Boltzmann à une composante, lorsque les masses moléculaires sont égales. Ainsi la compacité faible  $L^1$  des fonctions de chaque composante découle du fait que ces quantités sont dominées par leurs analogues à une composante. Cependant lorsque les masses moléculaires sont différentes cette propriété algébrique de l'équation de Boltzmann est fautive. Ainsi, dans ([35]) le théorème d'existence est généralisé au cas où les masses moléculaires sont différentes par une preuve directe.

Un point délicat de ce problème est le passage à la limite dans les termes de trace (1.1.5). Celui-ci peut s'effectuer via la théorie développée dans ([139]). Cependant dans ces travaux, une preuve directe est proposée, exploitant le caractère monodimensionnel en espace du modèle.



## Chapitre 2

# Effet fantôme pour un système d'équations cinétiques

Ce chapitre reprend les articles ([33], [36]) consacrés à l'étude de systèmes cinétiques dans la situation où contrairement à la section précédente, le nombre de Knudsen est petit. De ce fait les techniques mises en jeu seront différentes. Le problème précédent a été résolu par des méthodes de compacité tandis que la situation présente est appréhendée par des techniques perturbatives. Cette étude apporte notamment une justification théorique du phénomène de ghost-effect mis en évidence par Y.Sone ([150]). Ce phénomène apparaît lorsque l'on considère la limite hydrodynamique de l'équation de Boltzmann vers Navier-Stokes incompressible pour un scaling diffusif. Des termes inattendus apparaissent alors. Le responsable de ce phénomène est le champ de vitesse qui est du même ordre que le nombre de Knudsen. Celui-ci disparaît à la limite hydrodynamique mais influence d'autres quantités comme par exemple la température, d'où le nom de "ghost-effect". Plus généralement, le terme de "ghost-effect" utilisé par Y.Sone fait référence à des équations macroscopique possédant des termes dus à la présence de quantités macroscopiques qui disparaissent à la limite fluide.

D'autre part, on peut considérer qu'il existe deux approches différentes des limites hydrodynamiques de l'équation de Boltzmann. La première consiste à partir d'une solution renormalisée de l'équation de Boltzmann pour un certain scaling, d'en prendre les moments et de justifier la convergence vers le système fluide ([14, 15, 105]). Par ailleurs, signalons que le chapitre 7 de la partie sur les modèles fluides traite de la dérivation formelle de systèmes hydrodynamiques à partir de modèles cinétiques complexes par cette approche-là. Dans le cas présent, l'approche est différente et s'inscrit dans celle introduite par De Masi, Esposito, Lebowitz ([77]). Le point de départ est le système fluide pour lequel il existe une solution régulière locale en temps. Cette solution du système hydrodynamique permet alors de construire une solution de l'équation de Boltzmann comme un développement asymptotique dont on contrôle le reste. Citons au passage des travaux reliés à ceux présentés dans ce chapitre dont les résultats établis sont de même nature ([6, 5, 7, 10, 11]). En particulier dans ([6]) une nouvelle inégalité spectrale est démontrée permettant de justifier un autre "ghost-effect" ([7]).

### 2.1 Modèle mathématique

Le modèle mathématique de départ est comme dans le chapitre précédent l'équation de Boltzmann pour un gaz à deux composantes mais prise dans un régime différent

$$\begin{aligned}\xi \frac{\partial}{\partial x} f^A(x, v) &= \frac{1}{\varepsilon} Q(f^A, f^A)(x, v) + \frac{1}{\varepsilon} Q(f^A, f^B)(x, v), \\ \xi \frac{\partial}{\partial x} f^B(x, v) &= \frac{1}{\varepsilon} Q(f^B, f^A)(x, v) + \frac{1}{\varepsilon} Q(f^B, f^B)(x, v),\end{aligned}\tag{2.1.1}$$
$$x \in [-1, 1], \quad v \in \mathbb{R}^3,$$

avec

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2} K_n = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{l}{2}, \quad l = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d^2 n_I}.$$

$l$  est le libre parcours moyen des molécules de vapeur à l'état d'équilibre à la température  $T_I$  et à la densité  $n_I$ ,  $K_n$  est le nombre de Knudsen et  $d$  correspond au diamètre de la molécule.

L'opérateur de collision  $Q$  est pris comme dans (3.1.3, 1.1.3) mais pour des masses moléculaires  $m^\alpha$  égales. C'est pour cela que la dépendance de  $Q_{\alpha,\beta}$  en  $\alpha, \beta$  sera supprimée dans cette section. De plus, le noyau de collision sera pris dans le cas des sphères dures comme  $B(v - v_*, \omega) = |\langle v - v_*, \omega \rangle|$ .

On considère alors deux situations physiques différentes pour notre mélange. La première ([156, 157]) concerne un mélange de deux gaz dont une composante peut se condenser sur les parois du domaine et l'autre non. La seconde situation ([155]) concerne un mélange de deux gaz qui peuvent se condenser sur les parois. Ces deux cas se distinguent donc mathématiquement par les conditions de bord différentes sur les fonctions de distribution.

Pour ([33]), la composante  $A$  vérifie des conditions de bord de type données rentrantes

$$f^A(-1, v) = M_-(v), \quad \xi > 0, \quad f^A(1, v) = \frac{n_{II}}{n_I} M_+(v), \quad \xi < 0. \quad (2.1.2)$$

Les conditions de bord pour la composante  $B$  sont de type réflexion diffuse

$$f^B(-1, v) = M_-(v) \int_{\xi' < 0} |\xi'| f^B(-1, v') dv', \quad \xi > 0, \quad f^B(1, v) = M_+(v) \int_{\xi' > 0} |\xi'| f^B(1, v') dv', \quad \xi < 0, \quad (2.1.3)$$

où  $M_-$  et  $M_+$  sont les distributions Maxwelliennes normalisées

$$M_-(v) = \frac{1}{\pi} \exp(-v^2) \quad \text{et} \quad M_+(v) = \frac{1}{\pi \left(\frac{T_{II}}{T_I}\right)^2} \exp\left(-\frac{v^2}{\frac{T_{II}}{T_I}}\right).$$

De plus la masse  $m > 0$  de gaz  $B$  est fixée comme suit

$$\int_{-1}^1 \int_{\mathbb{R}^3} f^B(x, v) dx dv = m. \quad (2.1.4)$$

Dans la seconde situation étudiée, les composantes  $A$  et  $B$  satisfont

$$\begin{aligned} f^A(-1, v) &= \frac{p_I^A/T_I}{(\pi T_I)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{v^2}{T_I}\right), \quad \xi > 0, \quad f^A(1, v) = \frac{p_{II}^A/T_{II}}{(\pi T_{II})^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{-v^2}{T_{II}}\right), \quad \xi < 0, \\ f^B(-1, v) &= \frac{p_I^B/T_I}{(\pi T_I)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{v^2}{T_I}\right), \quad \xi > 0, \quad f^B(1, v) = \frac{p_{II}^B/T_{II}}{(\pi T_{II})^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{-v^2}{T_{II}}\right), \quad \xi < 0. \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

$T_I$  (resp.  $T_{II}$ ) représente la température des deux phases condensées situées en  $x = -1$  (resp.  $x = 1$ ) et  $p_I^\alpha$  est la pression de saturation des espèces  $\alpha$  à la température  $T_I$  (resp.  $T_{II}$ ). Par souci de simplicité, on considère comme dans [155]  $T_I = p_I^A = 1$ . On suppose de plus que la pression vérifie la relation  $p_{II}^A = p_I^B + 1 - p_{II}^B + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Delta \varepsilon$ , où  $\Delta$  est une constante non nulle d'ordre  $\mathcal{O}(1)$  donnant naissance au "ghost-effect".

**Théorème 2.1.1.** ([33]) *Pour  $n_{II}$  suffisamment proche de  $n_I$ , pour  $T_{II}$  suffisamment proches de  $T_I$  et  $\varepsilon$  suffisamment petit, il existe une solution  $(f^A, f^B)$  du système (2.1.1, 2.1.2, 2.1.3, 2.1.4) de la forme*

$$(f^A, f^B) = (f_{H0}^A + \varepsilon f_1^A + \varepsilon^2 f_2^A + \varepsilon^3 f_R^A, f_{H0}^B + \varepsilon f_1^B + \varepsilon^2 f_2^B + \varepsilon^3 f_R^B) \quad (2.1.6)$$

vérifiant

$$\|f_R^A\|_\infty + \|f_R^B\|_\infty \leq \frac{c}{\varepsilon^{\frac{5}{2}}}. \quad (2.1.7)$$

([36]) *Pour  $p_{II}^B$  (resp.  $T_{II}$ ) suffisamment proche de  $p_I^B$  (resp.  $T_I$ ) et pour  $\Delta$  et  $\varepsilon$  suffisamment petits, le système (2.1.1, 2.1.5) admet une solution de la forme (2.1.6) vérifiant (2.1.7).*

## 2.2 Développement asymptotique

On recherche la solution du problème comme un développement asymptotique en  $\varepsilon$  de type Hilbert. Les termes de Hilbert doivent être modifiés en vue d'obtenir les conditions de bord (2.1.2, 2.1.3). C'est pour cela que chaque terme  $f_n^\alpha$  du développement s'écrit :  $f_n^\alpha = f_{Hn}^\alpha + f_{Kn}^{\alpha-} + f_{Kn}^{\alpha+}$ ,  $\alpha \in \{A; B\}$ .  $f_{Hn}^\alpha$  est alors une fonction régulière dépendant de  $x$  tandis que  $f_{Kn}^{\alpha-}$  (resp.  $f_{Kn}^{\alpha+}$ ) est une fonction régulière à décroissance rapide dépendant de la variable  $\frac{1+x}{\varepsilon}$  (resp.  $\frac{1-x}{\varepsilon}$ ). On établit ensuite dans chaque cas étudié un système fluide qui est fermé lorsque les conditions de bord sont suffisamment proches l'une de l'autre.

On détermine ensuite les termes de Hilbert en les injectant dans (2.1.1) et en identifiant les différentes puissances de  $\varepsilon$ . L'identification des termes d'ordre  $-1$  entraîne que  $f_{H0}^A$  et  $f_{H0}^B$  sont des Maxwelliennes ayant même vitesse et même température.

Dans les deux modèles physiques étudiés les vitesses macroscopiques sont nulles. Dans chaque cas, un système fluide mêlant des quantités hydrodynamiques d'ordre 0 et d'ordre 1 est alors dérivé. Ces deux systèmes mettent en évidence le phénomène de "ghost effect" introduit dans ([152]). En effet, lorsque le nombre de Knudsen tend vers 0, le flot du mélange tend aussi vers 0. Cependant l'équation vérifiée par le terme d'ordre 0 de la température dépend du terme d'ordre 1 de la vitesse. Cela signifie donc que la vitesse du mélange tend vers 0 mais garde une influence sur la limite.

On montre que dans les deux situations considérées ([33, 36]),  $f_{H0}^A$  et  $f_{H0}^B$  vérifient les conditions de bord (2.1.2, 2.1.3). Ensuite, dans [33], les termes de Hilbert  $f_{H1}^A$  et  $f_{H1}^B$  ne pouvant pas satisfaire les conditions de bord

$$f_{H1}^A(-1, v) = f_{H1}^A(1, v) = 0 \quad \text{et} \quad f_{H1}^B(-1, v) = f_{H1}^B(1, v) = 0$$

et dans ([36]),  $f_{H1}^A$  et  $f_{H1}^B$  ne peuvent pas satisfaire

$$f_{H1}^A(-1, v) = 0, \quad f_{H1}^A(1, v) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\Delta}{p_{H0}^A(1)} f_{H0}^A(1, v), \quad f_{H1}^B(-1, v) = f_{H1}^B(1, v) = 0,$$

car sinon les deux systèmes fluides dérivés à partir des modèles cinétiques seraient surdéterminés. Des termes de Knudsen  $f_{K1}^-, f_{K1}^{A-}, f_{K1}^{B-}, f_{K1}^+, f_{K1}^{A+}$  et  $f_{K1}^{B+}$  doivent alors être rajoutés à chaque bord. Ainsi, en posant,  $x' = \frac{1+x}{\varepsilon}$ ,  $x'' = \frac{1-x}{\varepsilon}$ ,  $f_1, f_1^A$  et  $f_1^B$  s'écrivent

$$\begin{aligned} f_1(x, v) &= f_{H1}(x, v) + f_{K1}^-(x', v) + f_{K1}^+(x'', v), \\ f_1^A(x, v) &= f_{H1}^A(x, v) + f_{K1}^{A-}(x', v) + f_{K1}^{A+}(x'', v), \\ f_1^B(x, v) &= f_{H1}^B(x, v) + f_{K1}^{B-}(x', v) + f_{K1}^{B+}(x'', v). \end{aligned}$$

Les termes de Knudsen sont alors construits comme solutions de problèmes de Milne pour deux composantes de gaz ([3]).

## 2.3 Etude du reste.

On définit le reste  $\varepsilon^3 f_R^A$  (resp.  $\varepsilon^3 f_R^B$ ) pour  $f^A$  (resp.  $f^B$ ) comme la différence de  $f^A$  (resp.  $f^B$ ) et de son développement asymptotique

$$\begin{aligned} f^A(x, v) &= M^A + \varepsilon(f_{H1}^A(x, v) + f_{K1}^{A-}(\frac{1+x}{\varepsilon}, v) + f_{K1}^{A+}(\frac{1-x}{\varepsilon}, v)) \\ &+ \varepsilon^2(f_{H2}^A(x, v) + f_{K2}^{A-}(\frac{1+x}{\varepsilon}, v) + f_{K2}^{A+}(\frac{1-x}{\varepsilon}, v)) + \varepsilon^3 f_R^A(x, v), \end{aligned} \quad (2.3.8)$$

$$\begin{aligned} f^B(x, v) &= M^B + \varepsilon\left(f_{H1}^B(x, v) + f_{K1}^{B-}(\frac{1+x}{\varepsilon}, v) + f_{K1}^{B+}(\frac{1-x}{\varepsilon}, v)\right) \\ &+ \varepsilon^2(f_{H2}^B(x, v) + f_{K2}^{B-}(\frac{1+x}{\varepsilon}, v) + f_{K2}^{B+}(\frac{1-x}{\varepsilon}, v)) + \varepsilon^3 f_R^B(x, v). \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

Afin de contrôler le reste on généralise l'approche développée dans ([93, 94]) à un système. Notons au passage que seules les conditions de bord de type Maxwell diffuses sont traitées dans [93, 94]. En effet les

auteurs utilisent de manière déterminante que dans le cadre stationnaire cela entraîne que le flux de la solution est nul dans tout le domaine. Le reste du développement  $(f_R^A, f_R^B)$  doit alors satisfaire

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial x} f_R^A &= \frac{1}{\varepsilon} \left( Q(M^A, f_R) + Q(f_R^A, M) \right) + Q(f_1^A + \varepsilon f_2^A, f_R) + Q(f_R^A, f_1 + \varepsilon f_2) \\ &+ \varepsilon^2 (Q(f_R^A, f_R) + \varepsilon A), \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

$$\begin{aligned} \xi \frac{\partial}{\partial x} f_R^B &= \frac{1}{\varepsilon} \left( Q(M^B, f_R) + Q(f_R^B, M) \right) + Q(f_1^B + \varepsilon f_2^B, f_R) + Q(f_R^B, f_1 + \varepsilon f_2) \\ &+ \varepsilon^2 (Q(f_R^B, f_R) + \varepsilon B), \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

avec  $f_R = f_R^A + f_R^B$ .  $A$  et  $B$  rassemblent les termes restants en  $\varepsilon^2$ . On montre alors que

$$|A|_{r, \beta_0} + |B|_{r, \beta_0} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\varepsilon}\right), \quad (2.3.12)$$

où

$$|f|_{r, \beta_0} = \sup_{x \in [-1, 1], v \in \mathbb{R}^3} (1 + |v|)^r |f(x, v)| \exp(\beta_0 v^2), \quad (2.3.13)$$

pour un  $\beta_0$  convenable. 2.3.12 s'établit à partir d'une estimation des solutions des problèmes de Milne ([3], [13]).

### 2.3.1 Problème linéarisé.

Les solutions  $(R^A, R^B)$  du système (2.3.10, 2.3.11) sont construites comme les limites respectives d'une suite d'itérations de problèmes linéarisés de la forme suivante

$$\xi \frac{\partial}{\partial x} R^A = \frac{1}{\varepsilon} \left( Q(M^A, R) + Q(R^A, M) \right) + \mathcal{N}_A(R) + \mathcal{N}(R^A) + \varepsilon^2 D^A, \quad (2.3.14)$$

$$\xi \frac{\partial}{\partial x} R^B = \frac{1}{\varepsilon} \left( Q(M^B, R) + Q(R^B, M) \right) + \mathcal{N}_B(R) + \mathcal{N}(R^B) + \varepsilon^2 D^B. \quad (2.3.15)$$

où  $\mathcal{N}$ ,  $\mathcal{N}_A$  et  $\mathcal{N}_B$  sont des opérateurs continus dépendant des termes de Knudsen. Les termes  $R$ ,  $R^A$  et  $R^B$  sont alors estimés en fonction de  $D$ ,  $D^A$  et  $D^B$  et des conditions de bord.

Dans le théorème (4.2.1), les hypothèses pour  $n_{II}$  (resp.  $T_{II}$ ) suffisamment proche de  $n_I$  (resp.  $T_I$ ) se traduisent dans ([33]) par  $n_I = 1$ ,  $n_{II} = 1 + \tau$ ,  $T_I = 1$  et  $|T_I - T_{II}| \leq c\tau$ , avec  $c > 0$  et  $\tau$  suffisamment petit mais indépendant de  $\varepsilon$ . Cette hypothèse est alors indispensable pour obtenir l'estimation

$$\|(1 + |v|)^{-1} \mathcal{N}(f)\| \leq \tau \|f\|, \quad (2.3.16)$$

$\mathcal{N}_A$ ,  $\mathcal{N}_B$  satisfaisant des inégalités analogues. Dans [36], les hypothèses du théorème 4.2.1 s'expriment et s'utilisent de la même manière pour obtenir l'inégalité (2.3.16). Celle-ci s'obtient d'après les estimations sur les solutions des problèmes de Milne données dans ([13]). Notons que l'inégalité 2.3.16 est cruciale lors du contrôle du reste.

### 2.3.2 Décomposition du reste.

On explique maintenant le point clef de la méthode, introduite par Caffish ([52]) et basée sur une décomposition du reste en une partie en petite vitesse et une autre en grande vitesse. La manière naturelle de traiter ces équations de Boltzmann linéarisées est de transformer l'opérateur  $f \mapsto Q(M, f)$  en l'opérateur  $f \mapsto -\frac{2}{M} Q(M, M^{-\frac{1}{2}} f)$  afin d'avoir une inégalité spectrale à disposition. Cependant lorsque la Maxwellienne n'est pas homogène, cette procédure introduit le terme  $\xi M^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x} (M^{\frac{1}{2}}) f$  qui se comporte comme  $|v|^3 f$  et n'a pas de signe. Alors comme dans [52, 93, 94],  $R$ ,  $R^A$  et  $R^B$  sont décomposées selon une partie en petite vitesse et en grande vitesse selon

$$R = \sqrt{M} g + \sqrt{M_*} h, \quad R^A = \sqrt{M^A} g^A + \sqrt{M_*} h^A, \quad R^B = \sqrt{M^B} g^B + \sqrt{M_*} h^B, \quad (2.3.17)$$

où  $M_*$  est la Maxwellienne globale  $M_*(v) = \frac{1}{(\pi T_*)^{\frac{3}{2}}} \exp(-\frac{v^2}{T_*})$ , avec  $T_* > \sup_{x \in [-1,1]} T_{H0}(x)$ .

$$g = \frac{\sqrt{n^A}}{\sqrt{n}} g^A + \frac{\sqrt{n^B}}{\sqrt{n}} g^B, \quad h = h^A + h^B.$$

Notons au passage que si la Maxwellienne  $M$  est globale comme dans ([10, 11]), cette décomposition est inutile.

**Remarque 1.** Dans ([6]), une méthode alternative a été introduite. Le point crucial de cet article est la démonstration et l'usage d'une nouvelle inégalité spectrale. Cette nouvelle inégalité est montrée sur un opérateur comprenant l'opérateur de Boltzmann linéarisé plus les termes de la forme  $\mathcal{N}_A(R)$ ,  $\mathcal{N}_A(R)$  et  $\mathcal{N}$ .

Pour le contrôle, on considère la norme suivante

$$\|f\| = \left( \int_{[-1,1] \times \mathbb{R}^3} (1 + |v|) f^2(x, v) dx dv \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.3.18)$$

Cette norme est étendue aux termes de bord  $h_-^A$ ,  $h_+^A$ ,  $h_-^B$  et  $h_+^B$  ne dépendant que de la variable  $v$ .  $\psi_0 = \sqrt{M}$ ,  $\psi_1 = \xi \sqrt{M}$  et  $\psi_4 = (v^2 - \frac{3}{2}T) \sqrt{M}$  désigneront les éléments de la base de l'opérateur de Boltzmann linéarisé.  $g$  est ensuite décomposée entre ses parties hydrodynamique  $\hat{g} + g_1$  et non hydrodynamique  $\bar{g}$ .  $\hat{g}$  s'écrit selon  $\hat{g} = p_0(x) \psi_0 + p_4(x) \psi_4$ .

De même, pour  $\alpha \in \{A, B\}$ , les éléments  $\psi_0^\alpha = \sqrt{M^\alpha}$ ,  $\psi_1^\alpha = \xi \sqrt{M^\alpha}$ , et  $\psi_4^\alpha = (v^2 - \frac{3}{2}T) \sqrt{M^\alpha}$  désigneront une base de l'opérateur de Boltzmann linéarisé ([3]) pour deux composantes.  $(g^A, g^B)$  est alors décomposée en ses parties hydrodynamique  $(\hat{g}^A + g_1^A, \hat{g}^B + g_1^B)$  et non hydrodynamique  $(\bar{g}^A, \bar{g}^B)$ .  $\hat{g}^A$  et  $\hat{g}^B$  s'écrivent plus précisément

$$\hat{g}^A = p_0^A \psi_0^A + p_4^A \psi_4^A, \quad \hat{g}^B = p_0^B \psi_0^B + p_4^B \psi_4^B, \quad g_1^A = p_1^A \psi_1^A, \quad g_1^B = p_1^B \psi_1^B.$$

### 2.3.3 Contrôle du reste.

Dans cette partie, on contrôle le reste du développement asymptotique du problème linéarisé associé en norme  $L^2$  et en norme  $L^\infty$ . Dans [93, 94], les auteurs utilisent la décomposition du reste expliquée dans la sous-section précédente pour un gaz monoespèce vérifiant des conditions de bord de type Maxwell diffuses. Ce dernier point est crucial car il entraîne que la fonction de distribution possède un flux nul. Dans les deux travaux présentées, cette condition n'est pas vérifiée. Dans ([33]) ce problème est résolu en utilisant la structure du noyau de collision de l'opérateur de Boltzmann linéarisé. Dans ([36]), la décomposition doit être modifiée du fait des conditions de bord. Finalement, le reste du problème non linéaire est obtenu comme la limite d'une suite de restes de problèmes linéarisés et la majoration en découle.

### 2.3.4 Estimations $L^2$ sur le reste du problème linéarisé.

Le point clé du contrôle est la majoration de  $g^A$ ,  $g^B$ ,  $h^A$  et  $h^B$  en norme  $\|\cdot\|$ . Dans chacun des cas cette majoration s'effectuera en fonction de

$$\mathcal{D} = \left\| \frac{d^A}{(1 + |v|)} \right\| + \left\| \frac{d^B}{(1 + |v|)} \right\|, \quad \mathcal{K} = \|h_-^A\| + \|h_+^A\| + \|h_-^B\| + \|h_+^B\|.$$

Le contrôle du reste pour l'étude du mélange vapeur-gaz non condensable ([33]) s'écrit

**Proposition 1.** *Il existe  $\varepsilon_0 > 0$ ,  $\tau_0$  et  $c > 0$  tels que pour tout  $\varepsilon < \varepsilon_0$  et  $\tau < \tau_0$ ,  $g^A$ ,  $g^B$ ,  $h^A$ ,  $h^B$  vérifient les estimations*

$$\begin{aligned} \|h^A\| + \|h^B\| &\leq c\varepsilon^3 \mathcal{D} + c\sqrt{\varepsilon} \mathcal{K}, \quad \|\hat{g}^A\| + \|\hat{g}^B\| \leq c\varepsilon \mathcal{D} + \frac{c}{\varepsilon^{\frac{3}{2}}} \mathcal{K}, \\ \|g_1^A\| + \|g_1^B\| + \|\bar{g}^A\| + \|\bar{g}^B\| &\leq c\varepsilon^2 \mathcal{D} + \frac{c}{\sqrt{\varepsilon}} \mathcal{K}. \end{aligned} \quad (2.3.19)$$

**Remarque 2.** Dans la situation d'une seule composante de gaz ([93, 94]) avec des conditions de bord de type Maxwell diffuses,  $g_1$  est du même ordre en  $\varepsilon$  que  $h$ . En effet pour un gaz à une composante, le flux  $\int \xi \bar{g} dv$  est nul tandis que pour un gaz à deux composantes,  $\int_{\mathbb{R}^3} \xi \bar{g}^A dv$  et  $\int_{\mathbb{R}^3} \xi \bar{g}^B dv$  sont non nuls.

Le contrôle du reste pour l'étude du mélange vapeur-vapeur ([36]) s'écrit

**Proposition 2.** Il existe  $\varepsilon_0 > 0$ ,  $\tau_0$  et  $c > 0$  tel pour tous  $\varepsilon < \varepsilon_0$  et  $\tau < \tau_0$ ,  $g^A$ ,  $g^B$ ,  $h^A$ ,  $h^B$  vérifient les estimations

$$\begin{aligned} \|h^A\| + \|h^B\| &\leq c\varepsilon^3 \mathcal{D} + c\sqrt{\varepsilon} \mathcal{K}, & \|\bar{g}^A\| + \|\bar{g}^B\| &\leq c\varepsilon^2 \mathcal{D} + \frac{c}{\varepsilon^{\frac{1}{2}}} \mathcal{K}, \\ \|P^A(g^A)\| + \|P^B(g^B)\| &\leq c\varepsilon \mathcal{D} + \frac{c}{\varepsilon^{\frac{3}{2}}} \mathcal{K}. \end{aligned} \quad (2.3.20)$$

**Remarque 3.** Dans ([33]), l'estimation obtenue pour  $\|h^A\| + \|h^B\|$  et  $\|\bar{g}^A\| + \|\bar{g}^B\|$  est du même ordre que celle de (2.3.20). Cependant les parties hydrodynamiques de  $g$ ,  $\|g_1^A\| + \|g_1^B\|$  sont du même ordre que  $\|\bar{g}^A\| + \|\bar{g}^B\|$  tandis que  $\|g_0^A\| + \|g_0^B\| + \|g_4^A\| + \|g_4^B\|$  est du même ordre que  $\|P^A(g^A)\| + \|P^B(g^B)\|$ .

### 2.3.5 Estimation sur le reste du problème linéarisé

On obtient ensuite une borne pour  $g^A$ ,  $g^B$ ,  $h^A$  et  $h^B$  avec la norme  $\infty$  en généralisant l'approche donnée dans ([93], [94]) à un mélange.

On obtient alors une estimation de la solution du problème linéarisé en norme  $|\cdot|_{r,\beta_0}$  dans la proposition suivante.

**Proposition 3.** Pour tout  $r \geq 3$ , il existe  $c$ ,  $\varepsilon_0$ ,  $\eta_0$  et  $\beta_0$  tels que pour tout  $\varepsilon < \varepsilon_0$  et  $\eta < \eta_0$ , les restes  $(R^A, R^B)$  solutions de (2.3.14, 2.3.15) satisfont aux estimations

$$\begin{aligned} |R^A|_{r,\beta_0} + |R^B|_{r,\beta_0} &\leq c\varepsilon^{\frac{1}{2}} (|D^A|_{r-1,\beta_0} + |D^B|_{r-1,\beta_0}) \\ &\quad + \frac{c}{\varepsilon^2} (|\zeta^{A-}|_{r,\beta_0} + |\zeta^{B-}|_{r,\beta_0} + |\zeta^{A+}|_{r,\beta_0} + |\zeta^{B+}|_{r,\beta_0}), \end{aligned}$$

où les termes  $|\zeta^{A-}|_{r,\beta_0}$ ,  $|\zeta^{B-}|_{r,\beta_0}$ ,  $|\zeta^{A+}|_{r,\beta_0}$  et  $|\zeta^{B+}|_{r,\beta_0}$  possèdent une décroissance exponentielle en  $\varepsilon$ .

Finalement, on en déduit le théorème 4.2.1

## Chapitre 3

# Equations de coagulation-fragmentation

Cette section est dédiée à un théorème d'existence pour un système d'équations de coagulation-fragmentation discrètes ([31]).

### 3.1 Position du problème

Physiquement, le processus de coagulation est un mécanisme qui fait que deux polymères peuvent coaguler pour former un polymère plus gros tandis que la fragmentation correspond au mécanisme qui permet à un polymère de se fragmenter en deux polymères plus petits. Dans ce travail les polymères seront déterminés par le nombre entier de particules qu'ils contiennent. Ainsi le polymère  $P_i$  sera un polymère de taille  $i$  et  $c_i(t, x)$  désignera sa concentration à l'instant  $t$  et au point d'espace  $x$ . Signalons plusieurs travaux où la variable de taille a été considérée comme une variable continue ([92], [127], [85]). Cela revient physiquement à regarder les particules de beaucoup plus près. Les particules ne sont alors plus considérées comme ponctuelles mais elles possèdent un rayon caractérisé par la variable de taille continue.

Dans le cas présent, le couplage de ces deux réactions aboutit à l'équilibre

$$P_i + P_k \rightleftharpoons P_{i+k}. \quad (3.1.1)$$

En particulier, la coagulation correspond alors à la réaction  $P_i + P_k \rightarrow P_{i+k}$  qui a pour vitesse :  $a_{ij}c_i c_j$  et la fragmentation désigne la réaction inverse qui a pour vitesse :  $b_{ij}c_{i+j}$ . La vitesse de la réaction 3.1.1 est donc  $v_{ij} = a_{ij}c_i c_j - b_{ij}c_{i+j}$ .

Par ailleurs, dans le modèle considéré, les polymères baignent dans un fluide en mouvement. Ainsi, la loi de Fick entraîne

$$\partial_t c_i + \text{div}(j_i) = Q_i(c) \quad (3.1.2)$$

où  $Q_i(c)$  l'opérateur de collision provenant de la vitesse de réaction est défini par

$$Q_i(c) = \sum_{k=1}^{i-1} a_{k,i-k} c_k c_{i-k} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} b_{k,i} c_{i+k} - 2 \sum_{k=1}^{\infty} a_{k,i} c_k c_i - \sum_{k=1}^{i-1} b_{k,i-k} c_i. \quad (3.1.3)$$

$\partial_t c_i$  désigne une vitesse de réaction,  $u_i$  est la vitesse des particules de taille  $i$  et  $j_i$  est le flux dû au déplacement des particules de taille  $i$ .  $j_i$  se décompose en une partie convective et une partie diffusive selon :  $j_i = u_i c_i - d_i \nabla c_i$ . Le terme  $u_i c_i$  est dû au déplacement du fluide. Dans notre étude,  $u_i$  sera égale à la vitesse du fluide. Le terme  $d_i \nabla c_i$  traduit la diffusion des polymères dans le fluide. Selon la vitesse ou la géométrie de l'écoulement les deux termes n'auront pas la même importance. Par exemple, dans le cadre des basses vitesses ou des fluides très visqueux le terme de diffusion est prépondérant. Dans ce cas, on aboutit à l'équation de diffusion

$$\partial_t c_i + d_i \Delta c_i = Q_i(c)$$

étudiée dans ([59], [60], [53], [126]).

Dans ce travail, nous avons généralisé ([59]) lorsque le terme convectif est pris en compte puis lorsque les termes de convections et de diffusion sont présents simultanément.

On suppose que les coefficients  $a_{i,k}$  et  $b_{i,k}$  satisfont les conditions

$$a_{i,k} = a_{k,i} > 0, b_{i,k} = b_{k,i} > 0, a_{i,k} = o(k), b_{i,k} = o(k), \sup_k \frac{a_{i,k}}{k} < \infty, \sup_k \frac{b_{i,k}}{k} < \infty. \quad (3.1.4)$$

$u(t, x)$  est la vitesse du fluide dans lequel se déplacent les polymères. Tous les polymères sont supposés avoir la vitesse du fluide supposé incompressible.

## 3.2 Description des résultats

### 3.2.1 Cas du transport pur.

Dans cette section seul le terme convectif du flux est pris en compte. Ainsi les concentrations  $c = (c_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$  vérifient le système

$$\partial_t c_i(t, x) + \operatorname{div}(u c_i)(t, x) = Q_i(c)(t, x), \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^D, \quad (3.2.5)$$

$$c_i(0, x) = c_i^0(x), \quad x \in \mathbb{R}^D. \quad (3.2.6)$$

On considèrera des solutions faibles du système (3.2.5, 3.2.6) au sens suivant

**Définition 3.2.3.**  $(c_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$  est une solution faible du problème (3.2.5-3.2.6) si pour tout  $i \in \mathbb{N}^*$ ,  $c_i \in C^0(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^D)$  et

$$\begin{aligned} & - \int_{\mathbb{R}^D} c_i^0(x) \varphi(0, x) dx - \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}^D} u c_i(t, x) \nabla_x \varphi ds dx \\ & - \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}^D} c_i(t, x) \partial_t \varphi ds dx = \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}^D} Q_i(c)(t, x) \varphi(t, x) dx ds, \end{aligned}$$

pour tout  $\varphi \in C^1(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^D)$  à support compact dans  $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^D$ .

**Théorème 3.2.1.** Supposons que les coefficients  $a_{i,k}$  et  $b_{i,k}$  satisfont aux hypothèses (3.1.4), que les conditions initiales satisfont pour tout  $i \in \mathbb{N}^*$

$$c_i^0 \geq 0, c_i^0 \in C^1(\mathbb{R}^D), (i, x) \mapsto \partial_x c_i^0(x) \in L^\infty(\mathbb{R}^D \times \mathbb{N}), \rho^0 = \sum_{i=1}^{+\infty} i c_i^0 \in L^\infty(\mathbb{R}^D),$$

et que la vitesse  $u \in C^1(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^D)$  est bornée, vérifie la condition d'incompressibilité  $\operatorname{div}(u) = 0$  et telle que  $\partial_x u$  est bornée. Alors, le système (3.2.5-3.2.6) possède une solution faible  $(c_i)_{i \in \mathbb{N}}$  au sens de la définition 3.2.3.

Pour la preuve, on résout dans un premier temps un problème tronqué en taille par un argument de point fixe puis on passe à la limite.

### 3.2.2 Cas du transport et de la diffusion.

On considère maintenant que les deux phénomènes sont pris en compte. On suppose de plus comme dans [59, 60] que les coefficients de diffusion sont égaux entre eux. Ainsi  $c = (c_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$  vérifie le problème

$$\partial_t c_i(t, x) + \operatorname{div}(u c_i)(t, x) - \Delta c_i(t, x) = Q_i(c)(t, x) \quad (3.2.7)$$

$$c_i(0; x) = c_i^0(x), \quad x \in \Omega, \quad (3.2.8)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial \eta}(t, \sigma) = 0 \quad t > 0, \sigma \in \partial \Omega, \quad (3.2.9)$$

où  $\Omega$  est un ouvert borné de classe  $C^1$  dont le bord  $\partial \Omega$ . Les solutions du problème (3.2.7-3.2.8-3.2.9) seront considérées au sens suivant.

**Définition 3.2.4.**  $(c_i)_{i \in \mathbb{N}}$  est une solution faible du problème (3.2.7, 3.2.8, 3.2.9) si pour tout  $i \in \mathbb{N}^*$  et tout  $T > 0$ ,  $c_i \in L^2([0, T] \times \Omega)$  et

$$\begin{aligned} - \int_{\mathbb{R}^D} c_i^0(x) \varphi(0, x) dx - \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}^D} c_i(t, x) \partial_t \varphi(t, x) dx - \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}^D} c_i(s, x) u \cdot \nabla_x \varphi(s, x) dx ds \\ - \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}^D} \nabla_x c_i(s, x) \cdot \nabla_x \varphi(s, x) dx ds = \int_{\mathbb{R}_+} \int_{\mathbb{R}^D} Q_i(c) \varphi(s, x) dx ds \end{aligned}$$

pour tout  $\varphi \in C^1(\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^D)$  à support compact dans  $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^D$ .

**Théorème 3.2.2.** Soit  $\Omega$  un ouvert borné de classe  $C^1$ . Supposons que les coefficients  $(a)_{(i,j) \in \mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*}$  et  $(b)_{(i,j) \in \mathbb{N}^* \times \mathbb{N}^*}$  satisfont les hypothèses (3.1.4), que les conditions initiales vérifient

$$c_i^0 \geq 0, \quad i \in \mathbb{N}^*, \quad c_i^0 \in L^2(\mathbb{R}_+ \times \Omega), \quad \rho^0 = \sum_{i=1}^{+\infty} i c_i^0 \in L^\infty(\Omega).$$

et que la vitesse du fluide  $u \in H^1(\mathbb{R}_+; H_0^1(\Omega) \cap L^\infty(\Omega))$  satisfait à la condition d'incompressibilité  $\operatorname{div}(u) = 0$ . Alors le système (3.2.7-3.2.8-3.2.9) possède une solution faible sur  $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^D$  au sens de la définition 3.2.4.

Comme précédemment, on considère dans un premier temps un problème tronqué en taille puis on passe à la limite.



Deuxième partie

Modèles pour les régimes  
transitionnels.



# Chapitre 4

## Dérivation de modèles BGK.

Ce chapitre reprend les travaux ([44], [45], [43], [46]) dont le but est de construire des modèles BGK permettant d'obtenir de bons coefficients de transports.

### 4.1 Introduction

En premier lieu, la complexité de l'équation de Boltzmann non linéaire nécessite l'introduction de modèles plus simples possédant les principales propriétés physiques (lois de conservation, théorème H, états d'équilibres  $\dots$ ). De plus, seules certaines propriétés de l'équation de Boltzmann sont indispensables pour espérer pouvoir obtenir la limite hydrodynamique. Il n'est donc pas nécessaire de conserver le noyau de collision avec toutes les propriétés qu'il contient. A ce propos, le modèle BGK consiste à remplacer l'opérateur de collision par un opérateur de relaxation vérifiant les propriétés fondamentales précitées. Cependant, ce modèle donne de mauvais coefficients de transport à la limite fluide. En particulier dans le cas monoatomique le nombre de Prandtl obtenu à la limite hydrodynamique vaut 1, alors que sa valeur physique est proche de  $\frac{2}{3}$ . Un modèle de relaxation capable de donner un bon nombre de Prandtl, l'Ellipsoidal Statistical Model a alors été introduit ([117]). Cependant son caractère entropique n'a été démontré que bien plus tard dans ([2]). C'est la raison qui nous a conduit à introduire une méthode de dérivation de modèles de type BGK capable d'ajuster certains coefficients hydrodynamiques. Cette motivation apparaît dans l'article fondateur de D.Levermore ([131]) dans lequel l'opérateur de collision de Boltzmann est remplacé par une somme d'opérateurs de relaxation. Malheureusement, cette méthode conduit à des nombres de Prandtl supérieurs à 1 qui n'ont donc aucune chance d'être physiques.

Nous allons alors procéder de manière différente en considérant un seul opérateur de relaxation avec un coefficient de relaxation qui lui sera associé. La clef de voûte de la méthode est alors d'associer ces coefficients de relaxation à des moments non conservés. Plus précisément, on se donne un espace polynômial  $\mathbf{P}$  de degré  $p$  en la variable  $v$  de base  $\mathbf{m}(v) = (m_1(v), \dots, m_N(v))^T$ ,  $\lambda$  et  $(\lambda_i)_{i=1, \dots, N}$  des constantes positives et  $f$  une fonction positive telle que  $f(v)(1 + |v|^p) \in L^1$ .

On cherche alors un modèle de relaxation de la forme

$$R(f) = \lambda(G - f) \tag{4.1.1}$$

où  $G$  est solution d'un problème de minimisation d'entropie. Plus précisément,  $f$  étant donnée, l'ensemble des contraintes  $\mathcal{C}_f$  représente les fonctions  $g \geq 0$  telles que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \lambda(g - f)m_i(v) dv = -\lambda_i \int_{\mathbb{R}^3} f m_i(v) dv, \quad \forall i = 1, \dots, N.$$

$\lambda$  et  $(\lambda_i)_{i=1, \dots, N}$  sont des paramètres libres, appelés coefficients de relaxation, destinés à ajuster certains coefficients de transport. Ainsi, on cherche  $G$  comme le résultat d'un problème de minimisation d'entropie sous contraintes ([148], [119])

$$G = \min_{g \in \mathcal{C}_f} \mathcal{H}(g), \tag{4.1.2}$$

où  $\mathcal{H}(f)$  désigne l'entropie de Boltzmann

$$\mathcal{H}(f) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\ln(f) - 1) dv.$$

Ce concept est ensuite appliqué aux gaz complexes (gaz polyatomiques, mélanges inertes et réactifs).

Concernant les mélanges de gaz, le but de [43] est de construire un modèle BGK qui soit capable de fournir la bonne loi de Fick. Afin de déterminer les coefficients de diffusion on introduit un espace polynomial  $\mathbb{C}$  qui sera défini ultérieurement. Pour assurer la loi de Fick, on définira les contraintes sur une base  $(\mathbf{w}_r)_{r=1,\dots,p-1}$  de  $\mathbb{C}$

$$\nu \sum_{j=1}^{j=p} \int_{\mathbb{R}^3} (G_j - f_j) \mathbf{w}_{r,j} = -\lambda_r \sum_{j=1}^{j=p} \int_{\mathbb{R}^3} f_j \mathbf{w}_{r,j}, \quad (4.1.3)$$

pour un ensemble de coefficients de relaxation  $(\lambda_r)_r$  où  $(G_j)_{j \in \{1,p\}}$  représentera l'attracteur du modèle de relaxation.  $\nu$  est un paramètre libre qui peut être ajusté en vue d'obtenir le coefficient de viscosité. Enfin, dans une dernière partie, ce modèle est généralisé à des modèles réactifs via un splitting avec un opérateur chimique. On montrera alors que ce modèle possède toutes les propriétés fondamentales. Dans ce qui suit nous revenons plus en détails sur les travaux ([44], [45], [43], [46]).

## 4.2 Cas monoatomique. ([44])

Le but de ce travail est de construire un modèle conduisant à une bonne limite hydrodynamique jusqu'à Navier-Stokes, à savoir un bon nombre de Prandtl. On se place alors dans le cas où  $\mathbf{P} = \text{Vect}[1, v, v \otimes v]$ .  $f \geq 0$  étant donnée, l'ensemble des contraintes  $\mathcal{C}_f$  est l'ensemble des fonctions  $g \geq 0$  telles que

$$\int_{\mathbb{R}^3} (1, v, |v|^2) g dv = \int_{\mathbb{R}^3} (1, v, |v|^2) f dv, \quad (4.2.4)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \lambda(g - f) A(V) dv = -\lambda_1 \int_{\mathbb{R}^3} f A(V) dv, \quad (4.2.5)$$

où  $A(v)$  sont les polynômes de Sonine  $A(v) = v \otimes v - \frac{1}{3}|v|^2 Id$ .  $Id$  désigne la matrice identité dans  $\mathbb{R}^3$  et  $V = \frac{v-u}{\sqrt{T}}$ .  $u$  et  $T$  sont la vitesse et la température macroscopiques.  $\lambda$  représente le coefficient de relaxation associé à  $G$  tandis que  $\lambda_1$  est le coefficient de relaxation associé au moment selon  $A(V)$ . On introduit ensuite le tenseur de pression  $\Theta$ ,

$$\Theta = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} c \otimes c f dv, \quad c = v - u.$$

Afin de comparer le présent résultat à ([2]), on pose  $\nu = 1 - \frac{\lambda_1}{\lambda}$  et la contrainte (4.2.5) s'écrit alors

$$\frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} c \otimes c g dv = \nu \Theta + (1 - \nu) T Id = \mathcal{T}. \quad (4.2.6)$$

**Théorème 4.2.1.** *Pour toute fonction positive  $f \in L_2^1$  et  $\nu \in [-\frac{1}{2}, 1[$ , le tenseur  $\mathcal{T}$  est symétrique défini positif et le problème (4.1.2) pour  $\mathcal{C}_f$  défini par (4.2.4, 4.2.5) possède une unique solution  $G$  défini par*

$$G(v) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\mathcal{T})}} \exp\left(-\frac{1}{2}\langle c, \mathcal{T}^{-1}c \rangle\right). \quad (4.2.7)$$

Réciproquement, si (4.1.2) possède une unique solution pour toute fonction positive  $f \in L_2^1$ , alors  $\nu \in [-\frac{1}{2}, 1[$ .

On détermine ensuite les coefficients de relaxation  $\lambda$  et  $\lambda_1$  afin d'ajuster la viscosité et le flux de chaleur. On effectue pour cela un développement de Chapman-Enskog auquel on impose d'être exact jusqu'à l'ordre 1. Cela définit alors les coefficients de relaxation  $\lambda$  et  $\lambda_1$  par les relations

$$\lambda_1 = \frac{\rho T}{\mu}, \quad \lambda = \frac{5\rho T}{2\kappa}. \quad (4.2.8)$$

Le nombre de Prandtl s'écrit alors

$$Pr = \frac{5}{2} \frac{\mu}{\kappa} = \frac{\lambda}{\lambda_1} = \frac{1}{1-\nu}.$$

Ainsi  $\nu = -\frac{1}{2}$  correspond au cas physique  $Pr = \frac{2}{3}$  vérifié dans le cas des gaz monoatomiques, tandis que  $\nu = 0$  correspond au modèle BGK classique ([20]) dont le nombre de Prandtl  $Pr = 1$  n'est pas physique. On démontre ensuite que le modèle vérifie un théorème  $H$  pour tout  $-\frac{1}{2} \leq \nu \leq 1$ . Bien qu'une telle démonstration ait déjà été proposée dans [2] nous proposons une nouvelle preuve.

**Théorème 4.2.2.** *Pour tous  $-\frac{1}{2} \leq \nu \leq 1$  le terme de dissipation d'entropie vérifie*

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

où  $G$  est défini par (4.4.34). De plus  $D(f) < 0$  pour  $-\frac{1}{2} \leq \nu < 1$  avec égalité ssi  $f = \mathcal{M}$ .

Dans une dernière partie, on étudie différents modèles BGK conduisant à un bon nombre de Prandtl à savoir le modèle de Bouchut-Perthame ([42]) et ceux introduits par Struchtrup ([154], [146]). Le principe de ces modèles est qu'ils possèdent des fréquences de collision qui dépendent de la variable de vitesse microscopique. Ainsi en minimisant une entropie pondérée, la Maxwellienne associée s'obtient comme solution d'un problème de minimisation. Cela fournit au passage une preuve plus simple que celle donnée dans [42] pour l'existence du modèle de Bouchut-Perthame puisque le principe variationnel montre en même temps l'existence et l'unicité de la fonction de relaxation.

### 4.3 Cas polyatomique ([45])

On se place dans cette section dans le cadre polyatomique. La fonction de distribution dépend alors d'une nouvelle variable  $I$  d'énergie interne qui peut être de différentes sortes (rotationnelle, de vibration, ...). La fonction de distribution s'écrit alors  $f = f(t, x, v, I)$  avec  $(t, x, v, I) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+$ . Dans ce cas, l'opérateur de collision de Boltzmann peut prendre différentes formes ([124, 142, 29, 78, 91, 104]). Comme nous le verrons dans le chapitre 4.5, la variable d'énergie interne est fondamentale pour décrire les modèles cinétiques pour les mélanges réactifs. C'est notamment cette énergie qui indique le sens dans lequel se déroule la réaction chimique.

#### 4.3.1 Notations

Pour les gaz polyatomiques, on définit les quantités hydrodynamiques de la manière suivante

$$\begin{aligned} \rho(t, x) &= \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} f \, dv dI, \quad u(t, x) = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} v f \, dv dI, \\ T_{eq} &= \frac{2}{(3 + \delta)\rho R} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} \left( \frac{1}{2} |v - u|^2 + I^{\frac{2}{\delta}} \right) f \, dv dI, \quad \Lambda_\delta^{-1} = \int_{\mathbb{R}_+} e^{-I^{\frac{2}{\delta}}} dI. \end{aligned}$$

$\delta$  est le nombre total de degrés de liberté pour l'énergie interne du gaz et  $R = \frac{k}{m}$ ,  $k$  étant la constante de Boltzmann et  $m$  la masse moléculaire du gaz. On définit l'énergie totale  $E$  par  $E = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} \left( \frac{1}{2} |v|^2 + I^{\frac{2}{\delta}} \right) f \, dv dI$ , et la fonctionnelle d'entropie  $\mathcal{H}$  s'écrit

$$\mathcal{H}(f) = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} f \ln f \, dv dI. \quad (4.3.9)$$

On définit ensuite l'énergie interne spécifique

$$e = \frac{1}{\rho} E - \frac{1}{2} |u|^2 = \frac{3 + \delta}{2} RT_{eq}$$

qui se décompose naturellement comme la somme d'une énergie translationnelle et d'une énergie interne selon  $e = e_{tr} + e_{int}$ , avec

$$e_{tr} = \frac{1}{2\rho} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} |c|^2 f \, dv dI, \quad e_{int} = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} I^{\frac{2}{\delta}} f \, dv dI.$$

Une température est associée à chacune de ces énergies  $T_{tr} = \frac{2}{3R} e_{tr}$ ,  $T_{int} = \frac{2}{\delta R} e_{int}$ . Finalement le tenseur de pression  $\Theta$  est défini par

$$\Theta = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} c \otimes c f dv dI.$$

Le modèle BGK classique s'écrit alors ([20], [2])  $R_{BGK}(f) = \rho(\mathcal{M} - f)$ , où  $\mathcal{M} = \mathcal{M}(t, x, v, I)$  est la fonction de distribution Maxwellienne définie par

$$\mathcal{M}(v, I) = \frac{\rho \Lambda_\delta}{(2\pi R T_{eq})^{3/2} (R T_{eq})^{\frac{\delta}{2}}} \exp\left(-\frac{|v-u|^2}{2R T_{eq}} - \frac{I^{\frac{2}{\delta}}}{R T_{eq}}\right). \quad (4.3.10)$$

### 4.3.2 Construction du modèle.

Le but de ce travail est à nouveau de construire un modèle de relaxation de la forme (4.1.1). Dans le cas présent, les coefficients de relaxation  $\lambda$ ,  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  devront ajuster les deux viscosités  $\mu$  et  $\mu\alpha$  et le flux de chaleur  $\kappa$ . Pour construire notre fonction de relaxation  $G$ , on considère l'espace polynômial  $\mathcal{P} = Vect[1, v, v \otimes v, I^{\frac{2}{\delta}}]$ .  $f \geq 0$  étant donnée, on définit l'ensemble des contraintes  $\mathcal{C}_f$  comme l'ensemble des fonctions  $g \geq 0$  t.q.

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} (1, v, \frac{1}{2}|v|^2 + I^{\frac{2}{\delta}}) g dv dI = \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} (1, v, \frac{1}{2}|v|^2 + I^{\frac{2}{\delta}}) f dv dI, \quad (4.3.11)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} (c \otimes c - \frac{1}{3}|c|^2 Id) \lambda(g - f) dv dI = -\lambda_1 \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} (c \otimes c - \frac{1}{3}|c|^2 Id) f dv dI, \quad (4.3.12)$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} (\frac{1}{3}|c|^2 - \frac{2}{3+\delta}(\frac{|c|^2}{2} + I^{\frac{2}{\delta}})) \lambda(g - f) dv dI \\ = -\lambda_2 \left( \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} \frac{1}{3}|c|^2 f dv dI - \rho R T_{eq} \right), \end{aligned} \quad (4.3.13)$$

où  $\lambda$ ,  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des coefficients de relaxation positifs. La contrainte (4.3.11) assure les propriétés de conservation pour l'opérateur de relaxation. La contrainte (4.3.12) impose que la fonction de distribution devient isotrope en vitesse lorsque  $t \rightarrow +\infty$  tandis que (4.3.13) impose qu'à la limite lorsque  $t \rightarrow +\infty$  l'énergie translationnelle est égale à l'énergie interne.

Afin de comparer le modèle obtenu à ([2]), on pose  $\frac{\lambda_1}{\lambda} = 1 - \nu(1 - \theta)$ . La contrainte 4.3.12 sur  $g$  s'écrit alors

$$\int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+} c \otimes c g dv dI = (1 - \theta) \left( (1 - \nu) \rho R T_{tr} Id + \nu \Theta \right) + \theta \rho R T_{eq} Id = \rho \mathcal{T}. \quad (4.3.14)$$

On définit l'espace suivant  $L_2^1 = \{f / (1 + |v|^2 + I^{\frac{2}{\delta}}) f \in L^1\}$ .

**Théorème 4.3.1.** *Pour toute fonction positive  $f$  non nulle  $\in L_2^1$ ,  $\nu \in [-\frac{1}{2}, 1[$  et  $\theta \in [0, 1]$ , le problème de minimisation (4.1.2) de l'entropie (4.3.9) pour le système des contraintes (4.3.11, 4.3.12, 4.3.13) possède une unique solution  $G$  définie par*

$$G(v, I) = \frac{\rho \Lambda_\delta}{\sqrt{\det(2\pi \mathcal{T})} (R T_{eq})^{\frac{\delta}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \langle c, \mathcal{T}^{-1} c \rangle - \frac{I^{\frac{2}{\delta}}}{R T_{rel}}\right), \quad (4.3.15)$$

où  $T_{rel} = \theta T_{eq} + (1 - \theta) T_{int}$ .

Réciproquement si  $\mathcal{C}_f \neq \emptyset$  pour toute fonction  $f \in L_2^1$  positive, non nulle alors  $\nu \in [-\frac{1}{2}, 1[$ ,  $\theta \in [0, 1]$ .

On impose alors au développement de Chapman-Enskog d'être exact jusqu'à l'ordre 1. Cela détermine alors les coefficients de relaxation de la manière suivante

$$\lambda_2 = \frac{P}{\mu} \frac{2}{3 + \delta} \frac{1}{2 - 3\alpha}, \quad \lambda_1 = \frac{P}{\mu}, \quad \lambda = \frac{5 + \delta}{2} \frac{PR}{\kappa}. \quad (4.3.16)$$

Ainsi, en utilisant (4.3.16)  $\lambda$  peut être défini par

$$\lambda = \frac{\lambda_1}{1 - \nu + \theta\nu} = \frac{P}{\mu(1 - \nu + \theta\nu)}$$

et  $R(f)$  s'écrit

$$R(f) = \frac{P}{\mu(1 - \nu + \theta\nu)}(G - f).$$

On obtient alors l'Ellipsoidal Statistical Model obtenu dans [2] pour les gaz polyatomiques. Le nombre de Prandtl de ce modèle s'écrit alors

$$Pr = \frac{5 + \delta}{2} \frac{R\mu}{\kappa} = \frac{\lambda}{\lambda_1} = \frac{1}{1 - \nu + \theta\nu}.$$

Par exemple, dans la situation de gaz diatomiques, les valeurs expérimentales sont  $Pr = \frac{5}{7}$  et  $\theta = \frac{1}{5}$ . Ainsi  $\nu = -\frac{1}{2}$ .

### 4.3.3 Retour vers l'équilibre.

On considère l'équation homogène

$$\partial_t f = \lambda(G - f) \tag{4.3.17}$$

dont on étudie le problème du retour vers l'équilibre.

**Théorème 4.3.2.** *Pour  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  définis par (4.3.16),  $\lambda_3 = \min(\lambda_1, \lambda_2)$ . Ainsi pour toute solution  $f$  de (4.3.17), on a  $\|f - \mathcal{M}\|_{L^1(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}_+)}(t) = \mathcal{O}(e^{-\lambda_3 t})$ , où  $\mathcal{M}$  est défini par (4.3.10).*

## 4.4 Cas des mélanges ([43]).

Dans cette partie, on utilise la stratégie des coefficients de relaxation précédemment utilisée pour établir un modèle BGK pour les mélanges de gaz. Jusqu'à présent, de nombreux modèles étaient basés sur l'idée introduite dans ([147, 112, 113]) qui suggère de construire un opérateur de relaxation rendant compte des mêmes taux d'échanges entre les espèces que l'opérateur de Boltzmann non linéaire pour les molécules maxwelliennes. Plus précisément, on considère les différents moments de l'opérateur de Boltzmann non linéaire et on exige de notre opérateur de relaxation de satisfaire les mêmes relations. Ainsi, dans ([103]) les auteurs établissent un modèle qui conserve masse, impulsion et énergie. Cependant, ce modèle ne préserve pas la positivité de la fonction de distribution et n'est pas entropique. Sur la même idée, Andries et al proposent un modèle ([1]) jouissant de bonnes propriétés mathématiques (lois de conservation, positivité de la fonction de distribution, théorème H). Cependant, il est montré numériquement dans [125] que ce modèle donne de mauvais coefficients de transports à la limite hydrodynamique.

Dans le cas présent, l'approche est différente et constitue un élément de rupture dans la dérivation des modèles BGK pour les mélanges de gaz. La motivation principale est d'obtenir un modèle de relaxation possédant de bonnes propriétés mathématiques et permettant d'ajuster certains coefficients de transport. Dans cette approche, on considère le système de Navier-Stokes éventuellement dérivé à partir de l'équation de Boltzmann. Ensuite en introduisant les coefficients de relaxation et en résolvant un problème de minimisation sous contrainte, on obtient un modèle BGK permettant d'obtenir la bonne matrice de Fick.

### 4.4.1 Notations

On considère un mélange de gaz à  $p$  composantes décrit par la fonction de distribution  $\mathbf{f} := (f_1, \dots, f_p)$  où  $f_i(t, x, v)$  désigne la fonction de distribution de l'espèce  $i$ . On désignera par  $n^i$ ,  $\rho^i$ ,  $u^i$ ,  $E^i$ ,  $\mathcal{E}^i$  et  $T^i$

la densité, la vitesse moyenne, l'énergie par unité de volume, l'énergie par particule et finalement la température de l'espèce  $i$  définies par

$$\begin{aligned} n^i &= \int_{\mathbb{R}^3} f_i d\mathbf{v}, & \rho^i &= m_i n^i, & n^i \mathbf{u}^i &= \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{v} f_i d\mathbf{v}, \\ E^i &= \frac{1}{2} \rho^i \|\mathbf{u}^i\|^2 + n^i \mathcal{E}^i, & \mathcal{E}^i &= \frac{3}{2} k_B T^i = \frac{m_i}{2n^i} \int_{\mathbb{R}^3} \|\mathbf{v} - \mathbf{u}^i\|^2 f_i d\mathbf{v}, \end{aligned}$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann.

$$n = \sum_{k=1}^p n^k, \quad \rho = \sum_{k=1}^p \rho^k, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_{k=1}^p \rho^k \mathbf{u}^k, \quad n\mathcal{E} + \frac{\rho}{2} \|\mathbf{u}\|^2 = E = \sum_{k=1}^p E^k, \quad \mathcal{E} = \frac{3}{2} k_B T. \quad (4.4.18)$$

Etant donné un mélange de  $p$  espèces de quantités macroscopiques  $n^i, \mathbf{u}, T$ , on considère les fonctions Maxwelliennes à l'équilibre qui s'écrivent

$$\forall i \in [1, p], \mathcal{M}_i = \frac{n^i}{(2\pi k_B T / m_i)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{m_i (\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2k_B T}\right). \quad (4.4.19)$$

On note  $\mathbf{M} := (\mathcal{M}_1, \dots, \mathcal{M}_p)$ . Pour toute liste de fonctions positives  $\mathbf{f} := (f_1, \dots, f_p)$  on définit l'entropie  $\mathcal{H}$  du mélange par :

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

On note  $\mathbb{L}^2(\mathbf{M}) = \Psi(\psi_1, \dots, \psi_p)$  t.q.  $\psi_i \sqrt{\mathcal{M}_i} \in \mathbb{L}^2$  muni du produit scalaire naturel

$$\langle \Psi, \Phi \rangle = \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \phi_i \mathcal{M}_i d\mathbf{v}.$$

L'ensemble naturel des invariants de collision  $\mathbb{K}$  de  $\mathbb{L}^2(\mathbf{M})$  est engendré par la liste de fonctions suivantes :

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

Cet espace est de dimension  $p + 4$  et les fonctions sont notées  $\phi^l, l \in [1, p + 4]$ . Contrairement au cas monoespèce, il existe un espace "complémentaire"  $\mathbb{C}$  de moments de degré 1 en vitesse qui n'est pas conservé. Cet espace aura un intérêt particulier dans la suite.

**Définition 4.4.5.** Soit  $\mathbf{C}_i$  le vecteur dont la  $i^{\text{eme}}$  composante est  $\mathbf{v} - \mathbf{u}$  les autres étant nulles. On note par  $\mathcal{P}_{\mathbb{K}}$  la projection orthogonale sur  $\mathbb{K}$  et  $\mathcal{I}$  l'opérateur identité. Alors on définit  $\mathbb{C}$  comme l'espace engendré par les vecteurs  $(\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}})(\mathbf{C}_i), i \in [1, p]$ .

La famille  $(\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}})(\mathbf{C}_i), i \in [1, p]$  est composée des  $p - 1$  "vecteurs" indépendants. Ainsi,  $\dim(\mathbb{C}) = 3(p - 1)$ .

#### 4.4.2 Propriétés à vérifier pour l'opérateur de relaxation

On énonce ensuite les propriétés requises pour les opérateurs que nous allons établir. On exige alors de l'opérateur de relaxation  $\mathcal{R} := (\mathcal{R}_1, \dots, \mathcal{R}_p)$  de vérifier les propriétés fondamentales suivantes :

##### 1. Invariants de collision

$$\forall \mathbf{f}, f_i \geq 0, \forall \phi, \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}_i(\mathbf{f}) \phi_i d\mathbf{v} = 0 \Leftrightarrow \phi \in \mathbb{K}. \quad (4.4.20)$$

2. **Théorème H** : Pour toute liste de fonctions positives  $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_p)$  on a

$$\sum_{i=1}^{i=p} \int_{\mathbb{R}^3} \mathcal{R}_i(\mathbf{f}) \ln(f_i) d\mathbf{v} \leq 0. \quad (4.4.21)$$

3. **Etats d'équilibre** : L'égalité 4.4.21 est vérifiée ssi  $\mathbf{f}$  est à l'équilibre thermodynamique i.e il existe des quantités macroscopiques  $n_1, \dots, n_p, \mathbf{u}, T$  telles que  $\forall i \in [1, p], f_i = \mathcal{M}_i$ . Dans ce cas, on note  $\mathbf{f} = \mathbf{M}$ . De plus,  $\mathbf{M}$  est le seul ensemble de fonctions telles que  $\mathcal{R}_i(\mathbf{f}) = 0$ .

4. **Opérateur linéaire** : Soit  $\mathcal{L} := (\mathcal{L}_1, \dots, \mathcal{L}_p)$  l'opérateur linéarisé de  $\mathcal{R}$ , alors  $\text{Ker}(\mathcal{L}) = \mathbb{K}$ ,  $\mathcal{L}$  est continu, inversible, auto-adjoint et négatif sur  $\mathbb{K}^\perp$ .

Ces propriétés sont motivées par celles de l'opérateur de Boltzmann linéarisé ([3])  $\mathcal{L}_B := (\mathcal{L}_{B,1}, \dots, \mathcal{L}_{B,p})$  défini par  $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_p) \in \mathbb{L}^2(\mathbf{M})$

$$\mathcal{L}_{B,i}(\mathbf{g}) = \frac{1}{\mathcal{M}_i} \left( \sum_{j=1}^p Q_{ji}(\mathcal{M}_j, \mathcal{M}_i g_i) + Q_{ji}(\mathcal{M}_j g_j, \mathcal{M}_i) \right). \quad (4.4.22)$$

On aurait pu rajouter aux propriétés ci-dessus que  $\mathcal{L}$  doit être un opérateur de Fredholm.

### 4.4.3 Système de Navier-Stokes

Le système de Navier-Stokes pour un mélange à  $p$  composantes s'écrit

$$\forall i \in [1, p], \partial_t n^i + \nabla \cdot (n^i \mathbf{u} + \mathbf{J}_i) = 0, \quad (4.4.23)$$

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\mathbb{P} + \rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \mathbb{J}_u) = 0, \quad (4.4.24)$$

$$\partial_t E + \nabla \cdot (E \mathbf{u} + \mathbb{P}[\mathbf{u}] + \mathbb{J}_u[\mathbf{u}] + \mathbf{J}_q) = 0, \quad (4.4.25)$$

où  $\mathbf{J}_i, \mathbb{J}_u, \mathbf{J}_q$  sont respectivement les flux de masse, de quantité de mouvement et de chaleur. La référence bibliographique classique concernant la thermodynamique des processus irréversibles (TIP) pour les mélanges de gaz est l'ouvrage de De Groot et Mazur ([80]). Dans ce livre les flux s'écrivent

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i &= \sum_{j=1}^{j=p} L_{ij} \nabla \left( \frac{-\mu_j}{T} \right) + L_{i\mathbf{q}} \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \\ \mathbf{J}_q &= \sum_{j=1}^{j=p} L_{qj} \nabla \left( \frac{-\mu_j}{T} \right) + L_{q\mathbf{q}} \nabla \left( \frac{1}{T} \right) \\ \mathbb{J}_u &= L_{u\mathbf{u}} \mathbb{D}(\mathbf{u}), \end{aligned} \quad (4.4.26)$$

où  $\mu_i$  désigne le potentiel chimique des espèces  $i$  dans le mélange et  $\mathbb{D}(\mathbf{u})$  la partie sans trace du tenseur de viscosité. Dans un mélange de gaz idéaux les potentiels chimiques sont donnés par la relation

$$-\frac{\mu_i}{T} = k_B \left( \ln(n_i) - \frac{3}{2} \ln \left( \frac{2\pi k_B T}{m_i} \right) \right). \quad (4.4.27)$$

De plus, si on suppose que les relations de Casimir-Onsager sont satisfaites pour les coefficients cinétiques, alors la matrice suivante :

$$\mathbf{L} := \begin{bmatrix} L_{ij} & L_{i\mathbf{q}} & 0 \\ L_{qj} & L_{q\mathbf{q}} & 0 \\ 0 & 0 & L_{u\mathbf{u}} \end{bmatrix} \quad (4.4.28)$$

doit être définie négative.

### 4.4.4 Calcul des coefficients de relaxation

Avant d'énoncer le résultat principal, on donne quelques propriétés de la matrice de Fick ( $L_{ij}$ ) obtenue à partir de la linéarisation de l'opérateur de Boltzmann. On introduit ensuite la matrice ( $L_{ij}^*$ ) associée à la matrice  $L_{ij}$ .

**Proposition 4.** La matrice  $(L_{ij})_{i,j}$  donnée dans (4.4.28) est de rang  $p - 1$ . On introduit la matrice  $L_{ij}^*$  définie par

$$L_{ij}^* := \frac{k_B L_{ij}}{\|C_i\| \|C_j\|} = k_B L_{ij} \sqrt{\frac{m_i}{n_i k_B T}} \sqrt{\frac{m_j}{n_j k_B T}}, \quad \forall i, j \in \{1, p\} \quad (4.4.29)$$

et on considère son spectre  $(d_r, w_r)_{r \in \{1, p\}}$ . Supposons que  $\mathcal{R}(\mathbf{f})$  vérifie les propriétés 1), 2), 3) et 4). Alors en posant

$$\lambda_r = -d_r^{*-1}, \quad \lambda_p = 0$$

le modèle BGK permet de retrouver la loi de Fick à la limite hydrodynamique.

De plus si  $\mathcal{L}$ , l'opérateur linéarisé de  $\mathcal{R}$  est tel que  $\mathcal{L}^{-1}(\mathbf{B}) \in \mathbb{C}^\perp$ , alors le flux de masse s'écrit

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

#### 4.4.5 Définition de l'opérateur de relaxation de Fick

$\mathbf{f} \geq 0$  étant donnée, on définit l'ensemble des contraintes  $\mathcal{C}_f$  comme les fonctions  $\mathbf{g} \geq 0$ , telles que

$$\forall l \in [1, p + 4], \sum_{i=1}^{i=p} \int_{\mathbb{R}^3} \phi_i^l (g_i - f_i) d\mathbf{v} = 0, \quad (4.4.30)$$

$$\forall r \in [1, p - 1], \sum_{i=1}^{i=p} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{w}_{r,i} \left( g_i - \left( 1 - \frac{\lambda_r}{\nu} \right) f_i \right) d\mathbf{v} = \mathbf{0}. \quad (4.4.31)$$

Dans le cas présent les coefficients de relaxation sont les  $\lambda_r$ ,  $r \in \{1; p\}$ . La contrainte (4.4.30) va garantir les propriétés de conservation tandis que la contrainte (4.4.31) va donner la loi de Fick.

On note alors par  $\bar{\mathbf{U}} = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^p)^T$  et  $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p)^T$  les vitesses moyennes de  $\mathbf{f}$  et  $\mathbf{g}$  et  $\mathbf{N}$  et  $\Lambda$  les matrices diagonales dont les termes diagonaux sont respectivement  $(\sqrt{\rho_1}, \dots, \sqrt{\rho_p})$  et  $(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ . La relation 4.4.31 s'écrit alors

$$\underline{\mathbf{U}} - \mathbf{U} = \mathbf{N}^{-1} W^T \left( \mathbf{I} - \frac{1}{\nu} \Lambda \right) W \mathbf{N} (\bar{\mathbf{U}} - \mathbf{U}). \quad (4.4.32)$$

Afin de garantir la conservation de l'énergie totale pour notre modèle, on définit  $T^*$  comme étant la température associée aux  $g_i$

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

On peut alors démontrer que pour  $\nu \geq \lambda_r$ , on a bien  $T^* \geq 0$ .

**Théorème 4.4.1.** Soient  $\mathbf{f}$  et  $T^*$  définis comme précédemment. Alors pour toute valeur  $\nu \geq \max_r \lambda_r$ ,  $\mathbf{K}_f \neq \emptyset$  et il existe une unique solution  $\underline{\mathbf{G}}$  du problème de minimisation

$$\underline{\mathbf{G}} = \text{Argmin}_{\mathbf{g} \in \mathbf{K}(\mathbf{f})} \mathcal{H}(\mathbf{g}). \quad (4.4.33)$$

Cette solution s'écrit

$$\forall i \in [1, p], G_i = \frac{n^i}{(2\pi k_B T^*/m_i)^{3/2}} \exp \left( -\frac{m_i (\mathbf{v} - \mathbf{u}_i)^2}{2k_B T^*} \right). \quad (4.4.34)$$

**Définition 4.4.6.** On définit l'opérateur de relaxation de Fick  $\mathcal{R}(\mathbf{f})$  par la relation

$$\mathcal{R}(\mathbf{f}) = \nu (\mathbf{G} - \mathbf{f}), \quad (4.4.35)$$

où  $\nu \geq \max_r \lambda_r/2$  et  $\mathbf{G} = \min\{H(\mathbf{g}), \text{ s.t. } \mathbf{g} \in \mathbf{K}(\mathbf{f})\}$ .

On montre ensuite que l'opérateur de relaxation de Fick vérifie bien les hypothèses 1), 2), 3) et 4), donnée à la sous-section 4.4.2.

**Proposition 5.** *L'opérateur de relaxation de Fick vérifie les propriétés 1), 2), 3), 4). L'opérateur linéarisé  $\mathcal{L}$  et s'écrit*

$$\mathcal{L} = \nu (\mathcal{P}_{\mathbb{K}} + R \circ \mathcal{P}_{\mathbb{C}} - \mathcal{I}),$$

où  $\mathcal{I}$  est l'opérateur identité sur  $\mathbb{L}^2(\mathbf{M})$ .  $\mathcal{P}_{\mathbb{K}}$  et  $\mathcal{P}_{\mathbb{C}}$  représentent les projections orthogonales sur  $\mathbb{K}$  et  $\mathbb{C}$ . Finalement  $R$  est l'opérateur linéaire défini sur  $\mathbb{C}$  par :

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

#### 4.4.6 Limite hydrodynamique

Dans la suite, on détermine la limite hydrodynamique à l'ordre 1 du système

$$\forall i \in [1, p], \partial_t f_i^\varepsilon + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{R}(f^\varepsilon). \quad (4.4.36)$$

**Théorème 4.4.2.** *On définit  $\mathcal{R}(\mathbf{f})$  par (4.4.36) et on pose  $\nu \geq \max_r \lambda_r$ . Alors la limite hydrodynamique (4.4.36) donne à l'ordre 1, le système de Navier-Stokes (4.4.23) dont les flux sont donnés par*

$$\mathbf{J}_i = \sum_{j=1}^p L_{ij} \nabla \left( \frac{-\mu_j}{T} \right), \quad \mathbf{J}_q = \frac{5 k_B^3 T^3}{2\nu} \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{m_i} \nabla \left( \frac{1}{T} \right), \quad \mathbb{J}_u = -\frac{n k_B^2 T^2}{\nu} \mathbb{D}(\mathbf{u}). \quad (4.4.37)$$

Dans le cas présent,  $(L_{ij})_{ij}$  est la matrice de Fick calculée avec l'opérateur de Boltzmann linéarisé par la relation

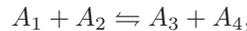
$$\forall (i, j) \in [1, p]^2, \langle k_B^{-1} \mathcal{L}^{-1} (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) (\mathbf{C}_i), (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}}) (\mathbf{C}_j) \rangle = L_{ij}.$$

**Remarque 4.** *Soit  $\mu = -\mathbf{L}_{uu}$  la viscosité du mélange. Alors si la condition  $\mu \leq \frac{n k_B^2 T^2}{\max_r \lambda_r}$  est satisfaite, on peut retrouver la viscosité en posant  $\nu = n k_B^2 T^2 / \mu$ .*

Dans le cas présent, les flux sont calculés à partir de notre construction naturelle, à savoir en utilisant le concept de taux de relaxation associé à des moments ad-hoc.

## 4.5 Cas des mélanges réactifs

Dans cette partie, on construit à partir du modèle précédent un modèle de relaxation pour les mélanges réactifs. Dans ce chapitre, nous ne considérerons que des réactions chimiques à 4 constituants de la forme



où  $A_1, A_2, A_3$  et  $A_4$  représentent les 4 espèces qui réagissent entre elles. Signalons d'un point de vue bibliographique, l'ouvrage [91] sur la théorie cinétique des modèles réactifs. Dans les lignes qui suivent, nous rappelons quelques travaux réalisés sur le sujet.

Concernant les modèles cinétiques collisionnels, le modèle de Rossani-Spiga ([144]) s'écrit comme un splitting entre une partie mécanique de type Boltzmann et une partie chimique. Ce modèle a été généralisé à un modèle possédant une saveur polyatomique ([109]) où chaque espèce possède un niveau d'énergie discret. Dans ([22]) les auteurs proposent un scaling sur le modèle ([144]) permettant ainsi de faire le lien au niveau fluide avec des équations de réaction-diffusion. Dans [91, 104], les auteurs considèrent un modèle collisionnel de type Boltzmann inélastique de type polyatomique. La variable d'énergie interne est discrète et rend compte des échanges d'énergie qui se produisent au cours des réactions chimiques. Par ailleurs, dans ([79]) les auteurs généralisent le modèle collisionnel associé au modèle de Borgnakke et Larsen donnée dans ([78], [29]) à un cadre réactif.

Par ailleurs, de nombreux modèles BGK ont été construits de manière à coïncider avec le modèle ([144]). Ils sont constitués d'un seul opérateur de relaxation par espèce incluant à la fois les parties

chimiques et mécaniques ([110], [25]). Dans [110], le modèle est construit selon la même stratégie que ([1]) et en constitue une extension chimique. Les transferts de moments sont calculés pour le modèle [144] et ensuite la Maxwellienne de l'opérateur de relaxation est déterminée pour satisfaire ces mêmes taux. Ce modèle possède toutes les bonnes propriétés excepté le théorème H. La limite hydrodynamique pour ce modèle est ensuite calculée pour les réactions lentes ([25]) et pour les réactions rapides ([24]). Un autre opérateur BGK chimique a été construit dans [108] vérifiant toutes les propriétés fondamentales, y compris le théorème H. C'est justement ce modèle que nous prendrons pour la partie chimique.

Dans l'article décrit dans cette section, l'idée directrice est d'utiliser un splitting entre la partie mécanique et la partie chimique de l'opérateur de relaxation. Pour la partie mécanique, on considèrera l'opérateur de relaxation ([43]) dérivé dans la section précédente. L'opérateur de relaxation chimique choisi est celui développé dans ([108]).

La fonction de distribution  $f_i(t, x, v)$  ( $f_i, i \in [1, 4]$  où  $\mathbf{f} := (f_1, f_2, f_3, f_4)$ ) pour une espèce donnée  $i$  évolue selon l'équation cinétique

$$\forall i \in [1, 4], \partial_t f_i + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_i = \mathcal{R}_i^{ME}(\mathbf{f}) + \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f}), \quad (4.5.38)$$

où  $\mathcal{R}_i^{ME}(\mathbf{f})$  (resp.  $\mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f})$ ) représente la partie mécanique (resp. chimique) de l'opérateur de relaxation. On décrit alors l'opérateur chimique dans la sous-section suivante.

### 4.5.1 Prise en compte du terme chimique

La partie chimique de l'opérateur de relaxation construit dans ([108]) s'écrit

$$\mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f}) = \nu_i^C (\tilde{\mathcal{M}}_i - f_i),$$

avec

$$\tilde{\mathcal{M}}_i = \tilde{n}^i \left( \frac{m_i}{2\pi k_B \tilde{T}} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{m_i}{2k_B \tilde{T}} (\mathbf{v} - \tilde{\mathbf{u}})^2 \right),$$

où les paramètres  $\tilde{n}^i$ ,  $\tilde{\mathbf{u}}$  et  $\tilde{T}$  sont calculés ci-dessous ([108]). Puisque le modèle total doit satisfaire les équations de conservation

$$\begin{aligned} \int (\mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f}) + \mathcal{R}_j^{CE}(\mathbf{f})) d\mathbf{v} &= 0, & (i, j) &= (1, 3), (1, 4), (2, 4), \\ \sum_{i=1}^4 \int m_i \mathbf{v} \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f}) d\mathbf{v} &= 0, & \sum_{i=1}^4 \int \left( \frac{1}{2} m_i v^2 + E^i \right) \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f}) d\mathbf{v} &= 0, \end{aligned} \quad (4.5.39)$$

les densités  $\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_4$ , la vitesse  $\tilde{\mathbf{v}}$  et la température  $\tilde{T}$  sont déterminées par l'ensemble des équations

$$\begin{aligned} \tilde{n}^i &= n_i + \Lambda^i \frac{\nu_1^C}{\nu_i^C} (\tilde{n}^1 - n^1), \quad i = 2, 3, 4, \\ \tilde{\mathbf{u}} &= \frac{\sum_{i=1}^4 \nu_i^C m_i n_i \mathbf{u}^i}{\sum_{i=1}^4 \nu_i^C m_i n_i}, \\ \tilde{T} &= \left\{ \sum_{i=1}^4 \nu_i^C n_i \left[ \frac{1}{2} m_i ((\mathbf{u}^i)^2 - \tilde{\mathbf{u}}^2) + \frac{3}{2} k_B T^i \right] + \nu_1^C \Delta E (\tilde{n}^1 - n^1) \right\} / \left( \frac{3}{2} k_B \sum_{i=1}^4 \nu_i^C n_i \right), \end{aligned}$$

couplées avec la loi d'action des masses

$$\frac{\nu_3^C \nu_4^C \tilde{n}_1 (\nu_2^C n_2 + \nu_1^C (\tilde{n}_1 - n_1))}{\nu_2^C (\nu_3^C n_3 - \nu_1^C (\tilde{n}_1 - n_1)) (\nu_4^C n_4 - \nu_1^C (\tilde{n}_1 - n_1))} \exp \left( -\frac{\Delta E}{k_B \tilde{T} (\tilde{n}_1)} \right) = \left( \frac{\mu_{12}}{\mu_{34}} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (4.5.40)$$

L'opérateur de relaxation complet  $\mathcal{R}_i(\mathbf{f}) = \mathcal{R}_i^{ME}(\mathbf{f}) + \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f})$  possède les mêmes invariants collisionnels que l'opérateur de Boltzmann pour les gaz réactifs. A savoir, les relations 4.5.39 sont vérifiées en remplaçant  $\mathcal{R}^{CE}$  par  $\mathcal{R}$ .

### 4.5.2 Propriété du modèle

Le théorème suivant rassemble les propriétés fondamentales vérifiées par le modèle.

**Théorème 4.5.1.** *Soit  $\mathcal{H}(\mathbf{f})$  définie par*

$$\mathcal{H}(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^4 \int_{\mathbb{R}^3} f_i \frac{\ln(f_i)}{m_i^3} d\mathbf{v}.$$

*On a alors les propriétés dissipatives suivantes*

$$\sum_{i=1}^P \int_{\mathbb{R}^3} (\mathcal{R}_i^{ME}(\mathbf{f}) + \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f})) \ln(f_i/m_i^3) d\mathbf{v} \leq 0.$$

*Les assertions suivantes sont équivalentes :*

*i) Le taux de production d'entropie est égal à 0*

$$\sum_{i=1}^P \int_{\mathbb{R}^3} (\mathcal{R}_i^{ME}(\mathbf{f}) + \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f})) \ln(f_i/m_i^3) d\mathbf{v} = 0.$$

*ii) Pour tout  $i$ ,  $\mathcal{R}_i^{ME}(\mathbf{f}) + \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f}) = 0$ ,*

*iii) les fonctions de distribution  $f_i$  sont à l'équilibre mécanique et chimique :*

$$\forall i \in [1, 4], f_i = \mathcal{M}_i = \frac{n_i}{(2\pi k_B T/m_i)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m_i(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2k_B T}\right)$$

*avec la loi d'action des masses*

$$\frac{n^1 n^2}{n^3 n^4} = \left(\frac{\mu^{12}}{\mu^{34}}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{\Delta E}{KT}\right).$$

### 4.5.3 Limites hydrodynamiques pour les réactions lentes

On se place pour le régime des réactions lentes ([25]). Pour ce scaling, 4.5.38 s'écrit

$$\partial_t f_i^\varepsilon + \mathbf{v} \cdot \nabla_x f_i^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{R}_i^{ME}(\mathbf{f}) + \mathcal{R}_i^{CE}(\mathbf{f}). \quad (4.5.41)$$

Afin d'étudier la limite hydrodynamique de (4.5.41), on utilise une procédure de Chapman-Enskog. Le système d'Euler s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_t n_i + \nabla_x \cdot (n_i \mathbf{u}) &= \Lambda_i \nu_1^C (\tilde{n}_1 - n_1), \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla_x \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \mathbb{I} \otimes \mathbb{I}) &= 0, \\ \partial_t E + \nabla \cdot ((E + p) \mathbf{u}) &= \nu_1^C (\tilde{n}_1 - n_1) \Delta E, \end{aligned}$$

où la pression  $p$  est définie par  $p = \rho RT$  et  $E$  représente l'énergie mécanique :  $E = \frac{\rho}{2} \mathbf{u}^2 + \frac{3}{2} n k_B T$  et  $\mathbb{I}$  est la matrice identité.

Ensuite, pour l'obtention du système de Navier-Stokes, le point clef est le calcul de l'opérateur linéarisé associé à l'opérateur chimique  $\mathcal{L}^{CE}$ . Ainsi on obtient :

**Théorème 4.5.2.** *Le système de Navier-Stokes pour les réactions chimiques lentes de (4.5.41) s'écrit*

$$\begin{aligned} \partial_t n_i + \nabla \cdot (n_i \mathbf{u}) + \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{J}_i &= \Lambda_i \nu_1^C (\tilde{n}_1 - n_1) + \varepsilon \omega_i^1, \\ \partial_t(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + \mathbb{P}) + \varepsilon \nabla \cdot \mathbb{J}_{\mathbf{u}} &= 0, \\ \partial_t E_{tot} + \nabla \cdot (E_{tot} \mathbf{u} + \mathbb{P} \mathbf{u}) + \varepsilon \nabla \cdot (\mathbb{J}_{\mathbf{u}}[\mathbf{u}] + \mathbf{J}_q) + \varepsilon \nabla \cdot \left( \sum_i E_i \mathbf{J}_i \right) &= 0, \end{aligned}$$

où l'énergie totale et la pression sont  $E_{tot} = \frac{1}{2}\rho u^2 + \frac{3}{2}nk_B T + \sum_i E_i n_i$ ,  $\mathbb{P} = nk_B T \mathbb{I} \otimes \mathbb{I}$ . Les flux sont définis par (4.4.37)

$(\Lambda_i \nu_1^C (\tilde{n}_1 - n_1))_i$  représentent les termes chimiques d'ordre zéro où  $\tilde{n}_1$  est l'unique solution de l'équation (4.5.40). La perturbation à l'ordre 1 du terme chimique s'écrit

$$\begin{aligned}\omega_i^1 &= \Lambda_i \nu_1^C \tau(\tilde{n}_1) \bar{h}, \\ \tau(\tilde{n}_1) &= \left( \frac{\mu_{12}}{\mu_{34}} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\Delta E}{k_B \tilde{T}^2} / \left( \xi'(\tilde{n}_1) + \xi(\tilde{n}_1) \frac{\nu_1 (\Delta E)^2}{\frac{3}{2} k_B^2 \tilde{T}^2 \sum_{i=1}^4 \nu_i^C n_i} \right), \\ \bar{h} &= \Delta E (\tilde{n}_1 - n_1) \frac{\sum_{i=1}^4 (\nu_i^C)^2 \rho_i}{\nu^M \sum_{i=1}^4 \nu_i^C n_i} \left( \frac{\nu_1^C}{\sum \nu_i^C n_i} - \frac{1}{n} \right).\end{aligned}$$

# Chapitre 5

## Modèles aux moments $M_n$

On suppose dans ce travail que le plasma est constitué d'électrons et d'une espèce d'ions considérés comme **fixes** dans le plasma. C'est une hypothèse classique en physique, qui se justifie par le fait que les ions sont nettement plus lourds que les électrons. Le modèle sera physiquement valide sur un petit intervalle. Il n'y aura donc pas d'équations sur les ions, mais la fonction de distribution interviendra dans l'équation sur les électrons pour prendre en compte les interactions ions/électrons. Le but est alors d'établir de nouveaux modèles pour les plasmas qui soient un bon compromis entre les modèles hydrodynamiques ([37, 61, 62, 63]) dont il sera l'objet dans la section 8 et les modèles cinétiques ([64, 48, 49, 89, 90, 149]). En physique des plasmas, l'approximation classique revient à supposer que la contribution principale pour l'opérateur de collision électron-électron provient de sa partie isotrope. Le modèle ainsi obtenu conserve la masse et l'énergie et dissipe l'entropie. Cependant quelle que soit la fermeture choisie, ce modèle est mal posé mathématiquement car il ne préserve pas le domaine de réalisabilité. C'est pour cela que l'on considère une nouvelle approximation de l'opérateur de collision électron-électron pour corriger ce modèle. Ce nouveau modèle satisfait alors les propriétés fondamentales (i.e. lois de conservation, dissipation de l'entropie et conservation du domaine de réalisabilité).

Le principe général de sa dérivation est le suivant. La vitesse microscopique est écrite en coordonnées sphériques et le modèle est construit en considérant des moments par rapport à l'angle. Cependant le choix de la fermeture en angle est cruciale pour garantir des propriétés raisonnables pour le modèle. Par exemple, le modèle  $P_1$  ([106]) ne satisfait ni la positivité de la fonction de distribution des électrons ni la dissipation de l'entropie. Cependant dans [115], une modification du modèle  $P_N$  permet de corriger ce défaut mais la fermeture  $P_N$  conduit à un modèle non entropique. C'est pour cela que nous avons développé une nouvelle fermeture basée sur un principe de minimisation d'entropie. Cela permet d'obtenir un nouveau modèle appelé modèle  $M_1$ , introduit dans [88] pour le transfert radiatif et basé sur un principe de minimisation de l'entropie radiative (cf [98] pour une extension). On étend dans une dernière partie ces modèles à un nombre quelconque de moments en proposant une nouvelle approximation du modèle de Fokker-Planck de manière à surmonter le problème de la non-conservation du domaine de réalisabilité par les approximations usuelles.

### 5.1 Principe de la fermeture aux moments angulaire

Ce système est construit par un principe de minimisation d'entropie en la variable angulaire de la vitesse, l'énergie étant considérée comme une variable cinétique. Soit  $S_2$  la sphère unité,  $\Omega = v/|v|$  représente la direction de propagation des particules. Ainsi, en posant  $\zeta = |v|$ , les trois premiers moments selon  $\Omega$  s'écrivent

$$f^0(\zeta) = \zeta^2 \int_{S_2} f(v) d\Omega, \quad f^1(\zeta) = \zeta^2 \int_{S_2} \Omega f(v) d\Omega, \quad f^2(\zeta) = \zeta^2 \int_{S_2} \Omega \otimes \Omega f(v) d\Omega. \quad (5.1.1)$$

Le principe de minimisation d'entropie ([131, 132]) implique que  $f$  doit être

$$f = \rho_0(\zeta) \exp(-\Omega \cdot \alpha(\zeta)), \quad \rho_0 \geq 0, \quad \alpha \in \mathbb{R}^3. \quad (5.1.2)$$

Le paramètre d'anisotropie  $a = f^1/f^0$ , vérifie par construction  $|a| \leq 1$ . Le calcul des différents moments de la fonction de distribution (5.1.2) donne

$$f^0 = 4\pi\rho_0 \frac{\sinh(|\alpha|)}{|\alpha|}, \quad f^1 = 4\pi\rho_0 \frac{\sinh(|\alpha|)(1 - |\alpha| \coth(|\alpha|))}{|\alpha|^3} \alpha. \quad (5.1.3)$$

et le paramètre d'anisotropie, peut alors être explicitement calculé.

Par souci de simplicité, on a choisi dans ([134, 135]) une direction de propagation monodimensionnelle.  $\mu \in [-1, 1]$  remplace alors  $\Omega$  comme variable de direction de propagation. En posant  $\zeta = |v|$ , la fonction de distribution  $f$  s'écrit en coordonnées sphériques  $f(x, \zeta, \mu)$ . Les  $N$  premiers moments par rapport à  $\mu$  sont définis par

$$f^i = 2\pi\zeta^2 \int_{-1}^1 f(\zeta, \mu) \mu^i d\mu = \zeta^2 \langle f \mu^i \rangle, \quad i \in \{0, N\}, \quad (5.1.4)$$

où  $\langle . \rangle$  est défini pour toute fonction  $\Psi$  par

$$\langle \Psi \rangle = 2\pi \int_{-1}^1 \Psi(\mu) d\mu.$$

On pose ensuite  $F^i(\zeta) = \frac{f^i(\zeta)}{\zeta^2}$ . Dans le cas d'un nombre quelconque de moments, le principe de minimisation d'entropie implique que  $f$  doit être prise sous la forme

$$f(\zeta, \mu) = \exp(\bar{\alpha}(\zeta, t, x) \cdot \bar{\mu}), \quad (5.1.5)$$

avec  $\bar{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix}$  et  $\bar{\mu} = \begin{pmatrix} \mu^0 \\ \vdots \\ \mu^N \end{pmatrix}$ .

## 5.2 Equation cinétique classique

La fonction de distribution des électrons  $f(t, x, v)$  est solution de

$$\partial_t f + v \partial_x f = C(f, f), \quad C(f, f) = C_{ee}(f, f) + C_{ei}(f). \quad (5.2.6)$$

$C_{ee}$  représente l'opérateur de collision électron-électron

$$C_{ee}(f, f) = \alpha_{ee} \operatorname{div}_v \left( \int_{\mathbb{R}^3} \Phi(u) [f(v') \nabla_v f(v) - f(v) \nabla_{v'} f(v')] dv' \right), \quad (5.2.7)$$

où  $u = v - v'$  est la vitesse relative des électrons.  $\Phi(u)$  est un opérateur agissant sur la vitesse relative  $u$

$$\Phi(u) = \frac{1}{|u|^3} (|u|^2 Id - u \otimes u), \quad (5.2.8)$$

où  $Id$  est le tenseur unité et  $\alpha_{ee}$  est une constante physique positive.

L'opérateur de collision électron-ion  $C_{ei}(f)$  est défini par

$$C_{ei}(f) = \alpha_{ei} \operatorname{div}_v [\Phi(u) \nabla_v f(v)], \quad \text{où} \quad \alpha_{ei} = \frac{Z n_0 e^4 \ln \Lambda}{8\pi \epsilon_0^2 m_e^2} = Z n_0 \alpha_{ee}, \quad (5.2.9)$$

où  $\alpha_{ei}$  est à nouveau une constante physique positive. On vérifie ensuite que  $C_{ee}$  conserve la masse, l'impulsion et l'énergie, tandis que  $C_{ei}$  ne conserve que la masse et l'énergie. Ils vérifient tous deux la propriété de dissipation de l'entropie, ce qui implique que l'entropie de Boltzmann est une fonction de Lyapounov pour (5.2.6).

On décrit dans la proposition suivante les états d'équilibres des opérateurs de collision mis en jeu dans cette section.

**Propriété 5.2.1.** *Les états d'équilibre de l'opérateur électron-électron  $C_{ee}$  sont paramétrés par les Maxwelliennes*

$$f = n \left( \frac{m_e}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( - \frac{m_e (v - u_e)^2}{2k_B T} \right) ,$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann,  $n$  est la densité,  $u_e$  la vitesse macroscopique des électrons et  $T$  la température.

Les états d'équilibre de l'opérateur électron-ion  $C_{ei}$  sont donnés par les fonctions isotropes

$$f = f(|v|) .$$

Les états d'équilibre de l'opérateur  $C_{ee} + C_{ei}$  sont décrits par les Maxwelliennes isotropes.

### 5.3 Problème de réalisabilité

On considère la situation homogène en espace avec une seule espèce de particules. Dans ce cas, l'équation (5.2.6) s'écrit

$$\partial_t f = C_{ee}(f, f) . \quad (5.3.10)$$

La prise aux moments pour l'opérateur de collision  $C_{ee}(f, f)$  est complexe du fait de son caractère non linéaire. C'est pour cela qu'en physique des plasmas les approximations classiques pour les opérateurs reviennent à considérer que la principale contribution pour l'opérateur de collision électron-électron provient de sa partie isotrope. Cette approximation notée  $Q_{ee}$  a été définie dans [160] et utilisée dans [47, 84] afin d'étudier l'équation de Fokker-Planck-Landau homogène pour des fonctions de distribution isotropes. Par souci de simplicité, on considère le modèle  $M_1$  homogène en espace construit à partir des trois premiers moments. En intégrant l'équation (5.3.10) par rapport à  $\Omega$ , on obtient

$$\begin{cases} \partial_t f^0 = Q_{ee}^0 , \\ \partial_t f^1 = 0 , \end{cases} \quad (5.3.11)$$

avec

$$Q_{ee}^0 = \partial_\zeta \left( \zeta \int_0^\infty \tilde{J}(\zeta, \zeta') \left[ F^0(\zeta') \frac{1}{\zeta} \partial_\zeta (F^0(\zeta)) - F^0(\zeta) \frac{1}{\zeta'} \partial_{\zeta'} F^0(\zeta') \right] \zeta'^2 d\zeta' \right) , \quad (5.3.12)$$

et

$$\tilde{J}(\zeta, \zeta') = \frac{2\alpha_{ee}}{3} \inf \left( \frac{1}{\zeta^3}, \frac{1}{\zeta'^3} \right) \zeta'^2 \zeta^2 . \quad (5.3.13)$$

La définition de  $Q_{ee}^0$  a été établie en considérant que la contribution principale de cet opérateur provenait de la partie isotrope de  $f$ . Cependant, si l'on se réfère à l'exemple suivant 5.3.1, ce modèle ne préserve pas le domaine de réalisabilité

$$\mathcal{A} = \left\{ \bar{g} = \begin{pmatrix} g^0 \\ \vdots \\ g^N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N / \exists g \in L^1([-1, 1]) : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+ / g^i = \zeta^2 \langle \mu^i f(\alpha) \rangle, i \in \{0, N\} \right\} . \quad (5.3.14)$$

Dans le cas particulier des moments pris jusqu'au degré 1, on peut montrer que  $\mathcal{A}$  est égal à

$$\mathcal{B} = \left\{ g = \begin{pmatrix} g^0 \\ g^1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2, g^0 > 0 \text{ et } |g^1| < g^0 \right\} \cup \{(0, 0)\} .$$

Signalons au passage que dans ([122]), une caractérisation des domaines de réalisabilité pour un nombre arbitraire de moments est donnée. On peut d'ailleurs vérifier que cette caractérisation englobe bien  $\mathcal{B}$ .

**Exemple 5.3.1.** *On choisit les conditions initiales suivantes pour les parties isotrope et anisotrope  $f^0(t=0) = \frac{1}{3}\chi_{[0,3]}(\zeta)$  et  $f^1(t=0) = \frac{1}{4}\chi_{[0,3]}(\zeta)$ . Par l'effet de l'opérateur électron-électron, la partie isotrope relaxe vers une Maxwellienne centrée. De plus, le modèle  $M_1$  préservant la masse et l'énergie, la*

Maxwellienne possède la même masse et la même énergie que la fonction de distribution initiale. Alors la Maxwellienne s'écrit

$$f^0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(\frac{-\zeta^2}{2}\right) \zeta^2 .$$

Ainsi la figure 5.1 montre que le domaine de réalisabilité n'est pas préservé car l'expression de  $\mathcal{B}$  n'est plus satisfaite.

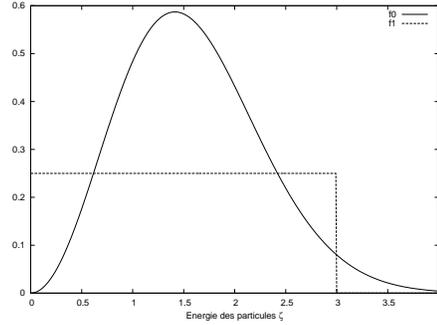


FIG. 5.1 – Moments  $f^0$  et  $f^1$  en fonction de l'énergie  $\zeta$  à l'état stationnaire lorsque  $\zeta_{\max} = 4$

## 5.4 Le modèle $M_1$

On s'intéresse dans cette partie plus particulièrement au modèle  $M_1$  construit à partir des deux premiers moments et fondé sur la fermeture (5.1.2). Dans les lignes qui suivent, on résume les résultats obtenus dans ([134]).

### 5.4.1 Propriétés entropiques du modèle continu

On montre dans un premier temps que le domaine de réalisabilité est conservé par le modèle continu suivant

$$\begin{cases} \partial_t f^0 + \nabla \cdot (\zeta f^1) = Q^0(f^0), \\ \partial_t f^1 + \nabla \cdot (\zeta f^2) = Q^0(f^1) + Q^1(f^1), \end{cases} \quad (5.4.15)$$

où

$$\begin{cases} Q^0(f^0) = \partial_\zeta \left( \zeta \int_0^\infty \tilde{J}(\zeta, \zeta') \left[ F^0(\zeta') \frac{1}{\zeta} \partial_\zeta (F^0(\zeta)) - F^0(\zeta) \frac{1}{\zeta'} \partial_{\zeta'} F^0(\zeta') \right] \zeta'^2 d\zeta' \right), \\ Q^0(f^1) = \partial_\zeta \left( \zeta \int_0^\infty \tilde{J}(\zeta, \zeta') \left[ F^0(\zeta') \frac{1}{\zeta} \partial_\zeta (F^1(\zeta)) - F^1(\zeta) \frac{1}{\zeta'} \partial_{\zeta'} F^0(\zeta') \right] \zeta'^2 d\zeta' \right), \\ Q^1(f^1) = -\frac{2\alpha_{ei}}{\zeta^3} f^1. \end{cases} \quad (5.4.16)$$

Le théorème résume alors les propriétés fondamentales de ce modèle.

**Théorème 5.4.1.** *Le domaine de réalisabilité est préservé au cours du temps par le problème continu (5.4.15, 5.4.16).*

*De plus,  $E = \ln(\rho) f^0 - \alpha f^1$  est une entropie pour le système (5.4.15, 5.4.16). Plus précisément, on a  $\partial_t E + \nabla \cdot F \leq 0$ , où  $F = \ln(\rho) f^1 - \alpha f^2$  est le flux d'entropie.*

### 5.4.2 Semi-discrétisation du problème

On propose maintenant une discrétisation du modèle  $M_1$  qui conserve le domaine de réalisabilité et qui soit entropique.

On définit le maillage primal  $\mathcal{M}$ , pour la variable de vitesse  $\zeta$ , décomposé en une famille de rectangles  $\mathcal{M}_{j+\frac{1}{2}} = ]\zeta_{j-1}, \zeta_j[$ ,  $\forall j \in [1, m]$ , où  $\zeta_j = j\Delta\zeta_j$  et  $m \in \mathbb{N}$  le nombre de points qui discrétisent le domaine en énergie.  $\Delta\zeta_i$  représente le pas de discrétisation qui peut être variable. On note par  $\mathcal{D}$  son maillage dual associé composé des cellules  $\mathcal{D}_j = ]\zeta_{j-\frac{1}{2}}, \zeta_{j+\frac{1}{2}}[$  où  $\zeta_{j-\frac{1}{2}} = (j - \frac{1}{2})\Delta\zeta_j$ . Soit  $h_j$  une approximation de  $h(\zeta_j)$  pour la fonction de distribution  $h$  et  $h_{j+\frac{1}{2}}$  une approximation de  $h(\zeta_{j+\frac{1}{2}})$ . On définit également

$F_j^k(\zeta) = \frac{f_j^k(\zeta)}{\zeta_j^2}$ ,  $k = 0, 1$ . Afin de résoudre ce problème, on introduit le domaine de réalisabilité discret

$$\mathcal{A}_d = \left\{ F = \begin{pmatrix} F_j^0 \\ F_j^1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2 / \exists f_j / F_j^k = \langle \mu^k f_j(\alpha, \mu) \rangle \forall k = 0, 1, \forall j \in [1, m] \right\}.$$

Il s'agit alors de proposer une discrétisation entropique du système (5.4.15) pour le modèle homogène en espace

$$\begin{cases} \partial_t f_j^0 = Q_j^0, \\ \partial_t f_j^1 = Q_j^1. \end{cases} \quad (5.4.17)$$

où les opérateurs  $Q_j^0$  et  $Q_j^1$  sont les formes discrètes respectives de  $Q^0(f^0)$  et  $Q^0(f^1) + Q^1(f^1)$  définis en (5.4.16). Les expressions de  $Q_j^0$  et  $Q_j^1$  sont données dans la définition suivante.

**Définition 5.4.7.** *Les opérateurs de collision  $Q_j^0$  et  $Q_j^1$  ont pour expression*

$$\begin{cases} Q_j^0 = \frac{G_{j+\frac{1}{2}}^0 - G_{j-\frac{1}{2}}^0}{\Delta\zeta_i}, \\ Q_j^1 = \frac{G_{j+\frac{1}{2}}^1 - G_{j-\frac{1}{2}}^1}{\Delta\zeta_i} - \frac{2\alpha_{ei}}{\zeta_i^3} f_j^1, \end{cases} \quad (5.4.18)$$

avec

$$\begin{cases} G_{j+\frac{1}{2}}^0 = \zeta_{j+\frac{1}{2}} \sum_k \tilde{J}(\zeta_{k+\frac{1}{2}}, \zeta'_{k+\frac{1}{2}}) \left[ F_{k+\frac{1}{2}}^0 \frac{1}{\zeta_{j+\frac{1}{2}}} \frac{F_{j+1}^0 - F_j^0}{\Delta\zeta_{j+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\zeta'_{k+\frac{1}{2}}} F_{j+\frac{1}{2}}^0 \frac{F_{k+1}^0 - F_k^0}{\Delta\zeta'_{k+\frac{1}{2}}} \right] \\ \quad \zeta_{j+\frac{1}{2}}'^2 \Delta\zeta'_{k+\frac{1}{2}}, \\ G_{j+\frac{1}{2}}^1 = \zeta_{j+\frac{1}{2}} \sum_k \tilde{J}(\zeta_{j+\frac{1}{2}}, \zeta'_{k+\frac{1}{2}}) \left[ F_{k+\frac{1}{2}}^0 \frac{1}{\zeta_{j+\frac{1}{2}}} \frac{F_{j+1}^1 - F_j^1}{\Delta\zeta_{j+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\zeta'_{k+\frac{1}{2}}} F_{j+\frac{1}{2}}^1 \frac{F_{k+1}^0 - F_k^0}{\Delta\zeta'_{k+\frac{1}{2}}} \right] \\ \quad \zeta_{k+\frac{1}{2}}'^2 \Delta\zeta'_{k+\frac{1}{2}}, \end{cases} \quad (5.4.19)$$

où

$$\tilde{J}(\zeta_{j+\frac{1}{2}}, \zeta'_{k+\frac{1}{2}}) = \frac{2\alpha_{ee}}{3} \inf \left( \frac{1}{\zeta_{j+\frac{1}{2}}^3}, \frac{1}{\zeta'_{k+\frac{1}{2}}^3} \right) \zeta_{j+\frac{1}{2}}^2 \zeta'_{k+\frac{1}{2}}'^2.$$

$F_{j+\frac{1}{2}}^0$  et  $F_{j+\frac{1}{2}}^1$  sont les approximations respectives de  $F^0(\zeta_{j+\frac{1}{2}})$  et  $F^1(\zeta_{j+\frac{1}{2}})$ .  $F_{j+\frac{1}{2}}^0$  et  $F_{j+\frac{1}{2}}^1$  sont calculés sur le maillage dual  $\mathcal{D}$  et sont définis comme des moyennes de  $F_j^k$  et  $F_{j+1}^k$ ,  $k \in \{0, 1\}$ . Dans le cas présent,  $(F_{j+\frac{1}{2}}^0, F_{j+\frac{1}{2}}^1)$  doivent être définis pour que le schéma soit entropique. Plus précisément, la preuve du théorème 5.4.1 doit être valide du point de vue discret.

**Remarque 5.** *Le point clef est le suivant. L'opérateur de collision  $Q^0(f)$  peut être écrit sous sa forme de Landau*

$$\partial_\zeta \left( \zeta'^2 \int_0^\infty \tilde{J}(\zeta, \zeta') \left( \frac{f(\zeta')}{\zeta'} \partial_\zeta \left( \frac{f(\zeta)}{\zeta^2} \right) - \frac{f(\zeta)}{\zeta} \partial_{\zeta'} \left( \frac{f(\zeta')}{\zeta'^2} \right) \right) \right),$$

ou sous sa forme de Rosenbluth

$$\partial_\zeta \left( \zeta'^2 \int_0^\infty \tilde{J}(\zeta, \zeta') f(\zeta) f(\zeta') \left( \partial_\zeta \ln \left( \frac{f(\zeta)}{\zeta^2} \right) - \partial_{\zeta'} \ln \left( \frac{f(\zeta')}{\zeta'^2} \right) \right) \right) .$$

Ces relations sont équivalentes pour le modèle continu mais pas toujours dans le cas discret. Ainsi le but du théorème 5.4.2 est de définir  $(F_{j+\frac{1}{2}}^0, F_{j+\frac{1}{2}}^1)$  de telle sorte que ces deux formes soient équivalentes dans le cas discret.

Ce problème a été en premier lieu considéré par Dellacherie ([83, 51]). En effet, Dellacherie *et al.* ont dérivé un schéma numérique entropique pour l'opérateur de collision par une moyenne entropique ([50, 82, 81]). Dans ces travaux,  $f_{i+\frac{1}{2}}$  est défini comme moyenne entropique de  $f_{i+1}$  et  $f_{i-1}$  selon

$$f_{j+\frac{1}{2}} = \frac{f_{j+1} - f_j}{\ln(f_{j+1}) - \ln(f_j)} \text{ si } f_{j+1} \neq f_j \text{ et } f_{j+\frac{1}{2}} \text{ sinon .}$$

Dans ce travail, cette approche est généralisée à un système. Plus précisément, on se donne  $(F_{j+1}^0, F_j^0)$ ,  $(F_{j+1}^1, F_j^1)$ ,  $\Delta \ln(\rho_j) = \ln(\rho_{j+1}) - \ln(\rho_j)$  et  $\Delta \alpha_j = \alpha_{j+1} - \alpha_j$ , où  $\rho_j \approx \rho(\zeta_j)$  et  $\alpha_j \approx \alpha(\zeta_j)$ .  $F_{j+\frac{1}{2}}^0$ ,  $F_{j+\frac{1}{2}}^1$ ,  $F_{j+\frac{1}{2}}^2$  sont alors recherchés de telle sorte que

$$\begin{cases} \frac{F_{j+1}^0 - F_j^0}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} = \frac{\Delta \ln(\rho_j)}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} F_{j+\frac{1}{2}}^0 - \frac{\Delta \alpha_j}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} F_{j+\frac{1}{2}}^1, \\ \frac{F_{j+1}^1 - F_j^1}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} = \frac{\Delta \ln(\rho_j)}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} F_{j+\frac{1}{2}}^1 - \frac{\Delta \alpha_j}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} F_{j+\frac{1}{2}}^2, \end{cases} \quad (5.4.20)$$

On note au passage que la forme de la fonction de distribution qui réalise la fermeture est utilisée dans (5.4.20). Nous verrons dans la prochaine section que nous pourrions nous en affranchir pour pouvoir généraliser la présente approche à un nombre de moments quelconques en raisonnant sur la forme générale de la fonction de distribution exprimée en fonction des multiplicateurs de Lagrange.

### 5.4.3 Domaine de réalisabilité et propriétés entropiques du schéma

**Proposition 6.** *Le domaine de réalisabilité est conservé au cours du temps par le problème semi-discretisé (5.4.17, 5.4.18, 5.4.19).*

Ensuite le théorème 5.4.2 montre que le système (5.4.20) possède une solution appartenant au domaine de réalisabilité discret  $\mathcal{A}_d$  et que le système (5.4.17, 5.4.18, 5.4.19) est entropique

**Théorème 5.4.2.**  *$(F_j^0, F_{j+1}^0, F_j^1, F_{j+1}^1)$  étant donné, il existe  $(F_{j+\frac{1}{2}}^0, F_{j+\frac{1}{2}}^1) \in \mathcal{A}_d$  tel que 5.4.20 soit satisfait.*

De plus, pour  $G$  défini par la formule (5.4.19),

$$E = \sum_j \frac{G_{j+\frac{1}{2}}^0 - G_{j-\frac{1}{2}}^0}{\Delta \zeta_j} \Delta \zeta_j \ln(\rho_j) - \sum_j \frac{G_{j+\frac{1}{2}}^1 - G_{j-\frac{1}{2}}^1}{\Delta \zeta_j} \Delta \zeta_j \alpha_j - \frac{2\alpha_{ei}}{\zeta_j^3} f_j^1 \quad (5.4.21)$$

est une entropie pour le système (5.4.17, 5.4.18, 5.4.19).

### 5.4.4 Résultats numériques

On illustre maintenant les propriétés de la méthode précédente sur une version totalement discrétisée de (5.4.17), la discrétisation en temps s'opérant par un schéma d'Euler explicite. Le scaling utilisé donne un pas de temps  $\Delta t$  de l'ordre des collisions électron-ion.

On considère pour le premier cas test, des conditions initiales anisotropes

$$\begin{cases} F^0(t=0, \zeta) = \exp(-(\zeta - 2)^2), \\ F^1(t=0, \zeta) = \frac{F^0(t=0, \zeta)}{3}. \end{cases}$$

Les résultats numériques montrent que la méthode conserve la masse, l'énergie et que l'entropie décroît comme démontré dans le Théorème 5.4.1. Les figures 5.2 (a) et 5.2 (b) montrent que le domaine de réalisabilité est conservé au cours de la simulation. De plus, la partie isotrope de  $F^0$  converge vers une Maxwellienne centrée. Ce fait s'explique par l'effet de l'opérateur de collision électron-électron tandis que la partie anisotrope  $F^1$  converge vers 0 du fait de l'effet de l'opérateur électron-ion. D'après la figure 5.2 (c), le schéma a rapidement convergé à partir de  $t = 80$ . La figure 5.2 (d) représente l'évolution de la fonction de distribution  $F$  avec  $\mu = 1$ , reconstruite à partir de sa partie isotrope  $F^0$  et de sa partie anisotrope  $F^1$ . La fonction distribution  $F$  converge vers une Maxwellienne centrée.

Afin de comparer le modèle  $M_1$  avec le modèle  $P_1$  ([106]), les conditions initiales  $F^1(t=0, \zeta) = F^0(t=0, \zeta)/2$  sont remplacées par  $F^1(t=0, \zeta) = F^0(t=0, \zeta)/3$ . Le modèle  $M_1$  montre toujours la convergence de la fonction de distribution vers l'état stationnaire tout en préservant le domaine de réalisabilité. Par contre, la figure (5.3) montre que le modèle  $P_1$  ne conserve pas le domaine de réalisabilité. En effet, au temps  $t = 0.15$   $F^0$  devient négative et  $F^1$  est supérieure à  $F^0$ .

Afin d'évaluer le temps de calcul du modèle  $M_1$ , on compare les résultats du modèle  $M_1$  avec ceux obtenus avec le code cinétique *KETS* ([89, 90]). Pour la simulation avec le modèle cinétique, chaque composante du domaine en vitesse est discrétisée avec 16 points. Le test numérique est réalisé avec  $v_{x,\max} = v_{y,\max} = v_{z,\max} = 8$ . Le modèle  $M_1$  tourne 305 s tandis que le temps CPU pour le code *KETS* est d'environ 8717 s. Ainsi, le code  $M_1$  est 28 fois plus rapide que *KETS*. Nous reviendrons ultérieurement sur les comparaisons avec ce code *KETS*.

La condition initiale est maintenant une fonction de distribution bi-Maxwellienne i.e. une somme de deux fonctions de distribution Maxwelliennes de densité  $n = 1 \text{ m}^{-3}$  et  $T = 1 \text{ KeV}$ . La première est centrée autour de  $\zeta_{d1} = 2$  et la seconde autour de  $\zeta_{d2} = 6$ . Ainsi la fonction bi-Maxwellienne s'écrit

$$\begin{cases} F^0(t=0, \zeta) = \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{3/2} \left( \exp\left(-\frac{(\zeta - \zeta_{d1})^2}{2}\right) + \exp\left(-\frac{(\zeta - \zeta_{d2})^2}{2}\right) \right), \\ F^1(t=0, \zeta) = \frac{F^0(t=0, \zeta)}{3}. \end{cases}$$

Pour ce cas test, le domaine en énergie est discrétisé avec 64 points pour  $\zeta_{\max} = 20$ . On choisit un pas de temps pour satisfaire la condition CFL et les résultats sont calculés à  $t = 100$ . Les conditions de bord pour le domaine en énergie satisfont les contraintes de positivité de  $F^0$  et la conservation de la masse, i.e. au bord gauche  $F_{-1}^0 = F_0^0$  et  $F_{-1}^1 = -F_0^1$ . Les résultats numériques montrent la conservation de la masse et de l'énergie et la décroissance de l'entropie. Les figures 5.4 (a) et 5.4 (b) confirment que le domaine de réalisabilité est préservé. De plus, la figure 5.4 (d) qui représente l'évolution de la fonction de distribution  $F$  avec  $\mu = 1$  montre que  $F$  converge vers une Maxwellienne centrée.

On présente maintenant un test numérique pour le modèle inhomogène en espace. Le transport des électrons est discrétisé par une méthode de volumes finis à partir de la méthode HLL ([114]). Le modèle totalement discrétisé s'écrit alors

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} \left( f_i^{0,N+1} - f_i^{0,N} \right) + \frac{1}{\Delta x} \left( \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^N - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^N \right) = Q_i^0, \\ \frac{1}{\Delta t} \left( f_i^{1,N+1} - f_i^{1,N} \right) + \frac{1}{\Delta x} \left( \mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}^N - \mathcal{G}_{i-\frac{1}{2}}^N \right) = Q_i^1, \end{cases}$$

où  $\mathcal{F}$ ,  $\mathcal{G}$  sont les flux HLL et les opérateurs  $Q_j^0$  et  $Q_j^1$  sont définis dans (5.5.26).

Le cas test consiste à étudier la convergence d'un faisceau d'électrons, de masse atomique  $Z = 10$ , dans le vide vers un état d'équilibre. La fonction de distribution initiale est nulle. Les conditions de bord sur le bord droit sont de type Dirichlet de telle sorte que le domaine de réalisabilité soit satisfait et que soit

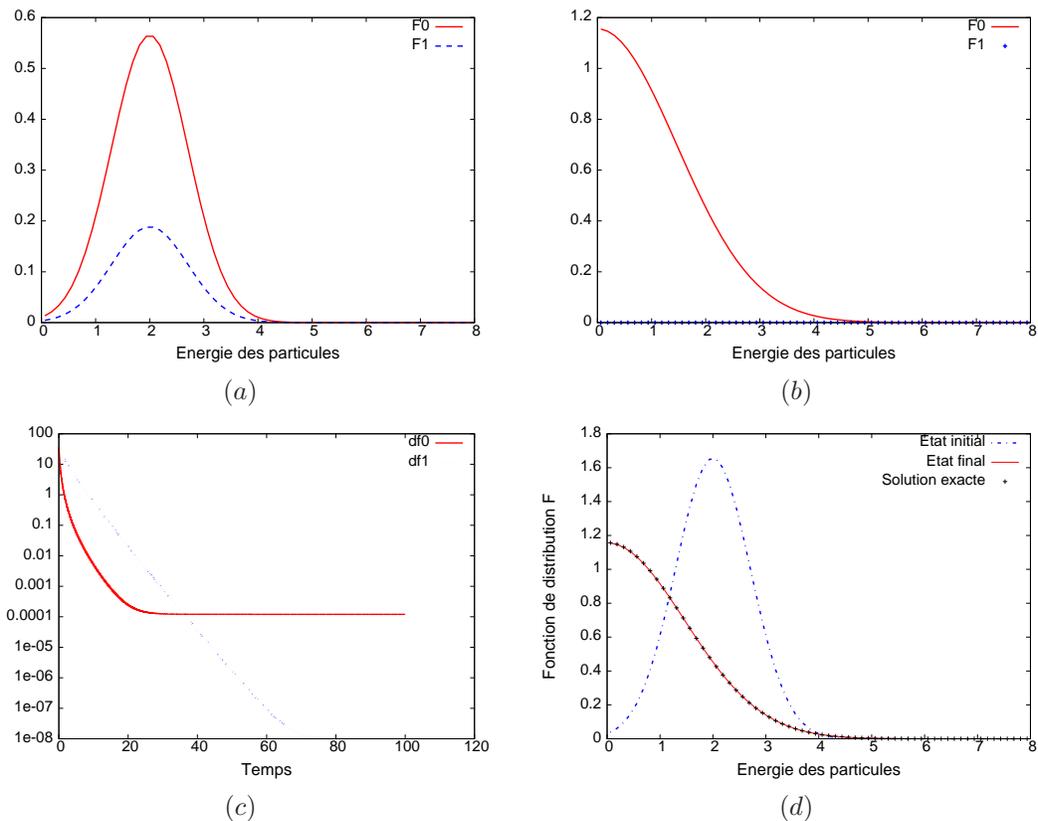


FIG. 5.2 – Moments  $F^0$  et  $F^1$  en fonction de l'énergie  $\zeta$  au temps initial (a) et au temps final (b), évolution de la convergence en échelle logarithmique i.e.  $df^0 = \sum_i |F_i^{0,N+1} - F_{i+1}^{0,N}|$  et  $df^1 = \sum_i |F_i^{1,N+1} - F_{i+1}^{1,N}|$  (c) et évolution de la fonction de distribution  $F$  en temps avec  $\mu = 1$  (d) lorsque  $\zeta_{\max} = 8$  avec 64 points pour les données anisotropes.

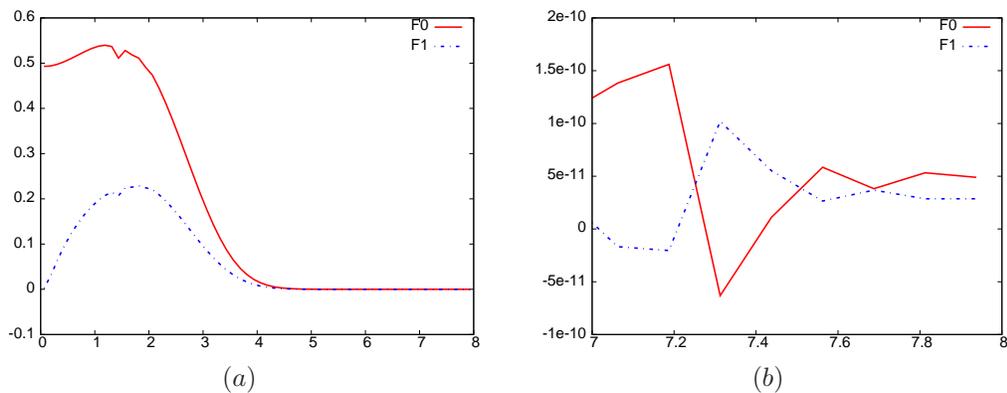


FIG. 5.3 – Moments  $F^0$  et  $F^1$  en fonction de l'énergie  $\zeta$  au temps  $t = 0.15$  avec  $\zeta \in [0 : 8]$  pour le modèle  $M_1$  (a) et avec  $\zeta \in [0 : 8]$  pour le modèle  $P_1$  (b).

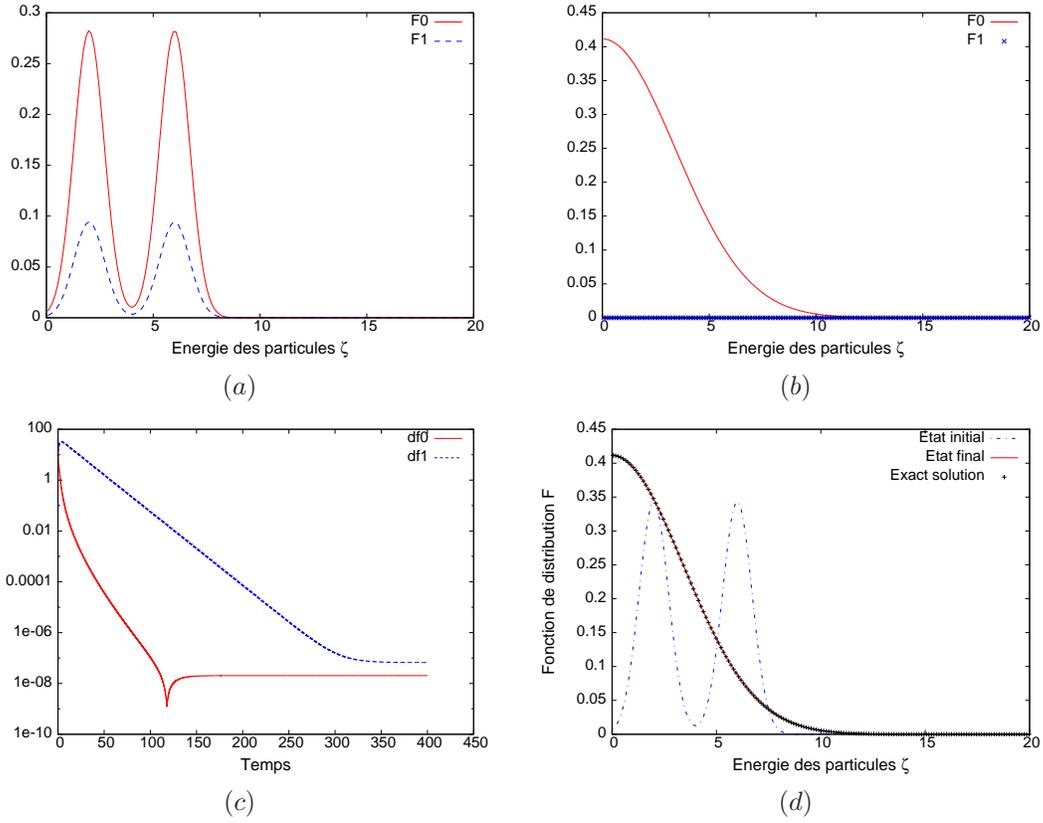


FIG. 5.4 – Moments  $F^0$  et  $F^1$  en fonction de l'énergie  $\zeta$  au temps initial (a) et au temps final (b), évolution de  $df0 = \sum_i |F_i^{0,N+1} - F_{i+1}^{0,N}|$  et  $df1 = \sum_i |F_i^{1,N+1} - F_{i+1}^{1,N}|$  (c) et de la fonction de distribution  $F$  avec  $\mu = 1$  (d) lorsque  $\zeta_{\max} = 8$  avec 64 points pour des données bi-Maxwelliennes.

créé un faisceau d'électrons

$$F_{-1}^0 = \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{(\zeta - \zeta_d)^2}{2}\right) \text{ et } F_{-1}^1 = \frac{f_{-1}^0}{3}.$$

Pour ce cas test, le domaine en énergie est discrétisé avec 64 points et le domaine en espace avec 100 points. Le test numérique est réalisé avec  $\zeta_{\max} = 8$  et  $x_{\max} = 5$ . Le scaling considéré donne des pas de temps de l'ordre du temps de collision électron-ion. On choisit un pas de temps vérifiant la condition CFL. Les résultats numériques sont calculés au temps  $t = 100$ .

Les figures 5.6 (a) – (f) montrent l'évolution du faisceau d'électrons. Après quelques itérations, au temps  $t = 0.015$ , le faisceau d'électrons se répand dans tout le domaine en espace (figures 5.6 (a) et 5.6 (b)). Alors au temps  $t = 0.15$ , les figures 5.6 (c) et 5.6 (d) montrent que la partie isotrope  $F^0$  commence à se relaxer vers une fonction Maxwellienne centrée autour de  $\zeta = 0$  tandis que la partie anisotrope  $F^1$  est proche de 0 à la fin du domaine en espace. En fin de simulation ( $t = 300$ ), la partie isotrope a convergé vers une fonction Maxwellienne locale centrée (figure 5.5). Cela s'explique par le fait que le faisceau d'électrons est toujours injecté au début du domaine en espace. La partie anisotrope,  $F^1$  est nulle sauf au début du domaine en espace (5.5) pour les mêmes raisons que pour la partie isotrope. Les résultats obtenus transcrivent la convergence de la fonction vers un état stationnaire et la conservation du domaine de réalisabilité.

On compare ensuite les résultats obtenus avec le modèle  $M_1$  avec ceux obtenus par le code *KETS* ([89, 90]). Ce code *KETS* est un code Fokker-Planck qui a été validé à partir du code IMPACT de Kingam et Bell ([123]). Pour la simulation avec le modèle cinétique, chaque composante du domaine est discrétisée avec 16 points et le domaine en espace est discrétisé avec 100 points. Les tests numériques sont réalisés avec  $v_{x,\max} = v_{y,\max} = v_{z,\max} = 8$  et  $x_{\max} = 5$ . La figure 5.7 représente la masse calculée pour le modèle  $M_1$  et le code *KETS* au temps  $t = 100$ . On observe que les deux masses obtenues avec les deux codes tendent vers des fonctions de distribution constantes à la fin du domaine de calcul. Cela s'explique par la convergence de la fonction de distribution vers une Maxwellienne centrée. De plus, on peut montrer que le modèle  $M_1$  crée une couche limite de longueur  $\frac{1}{3}$ . C'est pour cela que les résultats sont différents sur  $[0, \frac{1}{3}]$ . Cela s'explique par les conditions artificielles imposés sur la partie anisotrope lors de l'implémentation. Dans le domaine restant, les résultats sont proches. De plus il n'a pas été possible de tester le code *KETS* sur un maillage plus raffiné à cause du coût de calcul.

## 5.5 Généralisation à un nombre quelconque de moments

On généralise dans cette partie l'approche précédente à un nombre de moments quelconques. Pour cela, on introduit un nouveau formalisme qui conduira à une présentation plus concise des systèmes aux moments. A nouveau, afin de préserver le domaine de réalisabilité, on considère que la principale contribution de l'opérateur électron-électron provient de la partie isotrope de la fonction de distribution.

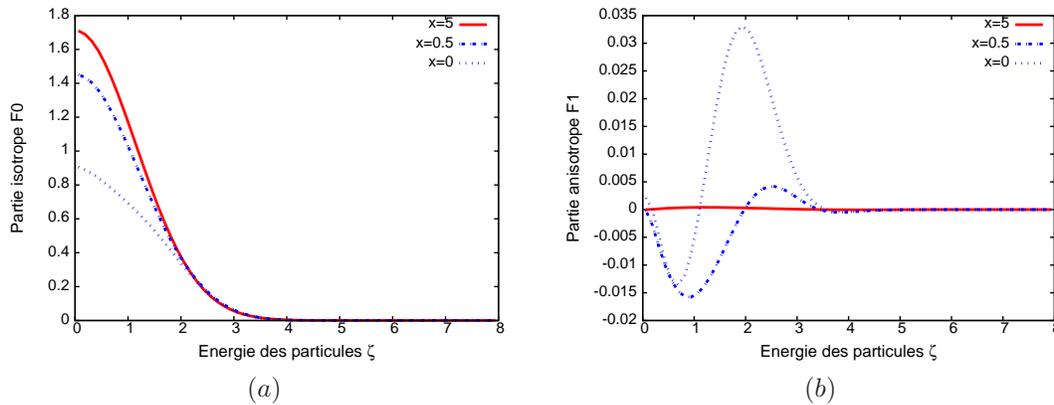


FIG. 5.5 – Moments  $F^0$  (a) et  $F^1$  (b) en fonction de l'énergie  $\zeta$  au temps  $t = 100$  pour  $x = 0$ ,  $x = 0.5$  et  $x = 5$  lorsque  $\zeta_{\max} = 8$  avec 64 points et  $x_{\max} = 5$  avec 100 points pour le faisceau d'électrons.

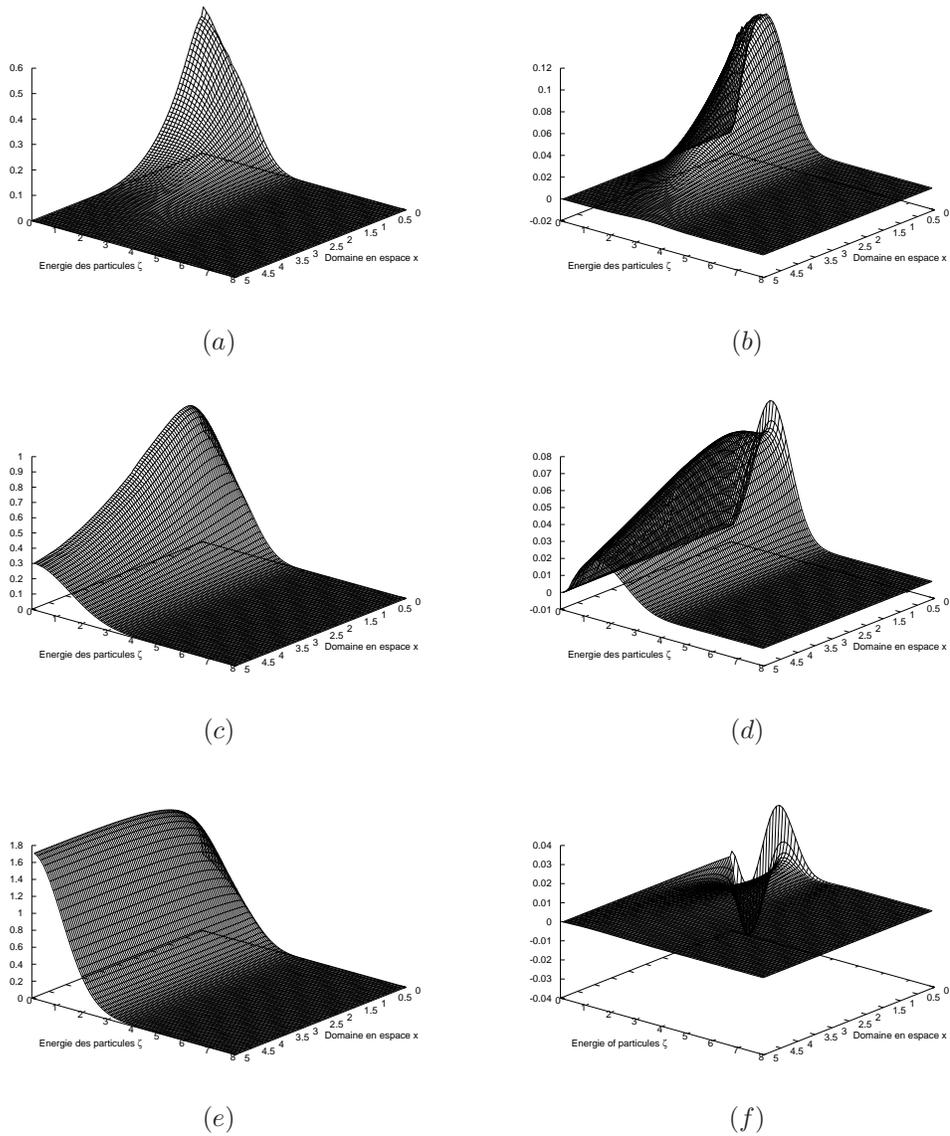


FIG. 5.6 – Moments  $F^0$  et  $F^1$  en fonction de l'énergie  $\zeta$  au temps  $t = 0.015$  (a) et (b), au temps  $t = 0.15$  (c) et (d) et au temps  $t = 100$  (e) et (f) lorsque  $\zeta_{\max} = 8$  avec 64 points et  $x_{\max} = 5$  avec 100 points pour le faisceau d'électrons.

Les opérateurs de collision sont alors donnés dans la définition suivante.

**Définition 5.5.8.** *Les opérateurs de collision électron-électron  $Q_{ee}(f)$  et électron-ion  $Q_{ei}(f)$  s'écrivent*

$$Q_{ee}(f) = \frac{1}{\zeta^2} \partial_\zeta \left( \zeta \int_0^\infty \tilde{J}(\zeta, \zeta') \left[ F^0(\zeta') \frac{1}{\zeta} \partial_\zeta f(\zeta) - f(\zeta) \frac{1}{\zeta'} \partial_{\zeta'} F^0(\zeta') \right] \zeta'^2 d\zeta' \right), \quad (5.5.22)$$

$$Q_{ei}(f) = \frac{\alpha_{ei}}{\zeta^3} \left[ \frac{\partial}{\partial \mu} \left( (1 - \mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} \right) \right], \quad (5.5.23)$$

où  $\tilde{J}(\zeta, \zeta')$  est donné par (5.3.13).

Ainsi l'équation (5.2.6) peut être approchée en coordonnées sphériques par

$$\partial_t f + \zeta \mu \partial_x f = Q(f), \quad Q(f) = Q_{ee}(f) + Q_{ei}(f), \quad (5.5.24)$$

où  $Q_{ee}, Q_{ei}$  sont définis par (5.5.22, 5.5.23).

On présente ensuite les propriétés fondamentales de ce nouvel opérateur.

**Propriété 5.5.2.** *L'opérateur  $Q(f)$  vérifie les propriétés de conservation de la masse, de l'énergie et dissipe l'entropie i.e.*

$$\left\langle \int_0^\infty \zeta^2 Q(f) \left( \frac{1}{\zeta^2} \right) d\zeta \right\rangle = 0 \quad \text{et} \quad \left\langle \int_0^\infty \zeta^2 Q(f) \log f d\zeta \right\rangle \leq 0.$$

Le domaine de réalisabilité est conservé par le problème continu (5.5.22, 5.5.23).

### 5.5.1 Equation cinétique semi-discrétisée

Dans cette partie on présente une discrétisation en énergie opérée sur l'équation cinétique 5.5.24. Contrairement à la section précédente, le système aux moments discrétisé s'obtiendra par prise aux moments du problème discrétisé que nous allons obtenir.

On considère la même discrétisation que pour la section précédente. Soit  $f_j$  définie par  $f_j = \exp(\overline{\alpha_j} \cdot \overline{\mu})$ , avec

$$\overline{\alpha_j} = \begin{pmatrix} \alpha_{0,j} \\ \vdots \\ \alpha_{n,j} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \alpha_{i,j} = \alpha_i(\zeta_j).$$

La forme discrète de (5.5.24) s'écrit

$$\partial_t f_j + \zeta_j \mu \partial_x f_j = Q_j, \quad Q_j = Q(f_j) = Q_{ee,j} + Q_{ei,j}. \quad (5.5.25)$$

On donne dans la définition suivante  $Q_{ee,j}$  et  $Q_{ei,j}$ .

**Définition 5.5.9.** *Les opérateurs de collision  $Q_{ee,j}$  et  $Q_{ei,j}$  ont pour expression*

$$\begin{cases} Q_{ee,j} = \frac{G_{j+\frac{1}{2}} - G_{j-\frac{1}{2}}}{\zeta_j^2 \Delta \zeta_j}, \\ Q_{ei,j} = \frac{\alpha_{ei}}{\zeta_j^3} \frac{\partial}{\partial \mu} \left( (1 - \mu^2) \frac{\partial f}{\partial \mu} \right) \end{cases} \quad (5.5.26)$$

avec

$$G_{j+\frac{1}{2}} = \zeta_{j+\frac{1}{2}} \sum_{k=0}^m \tilde{J}(\zeta_{j+\frac{1}{2}}, \zeta_{k+\frac{1}{2}}) \left[ F_{k+\frac{1}{2}}^0 \frac{1}{\zeta_{j+\frac{1}{2}}} \frac{f_{j+1} - f_j}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\zeta_{k+\frac{1}{2}}} f_{j+\frac{1}{2}} \frac{F_{k+1}^0 - F_k^0}{\Delta \zeta_{k+\frac{1}{2}}} \right] \zeta_{k+\frac{1}{2}}^2 \Delta \zeta_{k+\frac{1}{2}}, \quad (5.5.27)$$

où

$$\tilde{J}(\zeta_{j+\frac{1}{2}}, \zeta_{k+\frac{1}{2}}) = \frac{2\alpha_{ee}}{3} \inf \left( \frac{1}{\zeta_{j+\frac{1}{2}}^3}, \frac{1}{\zeta_{k+\frac{1}{2}}^3} \right) \zeta_{j+\frac{1}{2}}^2 \zeta_{k+\frac{1}{2}}^2, \quad (5.5.28)$$

et  $f_{j+\frac{1}{2}}$  est définie par la moyenne entropique suivante

$$\begin{cases} f_{j+\frac{1}{2}} = \frac{f_{j+1} - f_j}{\log f_{j+1} - \log f_j} & \text{si } f_{j+1} \neq f_j, \\ f_{j+\frac{1}{2}} = f_{j+1} & \text{sinon.} \end{cases} \quad (5.5.29)$$

On résume maintenant les propriétés de l'opérateur discrétisé dans la proposition 5.5.3.

**Propriété 5.5.3.**  $Q_j$  vérifie les propriétés fondamentales suivantes.

1) L'opérateur  $Q_j$  conserve la masse et l'énergie i.e.

$$\left\langle \sum_{j=0}^m \zeta_j^2 Q_j \left( \frac{1}{\zeta^2} \right) \Delta \zeta_j \right\rangle = 0.$$

2) En définissant  $f_{j+\frac{1}{2}}$  par la moyenne entropique (5.5.29), l'opérateur  $Q_j$  vérifie la propriété de dissipation de l'entropie

$$\left\langle \sum_{j=0}^m \zeta_j^2 Q_j \log f_j \Delta \zeta_j \right\rangle \leq 0.$$

3) Le domaine de réalisabilité est conservé au cours du temps par le problème semi-discrétisé (5.5.25, 5.5.26, 5.5.27).

### 5.5.2 Modèle aux moments continu

Par prise aux moments de (5.5.24), on obtient pour  $i \in \{0, N\}$ ,

$$\partial_t f^i + \zeta \partial_x f^{i+1} = Q^i, \quad Q^i = Q_{ee}^i + Q_{ei}^i. \quad (5.5.30)$$

Les expressions de  $Q_{ee}^i$  et  $Q_{ei}^i$  sont alors données dans la propriété suivante

**Propriété 5.5.4.** Les moments de  $Q_{ee}$  et de  $Q_{ei}$  s'écrivent

$$\begin{aligned} Q_{ee}^i &= \frac{1}{\zeta^2} \partial_\zeta \left( \zeta \int_0^\infty \tilde{J}(\zeta, \zeta') \left[ F^0(\zeta') \frac{1}{\zeta} \partial_\zeta f^i(\zeta) - f^i(\zeta) \frac{1}{\zeta'} \partial_{\zeta'} F^0(\zeta') \right] \zeta'^2 d\zeta' \right), \\ Q_{ei}^i &= \alpha_{ei} \frac{i}{\zeta^3} ((i-1)f^{i-2} - (i+1)f^i). \end{aligned}$$

En posant

$$\bar{f} = \begin{pmatrix} f^0 \\ \vdots \\ f^N \end{pmatrix}, \quad \tilde{f} = \begin{pmatrix} f^1 \\ \vdots \\ f^{N+1} \end{pmatrix} \text{ et } \bar{Q} = \begin{pmatrix} Q^0 \\ \vdots \\ Q^N \end{pmatrix}, \quad (5.5.31)$$

on obtient le système

$$\partial_t \bar{f} + \zeta \partial_x \tilde{f} = \bar{Q}, \quad (5.5.32)$$

dont on démontre qu'il est entropique.

**Théorème 5.5.1.**  $E = \langle f \ln f - f \rangle \zeta^2$  est une entropie pour le système (5.5.31, 5.5.32). Plus précisément, on a  $\partial_t E + \nabla \cdot F \leq 0$ , où  $F = \zeta \langle (f \ln f - f) \mu \rangle \zeta^2$  est le flux d'entropie.

### 5.5.3 Modèle à $N$ moments pour l'équation semi-discrétisée

Nous établissons maintenant le système aux moments semi-discrétisé par prise aux moments angulaire de 5.5.25.

Les moments  $f_j$  s'écrivent  $f_j^i = \zeta^2 \langle \mu^i f_j(\alpha) \rangle$ ,  $i \in \{0, N\}$ ,  $j \in \{1, m\}$ . Ainsi les moments de  $f_j$  vérifient pour tout  $i \in \{0, \dots, N\}$

$$\partial_t f_j^i + \zeta_j \partial_x f_j^{i+1} = Q_j^i, \quad f_j^i = \langle f_j \mu^i \rangle \zeta_j^2, \quad Q_j^i = \langle Q_j \mu^i \rangle \zeta_j^2.$$

Afin de résoudre ce problème, on introduit le domaine de réalisabilité discret  $\mathcal{A}_d$

$$\mathcal{A}_d = \left\{ \overline{f}_j = \begin{pmatrix} f_j^0 \\ \vdots \\ f_j^N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N / \exists f_j : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}^+ \text{ et } f_j^i = \zeta^2 \langle \mu^i f_j(\alpha) \rangle, i \in \{0, N\}, j \in \{1, m\} \right\}. \quad (5.5.33)$$

Par prise aux moments sur l'équation (5.5.25), on obtient le système à  $N$ -moments discrétisé suivant

$$\partial_t \overline{f}_j + \zeta_j \partial_x \tilde{f}_j = \overline{Q}_j, \quad (5.5.34)$$

où

$$\overline{f}_j = \begin{pmatrix} f_j^0 \\ \vdots \\ f_j^N \end{pmatrix}, \quad \tilde{f}_j = \begin{pmatrix} f_j^1 \\ \vdots \\ f_j^{N+1} \end{pmatrix}, \quad \overline{Q}_j = \begin{pmatrix} Q_j^0 \\ \vdots \\ Q_j^N \end{pmatrix} = \langle \overline{\mu} Q_j \rangle.$$

**Définition 5.5.10.** Les opérateurs de collision  $Q_{ee,j}^i$  et  $Q_{ei,j}^i$  ont pour expression

$$\begin{cases} Q_{ee,j}^i = \frac{G_{j+\frac{1}{2}}^i - G_{j-\frac{1}{2}}^i}{\zeta_j^2 \Delta \zeta_j}, \\ Q_{ei,j}^i = \alpha_{ei} \frac{i}{\zeta_j^3} ((i-1)f_j^{i-2} - (i+1)f_j^i), \end{cases} \quad (5.5.35)$$

où

$$G_{j+\frac{1}{2}}^i = \zeta_{j+\frac{1}{2}} \sum_{k=0}^m \tilde{J}(\zeta_{j+\frac{1}{2}}, \zeta_{k+\frac{1}{2}}) \left[ F_{k+\frac{1}{2}}^0 \frac{1}{\zeta_{j+\frac{1}{2}}} \frac{f_{j+1}^i - f_j^i}{\Delta \zeta_{j+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\zeta_{k+\frac{1}{2}}} F_{j+\frac{1}{2}}^i \frac{F_{k+1}^0 - F_k^0}{\Delta \zeta_{k+\frac{1}{2}}} \right] \zeta_{k+\frac{1}{2}}^2 \Delta \zeta_{k+\frac{1}{2}}, \quad (5.5.36)$$

$\tilde{J}(\zeta_{j+\frac{1}{2}}, \zeta_{k+\frac{1}{2}})$  est donné par (5.5.28) et

$$F_{j+\frac{1}{2}}^i = \int_0^1 f_{j+\frac{1}{2}} \mu^i d\mu. \quad (5.5.37)$$

On peut alors montrer que les approches données dans (5.5.37) et ([134]) sont équivalentes. De même que précédemment, on obtient que le schéma est entropique.

**Théorème 5.5.2.**  $E = \sum_{j=0}^m \langle f_j \ln f_j - f_j \rangle \zeta_j^2$  est une entropie pour le système (5.5.34). Plus précisément,

on a  $\partial_t E + \nabla \cdot F \leq 0$ , où  $F = \sum_{j=0}^m \zeta_j \langle (f_j \ln f_j - f_j) \mu \rangle \zeta_j^2$  est le flux entropique.

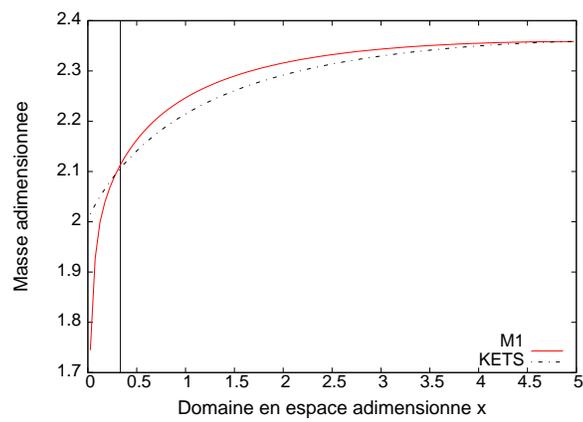


FIG. 5.7 – Masse  $\rho$  au temps final obtenue avec le modèle  $M_1$  et le code *KETS* lorsque  $\zeta_{\max} = 8$  avec 64 points et  $x_{\max} = 5$  avec 100 points pour le faisceau d'électrons.



## Chapitre 6

# Méthodes numériques basées sur des grilles locales en vitesse

Le but de ce travail, qui est en finalisation, est de déterminer une nouvelle méthode numérique déterministe pour les équations cinétiques ([41]). Pour discrétiser l'équation de Boltzmann, nous pouvons distinguer deux méthodes principales : les méthodes déterministes et les méthodes stochastiques. Les premières présentent l'avantage d'être dépourvues de bruit statistique. Cependant, elles sont en général plus gourmandes en ressources. Afin de réduire ce coût, nous présentons une nouvelle méthode déterministe qui soit adaptative sur la variable de vitesse microscopique via l'usage de grilles locales. En particulier, le but est d'obtenir une méthode numérique capable de gérer les forts gradients de températures comme par exemple pour les corps de rentrée là où les méthodes classiques ([143], [138]) sont inefficaces.

On développe et on illustre la méthode sur un modèle BGK mono-dimensionnel en vitesse et en espace. Ce concept pourra se généraliser au modèle de Boltzmann tridimensionnel en vitesse sans difficultés conceptuelles. J'ai inséré ce travail dans cette partie car du point de vue applicatif, cette méthode sera en pratique utilisée sur des modèles BGK comme ceux utilisés dans les codes du CESTA par exemple.

### 6.1 Un modèle cinétique 1D et sa discrétisation en vitesse standard

On considère un gaz décrit par un modèle monodimensionnel en espace représenté par sa fonction de distribution  $f(t, x, v)$  qui au temps  $t$  possède la position  $x$  et la vitesse  $v$ . Les quantités macroscopiques peuvent être obtenues par  $U(t, x) = \langle mf(t, x, \cdot) \rangle$ , où  $m(v) = (1, v, \frac{1}{2}|v|^2)$  et  $\langle \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \phi(v) dv$  pour toute fonction dépendant de la vitesse. Ce vecteur peut être écrit  $U = (\rho, \rho u, E)$ , où  $\rho$ ,  $\rho u$ , et  $E$  sont la masse, la quantité de mouvement, et l'énergie. La température  $T$  du gaz est définie par la relation  $E = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{1}{2}\rho RT$ , où  $R$  est la constante des gaz parfaits.

L'évolution du gaz est décrite par le modèle BGK

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\tau} (M(U) - f), \quad (6.1.1)$$

où  $M(U)$  est la Maxwellienne locale définie par les quantités macroscopiques  $U$  de  $f$  par

$$M(\rho, U, T) = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi RT}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2RT}\right), \quad (6.1.2)$$

et  $\tau = CT^\omega / \rho$  est le temps de relaxation. Les constantes  $\omega$  et  $C$  seront précisées dans chaque cas test. A partir de cette équation, on établit les lois de conservation décrivant l'évolution du vecteur  $U$  :

$$\partial_t U + \partial_x \langle mf \rangle = 0. \quad (6.1.3)$$

Pour l'approximation numérique de l'équation (6.1.1), on utilise une méthode à répartition discrète des vitesses. Elle consiste à choisir une grille  $\mathcal{V}$  de  $\mathbb{K}$  points  $v_k$  et ensuite à remplacer l'équation cinétique (6.1.1) par un ensemble de  $\mathbb{K}$  équations

$$\partial_t f_k + v_k \partial_x f_k = \frac{1}{\tau} (M_k(U) - f_k) \quad (6.1.4)$$

où  $f_k(t, x) \approx f(t, x, v_k)$  et  $M_k(U) \approx M(U)(v_k)$ . Afin de décrire correctement la solution, la grille discrète en vitesse  $\mathcal{V}$  doit capturer toutes les fonctions de distribution pour tout temps et toute position. Cela signifie que  $\mathcal{V}$  doit être suffisamment grande pour capturer les distributions avec une grande vitesse moyenne ou une grande température, et suffisamment fine pour capturer les distributions avec petite température.

Une telle grille peut être construite comme suit. On suppose qu'une fonction de distribution de vitesse et de température  $u$  et  $T$  peut être bien décrite si on se restreint à l'intervalle  $[u - 4\sqrt{RT}, u + 4\sqrt{RT}]$ . Cela est raisonnable, car dans la plupart des problèmes physiques, les distributions sont localisées et sont concentrées dans un intervalle qui n'est pas très loin de l'intervalle correspondant à la Maxwellienne locale. Ainsi, une première contrainte est donnée par les bornes  $v_{min}$  et  $v_{max}$  vérifiant

$$v_{min} \leq \min_{t,x} (u(t, x) - 4\sqrt{RT(t, x)}), \quad v_{max} \geq \max_{t,x} (u(t, x) + 4\sqrt{RT(t, x)}). \quad (6.1.5)$$

Le pas de la grille doit être choisi afin qu'il y ait suffisamment de points pour chaque distribution de telle sorte que

$$\Delta v \leq \min_{t,x} \sqrt{RT(t, x)}. \quad (6.1.6)$$

Cette approche exige d'estimer d'abord des bornes sur les champs macroscopiques qui soient globaux en temps et en espace.

Notons que les points de  $\mathcal{V}$  ne sont pas nécessairement uniformément répartis puisque la grille doit être raffinée si nécessaire et choisie plus grossière ailleurs comme celle proposée dans [12] pour un cas stationnaire. Cependant, la situation est plus complexe pour les problèmes instationnaires. En effet, les estimations des bornes correctes et du pas de la grille ne sont pas nécessairement disponibles pour tous les problèmes. La vitesse et la température peuvent atteindre des valeurs plus importantes qu'attendu, comme par exemple dans le cas de chocs. De plus, la grille de calcul peut également être grande et dense ce qui conduit à des coûts de calcul très importants. Ainsi, il est alors pertinent d'utiliser des discrétisations *locales* en vitesse de la fonction de distribution (*local discrete velocity grid* (LDV)) pour tout temps et position. Ainsi on va approcher  $f(t, x, \cdot)$  avec une grille différente pour chaque  $t$  et  $x$  afin d'éviter les problèmes précités.

## 6.2 Une nouvelle approche par grille locale en vitesse

### 6.2.1 La méthode

On suppose qu'au temps  $t_n$ , la fonction de distribution était approchée dans chaque  $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}]$  sur un ensemble  $\mathcal{V}_i^n$  de  $\mathbb{K}$  vitesses locales discrètes pour  $i \in \{0 : imax+1\}$ . Par souci de simplicité, on suppose que toutes les grilles locales possèdent le même nombre de points  $\mathbb{K}$  equirépartis. Le premier point est noté  $v_{min,i}^n$  et le dernier est noté  $v_{max,i}^n$ . Ainsi,

$$\mathcal{V}_i^n = \{v_{i,k}^n = v_{min,i}^n + k\Delta v_i^n, \quad k = 1 : \mathbb{K}\}, \quad \text{où} \quad \Delta v_i^n = \frac{v_{max,i}^n - v_{min,i}^n}{\mathbb{K}}.$$

Sur cette grille locale,  $f(t_n, x_i, \cdot)$  est approchée par  $\mathbb{K}$  valeurs stockées dans le vecteur  $f_i^n = (f_{i,k}^n)_{k=1}^{\mathbb{K}}$ . Chaque valeur discrète  $f_{i,k}^n$  est une approximation de  $f(t_n, x_i, v_{i,k}^n)$ .

Les quantités macroscopiques correspondantes  $U(t_n, x_i)$  sont approchées par  $U_i^n$  avec la formule de quadrature suivante

$$U_i^n = \langle m f_i^n \rangle_{\mathcal{V}_i^n} = \sum_{k=1}^{\mathbb{K}} m(v_{i,k}^n) f_{i,k}^n \omega_k, \quad (6.2.7)$$

où les  $\omega_k$  sont les poids de la quadrature.

Lorsqu'on veut calculer une approximation de  $f$  au temps  $t_{n+1}$ , deux problèmes se posent. Premièrement, comment déterminer la grille locale en vitesse  $\mathcal{V}_i^{n+1}$ ? Ensuite, comment échanger les informations entre deux mailles en espace, puisque les grilles locales sont différentes? C'est pour cela qu'on utilisera une procédure d'interpolation. Dans les lignes qui suivent, on décrit notre algorithme.

Etape 1 : Quantités macroscopiques à  $t_{n+1}$ .

On approche la relation de conservation (6.1.3) avec le schéma upwind du premier ordre

$$U_i^{n+1,*} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left( \Phi_{i+\frac{1}{2}}^n - \Phi_{i-\frac{1}{2}}^n \right), \quad (6.2.8)$$

où les flux numériques sont définis par

$$\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n = \langle v^+ m f_i^n \rangle_{\mathcal{V}_i^n} + \langle v^- m f_{i+1}^n \rangle_{\mathcal{V}_{i+1}^n}, \quad (6.2.9)$$

où on a utilisé la notation standard  $v^\pm = (v \pm |v|)/2$ . Notons que chaque demi flux est évalué sur la grille locale vitesse de la distribution correspondante. Le vecteur  $U_i^{n+1,*}$  est une approximation de  $U(t_{n+1}, x_i)$ , et on note  $u_i^{n+1,*}$  et  $T_i^{n+1,*}$  les vitesses et les températures correspondantes.

Etape 2 : Grille en vitesse discrète  $\mathcal{V}_i^{n+1}$ .

On définit cette grille en utilisant la nouvelle vitesse et la nouvelle température  $u_i^{n+1,*}$  et  $T_i^{n+1,*}$  afin d'obtenir les bornes

$$v_{min,i}^{n+1} = u_i^{n+1,*} - 4\sqrt{RT_i^{n+1,*}} \quad \text{et} \quad v_{max,i}^{n+1} = u_i^{n+1,*} + 4\sqrt{RT_i^{n+1,*}}. \quad (6.2.10)$$

Ainsi la nouvelle grille  $\mathcal{V}_i^{n+1}$  est définie comme pour le pas de temps précédent, i.e.  $\mathcal{V}_i^{n+1} = \{v_{i,k}^{n+1} = v_{min,i}^{n+1} + k\Delta v_i^{n+1}, \quad k = 1 : \mathbb{K}\}$ , avec  $\Delta v_i^{n+1} = (v_{max,i}^{n+1} - v_{min,i}^{n+1})/\mathbb{K}$ .

Etape 3 : Fonction de distribution au temps  $t_{n+1}$ .

L'équation (6.1.1) est approchée par un schéma upwind du 1<sup>er</sup> ordre, avec un terme de relaxation implicite. Si la variable de vitesse n'est pas discrétisée, on obtient pour tout  $v$  :

$$\begin{aligned} f_i^{n+1}(v) &= f_i^n(v) - \frac{\Delta t}{\Delta x} v^+ (f_i^n(v) - f_{i-1}^n(v)) - \frac{\Delta t}{\Delta x} v^- (f_{i+1}^n(v) - f_i^n(v)) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\tau_i^{n+1}} (M(U_i^{n+1})(v) - f_i^{n+1}(v)). \end{aligned}$$

Si maintenant on prend en compte que chaque distribution  $f_i^{n+1}$ ,  $f_i^n$ ,  $f_{i-1}^n$ , et  $f_{i+1}^n$  est définie sur sa propre grille locale en vitesse, ce schéma doit être modifié en utilisant une procédure d'interpolation. On définit ensuite les valeurs discrètes de  $f_i^{n+1}$  sur sa grille  $\mathcal{V}_i^{n+1}$  par

$$\begin{aligned} f_{i,k}^{n+1} &= \bar{f}_i^n(v_{i,k}^{n+1}) - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_{i,k}^{n+1+} (\bar{f}_i^n(v_{i,k}^{n+1}) - \bar{f}_{i-1}^n(v_{i,k}^{n+1})) - \frac{\Delta t}{\Delta x} v_{i,k}^{n+1-} (\bar{f}_{i+1}^n(v_{i,k}^{n+1}) - \bar{f}_i^n(v_{i,k}^{n+1})) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\tau_i^{n+1}} (M_k(U_i^{n+1}) - f_{i,k}^{n+1}), \end{aligned} \quad (6.2.11)$$

pour  $k = 1 \in \{1; \mathbb{K}\}$ . Dans cette relation, les distributions  $f_i^n$ ,  $f_{i-1}^n$ , et  $f_{i+1}^n$  sont utilisées pour reconstruire des fonctions continues par morceaux en vitesse  $\bar{f}_i^n$ ,  $\bar{f}_{i-1}^n$ , et  $\bar{f}_{i+1}^n$  définies selon :

$$\bar{f}_i^n(v) = \begin{cases} p_i^n(v) & \text{si } v_{min,i}^n \leq v \leq v_{max,i}^n \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (6.2.12)$$

où  $p_i^n$  est une fonction continue par morceaux en  $v$  construite à partir des valeurs  $(v_{i,k}^n, f_{i,k}^n)_{k=1}^{\mathbb{K}}$ , comme interpolée polynômiale par morceaux.

Etape 4 : Quantités macroscopiques corrigées.

On calcule les moments de  $f_i^{n+1}$  par une formule de quadrature (6.2.7) selon

$$U_i^{n+1} = \langle m f_i^{n+1} \rangle_{\mathcal{V}_i^{n+1}} = \sum_{k=1}^{\mathbb{K}} m(v_{i,k}^{n+1}) f_{i,k}^{n+1} \omega_k. \quad (6.2.13)$$

Notons que  $U_i^{n+1}$  est une approximation de  $U(t_n, x_i)$ , comme le vecteur  $U_i^{n+1,*}$  calculé à l'étape 1. Cette étape pourrait être évitée en posant  $U_i^{n+1} = U_i^{n+1,*}$ . Cependant, elle est requise pour assurer la positivité du schéma, comme énoncé ci-dessus.

**Propriété 6.2.5.** *Supposons que pour tout  $i$ ,  $f_i^n \geq 0$  en chaque point de sa grille locale en vitesse et la fonction reconstruite par morceaux  $\bar{f}_i^n \geq 0$  pour tout  $v$ . Finalement, on suppose que  $T_i^{n+1,*} \geq 0$  pour tout  $i$ . Alors sous la condition CFL  $\Delta t \leq \Delta x / \max_{i,k}(|v_{i,k}^{n+1}|)$ ,  $f_{i,k}^{n+1}$  est également positive en chaque point de sa grille locale en vitesse, pour toute maille en espace.*

Cette température doit être positive, puisqu'elle est utilisée pour définir la grille locale en vitesse  $\mathcal{V}_i^{n+1}$  à l'étape 2. Cependant, il semble difficile de montrer que cette propriété est vraie pour le schéma présenté ci-dessus. On veut donc montrer qu'une simple modification du schéma est suffisante pour assurer la positivité de cette température. En effet, on propose de remplacer les flux numériques par des formules de quadrature utilisées pour calculer le vecteur macroscopique  $U_i^n$  et le flux numérique  $\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n$  (cf (6.2.7) et (6.2.9)) par l'intégrale exacte des fonctions correspondantes reconstruites, i.e. :  $U_i^n = \langle m \bar{f}_i^n \rangle$ ,  $\Phi_{i+\frac{1}{2}}^n = \langle v^+ m \bar{f}_i^n \rangle + \langle v^- m \bar{f}_{i+1}^n \rangle$ . Si la procédure de reconstruction utilise une interpolation polynômiale, ces intégrales sont juste des demi-intégrales de fonctions polynômiales par morceaux et peuvent être évaluées explicitement. Avec cette définition, on réécrit les lois de conservation discrètes (6.2.8) comme

$$U_i^{n+1,*} = \left\langle m \left( \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |v|\right) \bar{f}_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} v^+ \bar{f}_{i-1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} v^- \bar{f}_{i+1}^n \right) \right\rangle = \langle m \phi \rangle$$

où  $\phi$  est une fonction de  $v$  continue par morceaux. On a alors la propriété suivante.

**Propriété 6.2.6.** *Sous la condition CFL  $\Delta t \leq \Delta x / \max_{i,k}(|v_{i,k}^n|)$ , la fonction  $\phi$  est strictement positive, et ainsi  $T_i^{n+1,*} \geq 0$ .*

**Remarque 6.** *On note que cette condition CFL pour la positivité de  $T_i^{n+1,*}$  fait dépendre  $\Delta t$  des  $v_{i,k}^n$ , tandis que la condition CFL pour la stricte positivité de  $f_i^{n+1}$  (cf propriété 6.2.5) fait dépendre  $\Delta t$  de  $v_{i,k}^{n+1}$ . Cela signifie que notre schéma modifié requiert deux pas de temps : un premier pour calculer  $U_i^{n+1,*}$ , et un autre pour calculer  $f_i^{n+1}$ .*

## 6.2.2 Etape d'interpolation

Dans un régime fluide,  $f$  est proche d'une Maxwellienne et régulière. Une interpolation classique de type Lagrange fonctionne. En revanche, dans un régime très raréfié,  $f$  possède des discontinuités et la procédure d'interpolation de type Lagrange génère des oscillations. Pour effectuer une montée en ordre pour l'étape d'interpolation, on utilise alors une méthode ENO afin de minimiser les coefficients du polynôme d'interpolation. Ainsi si  $v_{i,k}^{n+1} \notin \mathcal{V}_i^n$ , on pose  $\bar{f}_i^n(v_{i,k}^{n+1}) = 0$  et si  $v_{i,k}^{n+1} \in \mathcal{V}_i^n$ , on détermine l'intervalle  $[v_{i,k}^n, v_{i,k+1}^n]$  de  $\mathcal{V}_i^n$  t.q.  $v_{i,k}^{n+1} \in [v_{i,k}^n, v_{i,k+1}^n]$ . Ensuite en partant de cet intervalle,  $\bar{f}_i^n(v_{i,k}^{n+1})$  est remplacé par le polynôme d'interpolation calculé sur les points de la grille par une méthode ENO. Le même procédé est appliqué pour calculer  $\bar{f}_{i+1}^n(v_{i,k}^{n+1})$  et  $\bar{f}_{i-1}^n(v_{i,k}^{n+1})$ .

## 6.2.3 Grille locale en vitesse non symétrique

Jusqu'à présent, les grilles construites sont à pas constant et possèdent toutes le même nombre de point. Mais, notre approche se généralise aisément à des grilles comportant un nombre de point variable et répartis non uniformément. Cela est important en particulier quand  $f$  est dissymétrique car la grille locale définie précédemment, qui est symétrique, peut être inadaptée ( $Kn \ll 1$ ).

Pour corriger ce défaut, on effectue un splitting entre l'étape du transport et celle de la relaxation. A la fin de l'étape de relaxation, on teste les valeurs prises par la fonction de distribution aux extrémités de chaque grille en vitesse. Si cette erreur est trop importante, on rajoute alors successivement des points jusqu'à ce que cet écart relatif soit suffisamment faible.

## 6.3 Résultats numériques

On compare maintenant notre méthode LDV avec la méthode DVM standard construite à partir d'une grille globale afin d'illustrer les principales propriétés de la méthode LDV. Trois cas tests sont alors présentés. On considère dans un premier temps, un test de Sod en régime fluide, raréfié et en transport libre. Le second test numérique est consacré au problème du "Two interacting blast waves" ([58]) où les forts gradients en températures rendent la méthode DVM standard inopérante. Le dernier problème étudié concerne le problème de transfert de chaleur. Pour les différents tests, on prend pour constante de Boltzmann  $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$  et pour masse moléculaire  $m = 66.3 \cdot 10^{-27}$ . Ainsi, sauf pour le régime du transport libre où  $R = 1$ , on prendra  $R = k_B/m \approx 208.1$ .

### 6.3.1 Cas test de Sod

On considère un test de Sod dans les trois principaux régimes : le régime cinétique, le régime fluide et le transport libre.

On commence par le régime cinétique avec le modèle BGK calculé pour  $\omega = -0.19$  et  $c = 1.08 \cdot 10^{-9}$  dans l'expression de  $\tau$ . Le domaine en espace  $[0, 0.6]$  est discrétisé avec 300 points. Afin de comparer la méthode DVM classique et la méthode LDV, on effectue un double test de convergence : selon la taille de la grille mais aussi selon la largeur de la grille. On prend comme référence la méthode DVM avec grille globale en vitesse élargie et très raffinée de telle sorte que l'approximation ait convergé. On choisit plus précisément une grille en vitesse de 600 points telle que

$$v_{min} = \min_{t,x} (u(t,x) - 6\sqrt{RT(t,x)}), \quad v_{max} = \max_{t,x} (u(t,x) + 6\sqrt{RT(t,x)}).$$

On compare alors les résultats obtenus par les méthodes DVM et LDV lorsque le résultat a convergé. Pour la méthode LDV on prendra une grille de 30 points tandis que la grille de la méthode DVM sera de 200 points.

La condition initiale est la distribution Maxwellienne locale dont les quantités macroscopiques sont données par :

$$\begin{aligned} T(x) &= 0.00480208, \quad \rho(x) = 0.0001, \quad u(x) = 0 \text{ si } x \in [0, 0.3] \\ T(x) &= 0.00384167, \quad \rho(x) = 0.0000125, \quad u(x) = 0 \text{ si } x \in ]0.3, 0.6]. \end{aligned} \tag{6.3.14}$$

Les résultats numériques obtenus dans (6.1(a), 6.1(c), 6.2(f)) montrent de meilleurs résultats pour la méthode LDV que pour la méthode DVM malgré une grille nettement plus grossière. En effet, la grille globale est calculée à partir des données macroscopiques initiales qui peuvent être très différentes à l'instant considéré.

On considère maintenant le même cas test que le précédent mais en régime fluide qui revient à considérer (6.1.1) pour le cas limite  $\tau = 0$ . La comparaison LDV/DVM s'effectue sur le schéma cinétique qui consiste à prendre à chaque pas de temps la Maxwellienne locale calculée à partir des lois de conservation. Dans ce cas, la grille globale optimale comporte 100 points. On compare alors la méthode DVM classique qui dans ce cas est convergée à 100 points avec la méthode LDV qui est convergée à 10 points. Les résultats obtenus avec la méthode LDV sont à nouveau meilleurs que leurs analogues obtenus par la méthode DVM.

On souhaite tester maintenant la méthode LDV pour le transport libre qui revient à considérer (6.1.1) pour le cas limite  $\tau = +\infty$ . Pour ce test numérique, le domaine en espace est  $[-1, 1]$ . La distribution initiale est la Maxwellienne locale paramétrée par

$$\begin{aligned} \rho &= 1, \quad u = 0, \quad p = 1, \quad T = p/\rho, \quad \text{sur } [-1, 0], \\ \rho &= 0.125, \quad u = 0, \quad p = 0.1, \quad T = p/\rho \text{ sur } [0, 1]. \end{aligned} \tag{6.3.15}$$

Pour ce cas test, on a à notre disposition une solution analytique du problème qui servira de solution de référence. En premier lieu, la discontinuité en espace des conditions initiales 6.3.15 va se transmettre sur la variable de vitesse. Dans le cas présent on remarque que la méthode DVM standard crée des plateaux sur la solution approchée lorsque celle-ci comporte peu de points comme observé sur la figure 6.2. Les résultats pour la méthode LDV donnent des oscillations dues à la discontinuité. Afin de supprimer ces phénomènes d'oscillation, on effectue une montée en ordre au niveau de l'étape d'interpolation. Pour gérer la singularité, on utilise une méthode ENO à 3 points puis à 4 points. On constate alors une amélioration sensible des résultats par rapport à la solution analytique.

En conclusion, la méthode LDV s'avère performante en régime cinétique et en régime fluide, la méthode DVM standard ne fournit pas les bornes correctes pour la grilles tandis que la méthode LDV est basée sur une grille dynamique qui s'adapte automatiquement. Par ailleurs, les coût de calcul sont moindres. Par contre en régime du transport libre, même si les phénomènes de plateaux sont supprimés, les interpolations utilisées pour la mise en oeuvre de la méthode LDV génèrent des oscillations. Les résultats actuels ne sont pas complètement satisfaisants car même si les oscillations peuvent être atténuées par les méthodes ENO, il n'y a pas de gain véritable comparé à la méthode DVM standard. Une des solution envisagées est d'utiliser une méthode qui puisse raffiner la grille autour des discontinuités comme par exemple les méthodes AMR.

### 6.3.2 “Two interacting blast waves”

On illustre maintenant la méthode DVM pour le modèle BGK avec  $\omega = -0.19$  et  $c = 1.08 \cdot 10^{-9}$  dans l'expression de  $\tau$  sur le cas test intitulé “two interacting blast waves” implémenté dans [58] pour le système d'Euler compressible. Le domaine en espace est le segment  $[0, 1]$ . La distribution initiale est la Maxwellienne locale dont les quantités macroscopiques sont :

$$\rho = 1, \quad u = 0, \quad T = \frac{1000}{\rho R}, \quad \text{sur } [0, 0.1], \quad T = \frac{0.01}{\rho R} \text{ sur } ]0.1, 0.9], \quad T = \frac{100}{\rho * R} \text{ sinon.} \quad (6.3.16)$$

Pour la méthode DVM, la largeur de la grille est dictée par la valeur maximale de la température initiale. Cependant le pas de la grille en vitesse est dicté par la température initiale minimale selon (6.1.6). Il est de ce fait nécessaire de prendre 2551 points pour la méthode DVM. Les résultats (6.3(a), 6.3(c), 6.3(e), 6.3(b), 6.3(d), 6.3(f)) montrent que les résultats obtenus par la méthode LDV avec 30 points sont analogues à ceux obtenus avec la méthode DVM pour 2551 points. Ce qui montre l'efficacité de la méthode LDV. On note au passage qu'à notre connaissance les calculateurs les plus puissants du CEA peuvent traiter au maximum  $(30)^3$  points dans la grille en vitesse. Ce cas test sur une grille tridimensionnelle en vitesse pour une méthode DVM classique est totalement hors d'atteinte et la méthode LDV propose une solution.

### 6.3.3 Problème de transfert de chaleur

Ce cas test est consacré au problème du transfert de chaleur pour le modèle BGK avec  $\omega = -0.5$  et  $c = 6.15 \cdot 10^{-9}$  dans l'expression de  $\tau$ . Pour ce cas test, on considère le domaine en espace  $[0, 1]$  discrétisé avec 300 points. On suppose que les parois situées en 0 et en 1 se trouvent aux températures  $T_G$  et  $T_D$ . Les fonctions de distribution vérifient alors des conditions de bord de type Maxwell diffuses

$$f(x = 0, v > 0) = \sigma_G M(1, 0, T_G), \quad f(x = 0, v < 0) = \sigma_D M(1, 0, T_D), \quad (6.3.17)$$

où

$$\sigma_G = -\frac{\int_{v < 0} v f(x = 0, v) dv}{\int_{v > 0} v M(1, 0, T_G) dv}, \quad \sigma_D = -\frac{\int_{v > 0} v f(x = 1, v) dv}{\int_{v < 0} v M(1, 0, T_D) dv}. \quad (6.3.18)$$

On prend pour condition initiale la Maxwellienne locale suivante dont les paramètres sont données par

$$T = T_G = 300, \quad \text{sur } [0, 1[, \quad T(1) = T_D = 1000, \quad \rho = \rho_{\text{inf}}, \quad u = 0. \quad (6.3.19)$$

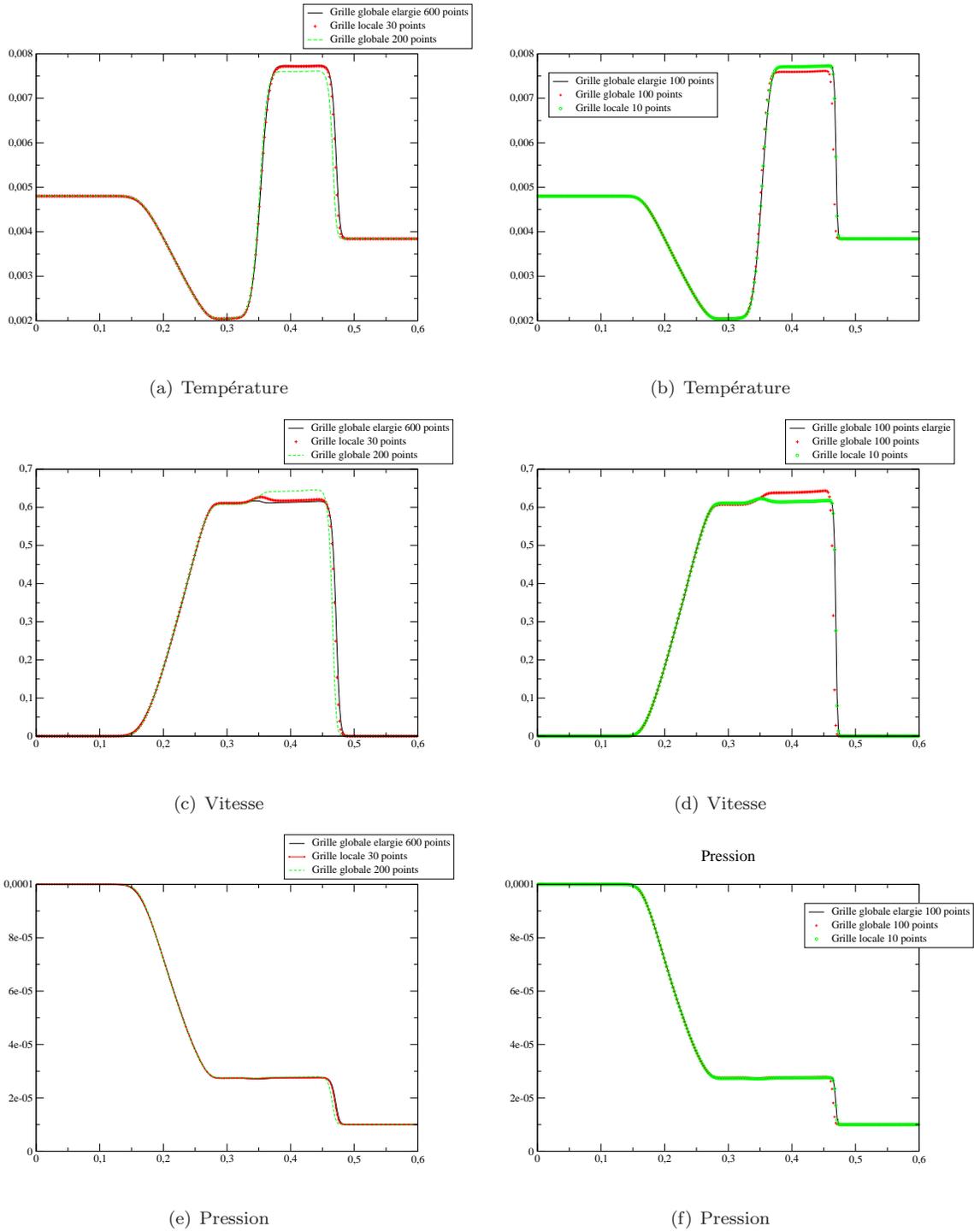


FIG. 6.1 – Test de Sod pour le modèle BGK (gauche) et Euler (droite). Comparaison entre DVM, LDV et DVM pour une grille élargie et très raffinée pour les conditions initiales 6.3.14 et pour  $7.340183530155034 \cdot 10^{-2}$  s de simulation.

Pour la discrétisation des termes  $\sigma_G$  et  $\sigma_D$ , on utilise l'approximation suivante

$$\sigma_G \approx -\frac{\langle v^- f_1^n \rangle_{\mathcal{V}_1^n}}{\langle v^+ M(1, 0, T_G) \rangle_{\mathcal{V}_0^n}}, \quad \sigma_D \approx -\frac{\langle v^+ f_1^n \rangle_{\mathcal{V}_{imax}^n}}{\langle v^- M(1, 0, T_D) \rangle_{\mathcal{V}_{imax+1}^n}}.$$

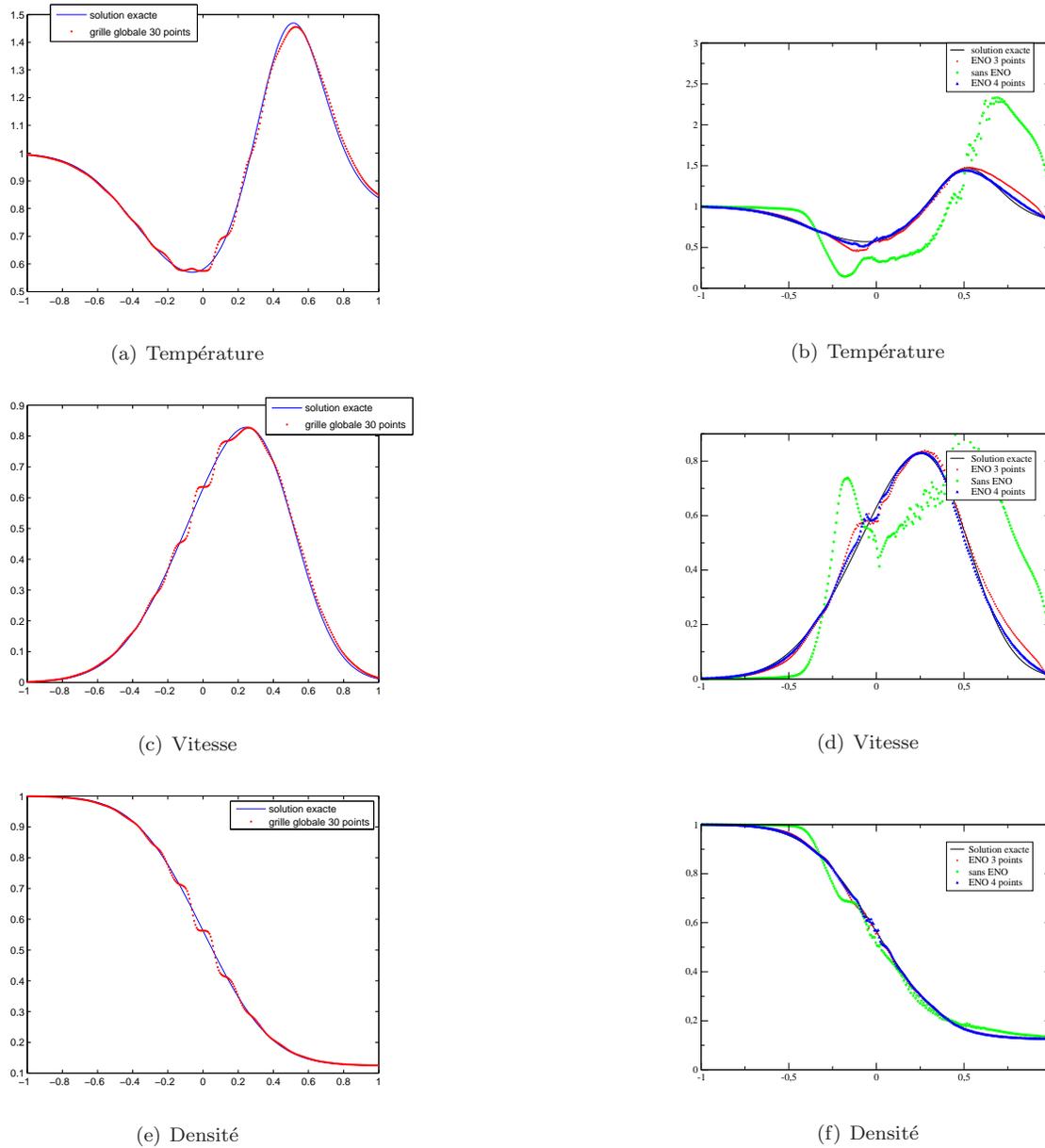


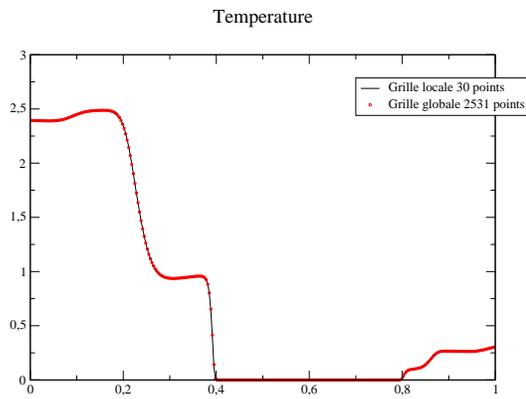
FIG. 6.2 – Test de Sod pour le transport libre avec DVM standard (à gauche) et LDV (à droite) pour 30 points en vitesse, pour les conditions initiales 6.3.15 au bout de 0.3 s de simulation.

Pour ce cas test nous aurons la possibilité de choisir différents nombres de Knudsen. Ils seront gouvernés par les valeurs données à  $\rho_{\text{inf}}$ .

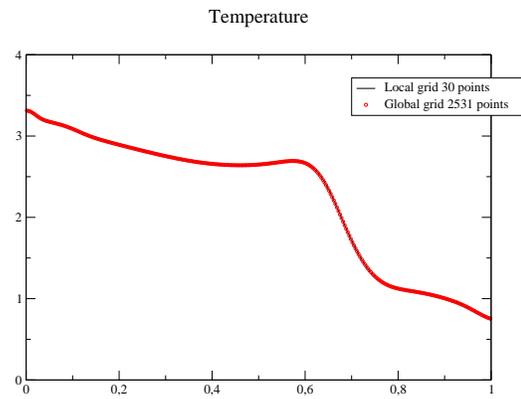
Par exemple lorsque  $\rho_{\text{inf}} = 10^{-3}$ , on a  $Kn = 10^{-4}$ . On peut alors considérer que dans ce cas, nous nous trouvons en régime fluide. La figure 6.4 montre alors qu'il n'y a pas de différences entre les résultats obtenus avec les méthodes DVM et LDV pour le même nombre de points.

Par contre lorsqu'on passe en régime transitionnel, 6.4 montre que la méthode LDV possède un mauvais comportement. Cela s'explique par le fait que le support de la fonction de distribution n'est plus inclus dans celui de la Maxwellienne locale associée. Cela a été illustré dans la figure 6.4 pour  $\rho_{\text{inf}} = 10^{-3}$ , on a  $Kn = 10^{-2}$ .

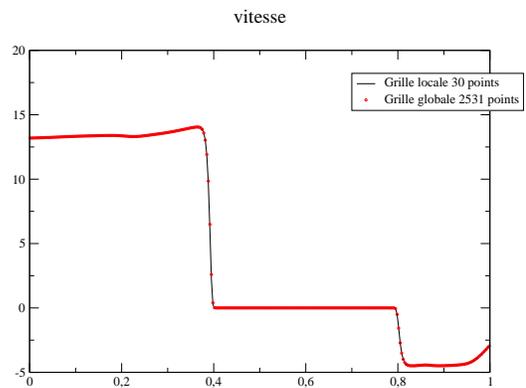
Une des solutions envisagée est expliquée dans la sous-section 6.2.3. Elle consiste tester les points de



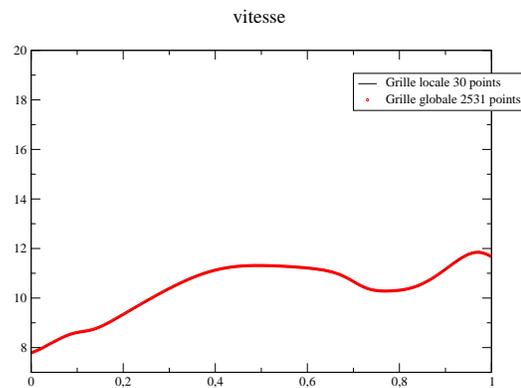
(a) Température avant le choc



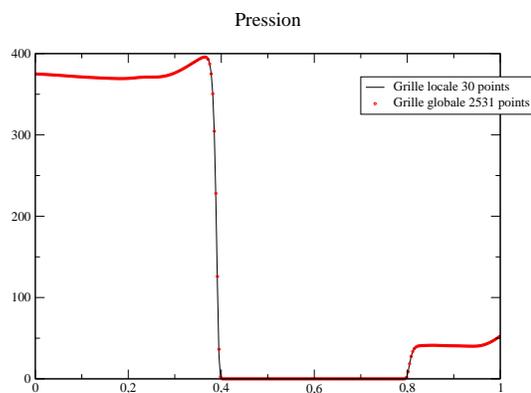
(b) Température après le choc



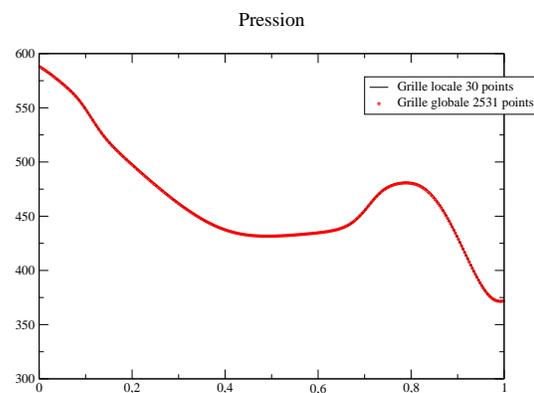
(c) Vitesse avant le choc



(d) Vitesse après le choc



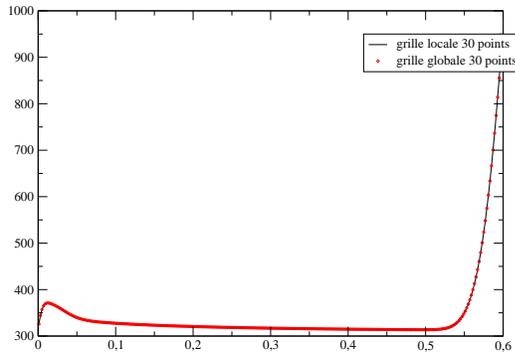
(e) Pression avant le choc



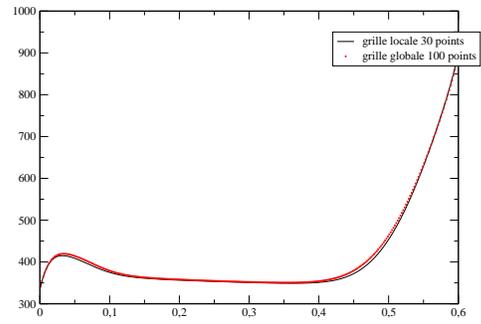
(f) Pression après le choc

FIG. 6.3 - .

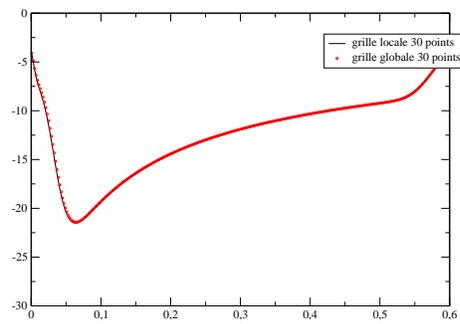
la grille où ce problème se produit et de l'agrandir au besoin.



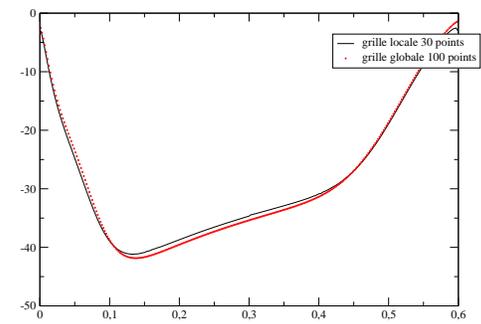
(a) Température



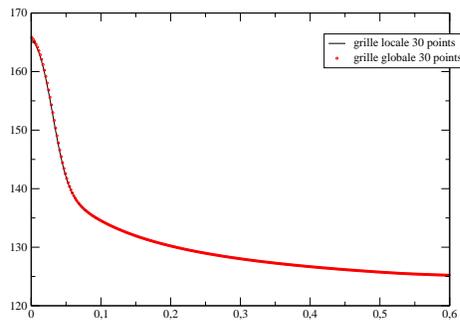
(b) Température



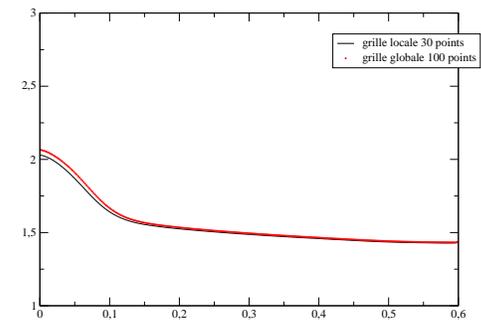
(c) Vitesse



(d) Température



(e) Pression



(f) Pression

FIG. 6.4 – Cas test du transfert de chaleur pour  $Kn = 0.0001$ , pour 30 points pour les conditions initiales 6.3.19.

Troisième partie  
Modèles fluides



## Chapitre 7

# Modèles fluides dérivés à partir de modèles cinétiques

Ce chapitre est consacré à la dérivation de modèles hydrodynamiques à partir de modèles cinétiques. Historiquement, l'obtention de modèles fluides à partir de la théorie cinétique est une idée qui remonte à Hilbert qui en a fait état lors de son exposé au Congrès mondial des Mathématiciens à Paris ([116]).

Ce chapitre décrit deux travaux différents ([42, 40]) dont l'essentiel du travail repose sur l'obtention d'un système hydrodynamique. Dans ces articles, le point clé est l'obtention au niveau cinétique d'une bonne fermeture conduisant à des modèles fluides fermés. Dans ce chapitre qui est divisé en deux sections, on s'intéresse dans un premier temps à un système d'Euler dissipatif établi à partir de l'équation de Boltzmann linéaire. Puis dans une seconde section, on construit un système de Navier-Sokes quantique isotherme à partir de l'équation de Wigner-BGK.

### 7.1 Equation de Boltzmann inélastique ([42])

L'évolution d'un gaz granulaire constitué de particules entrant en collision de manière inélastique avec un fluide à l'équilibre thermodynamique peut être décrite par une équation de Boltzmann linéaire inélastique. Lorsqu'on s'intéresse aux modèles fluides obtenus en prenant les moments de l'équation de Boltzmann inélastique, on voit que la seule quantité conservée est le nombre de particules inélastiques ([153]). Il en résulte qu'une approche hydrodynamique conventionnelle de type Euler entraîne une seule équation décrivant l'advection de particules inélastiques ayant la même vitesse que le fluide. Le but de ce travail est de trouver des modèles hydrodynamiques pour de telles équations de Boltzmann faisant intervenir des équations dissipatives pour la quantité de mouvement et la température du gaz. On présente un ensemble fermé d'équations d'Euler inélastique pour des molécules Maxwelliennes comme celui considéré dans ([153]).

Avant de décrire plus précisément le problème considéré, mentionnons divers travaux traitant du même problème. Dans ([153], [129]), les auteurs montrent dans le cas d'un noyau Maxwellien l'existence et l'unicité d'un état d'équilibre pour l'équation de Boltzmann linéaire inélastique. Cet état d'équilibre est une fonction Maxwellienne possédant la même vitesse macroscopique que le fluide, mais de température inférieure. Mentionnons également quelques travaux où des modèles hydrodynamiques pour des interactions de type inélastique ont été dérivés ([158], [26]).

#### 7.1.1 L'équation de Boltzmann linéaire inélastique

On considère l'équation de Boltzmann linéaire inélastique

$$\partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f(t, x, v) = Q(f, M_1)(t, x, v), \quad (7.1.1)$$

où  $Q(f, M_1)$  est défini par

$$Q(f, M_1) = \frac{1}{2\pi\lambda} \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{S}^2} B(v, w, \omega) \left[ \frac{1}{e^2} f(v_*) M_1(w_*) - f(v) M_1(w) \right] dw d\omega. \quad (7.1.2)$$

Le fluide est supposé être à l'équilibre thermodynamique avec une vitesse  $u_1$  et une température  $T_1$ . Cela signifie que sa fonction de distribution  $M_1$  est la Maxwellienne normalisée

$$M_1(v) = \frac{1}{(2\pi R_1 T_1)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|v - u_1|^2}{2R_1 T_1}\right), \quad (7.1.3)$$

avec  $R_1 = \frac{k_B}{m_1}$  et  $k_B$ , la constante de Boltzmann.

$(v_*, w_*)$  désignent les vitesses précolisionnelles données par les expressions

$$v_* = v - 2\alpha \frac{1 - \beta}{1 - 2\beta} [q \cdot n] n, \quad w_* = v + 2(1 - \alpha) \frac{1 - \beta}{1 - 2\beta} [q \cdot n] n, \quad (7.1.4)$$

où  $q = v - w$  est la vitesse relative ([129]).  $\alpha$  et  $\beta$  sont les paramètres adimensionnés

$$\alpha = \frac{m_1}{m_1 + m}, \quad \beta = \frac{1 - e}{2}. \quad (7.1.5)$$

$B(v, w, \omega)$  désigne le noyau de collision,  $\lambda$  le libre parcours moyen et  $e \in ]0, 1[$  le coefficient de restitution. Le cas  $e = 1$  correspond aux collisions élastiques.

Cette équation linéaire décrit l'évolution de la fonction de distribution  $f(t, x, v)$  de particules de masse  $m$  (représentant le gaz granulaire) entrant en collision de façon inélastique avec un fluide donné constitué de particules de masse  $m_1$ . Dans ces conditions, on montre (cf [153, 129]) que les états d'équilibre stationnaires de l'opérateur 7.1.2 sont donnés par les distributions Maxwelliennes proportionnelles à

$$M^\sharp(v) = \left( \frac{m}{2\pi R T^\sharp} \right)^{3/2} \exp\left\{ -\frac{m|v - u_1|^2}{2R T^\sharp} \right\}, \quad (7.1.6)$$

où

$$R = \frac{k_B}{m}, \quad T^\sharp = \frac{(1 - \alpha)(1 - \beta)}{1 - \alpha(1 - \beta)} \frac{R_1}{R} T_1.$$

On se place alors dans un cadre de molécules Maxwelliennes. Dans ce cas,  $B(v, w, \omega) = S$ ,  $(v, w, \omega) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{S}^2$ .

### 7.1.2 Limite hydrodynamique et équation d'Euler.

L'existence d'un équilibre Maxwellien pour une température non nulle (7.1.6) permet de construire des modèles hydrodynamiques pour le flot granulaire considéré. Ce faisant, on obtient des équations pour la quantité de mouvement et l'énergie qui s'avèrent être triviales. Dans le but de réaliser une fermeture pour les équations de quantité de mouvement et la température qui soit dissipative, on suppose que la fonction de distribution  $f$  est une Maxwellienne locale ayant la vitesse et la température du gaz polluant,

$$M(x, v, t) = \frac{\rho(x, t)}{(2\pi R T(x, t))^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|v - u(x, t)|^2}{2R T(x, t)}\right). \quad (7.1.7)$$

Finalement, on obtient le système d'Euler inélastique suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \\ \partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x (\rho T) = \frac{4S\alpha(1 - \beta)}{3\lambda} \rho (u_1 - u), \\ \partial_t \left( \rho \left( \frac{1}{2} |u|^2 + \frac{3}{2} T \right) \right) + \nabla \cdot \left( \rho \left( \frac{1}{2} |u|^2 + \frac{5}{2} T \right) \right) = \frac{4\rho S}{3\lambda} D(x, t), \end{cases}$$

avec

$$D = 2\alpha^2(1 - \beta)^2 \rho (3RT + 3R_1 T_1 + |u|^2 + |u_1|^2 - 2u_1 \cdot u) - 2\alpha(1 - \beta) \rho (3RT + |u|^2 - u \cdot u_1).$$

## 7.2 Modèles hydrodynamiques quantiques ([40])

Cette section traite des modèles hydrodynamiques quantiques, plus précisément de la dérivation d'un modèle de Navier-Stokes quantique. Une première stratégie est d'ajouter des corrections quantiques aux modèles classiques ([102]).

Dans le cas présent, l'approche choisie est fondée sur un développement de Chapman-Enskog à partir d'un modèle BGK quantique. Ainsi, dans [73], un système de type Euler quantique isotherme a été dérivé en fermant le système avec un équilibre local quantique. Cela a été rendu possible grâce aux travaux de Degond et de Ringhofer ([75]) qui ont étendu sur le plan formel au contexte quantique la méthode des moments de Levermore ([131]). Ainsi, des équilibres locaux quantiques ont pu être définis en minimisant une entropie sous contrainte. Également à partir d'un scaling diffusif un modèle QDD a été établi dans ([74]). Citons au passage que depuis des résultats mathématiquement rigoureux ont été démontrés concernant des problèmes de réalisabilité ([136, 137]). Par ailleurs, signalons que les entropies associées aux statistiques de Fermi-Dirac ou de Bose-Einstein vérifient les propriétés de convexité requises pour appliquer la théorie de Degond et Ringhofer. Ainsi récemment ([16]), des modèles hydrodynamiques quantiques ont été établis dans ce cadre-là.

La spécificité de la théorie quantique vient du fait que les analogues des fonctions de distribution de la théorie cinétique classique sont des opérateurs. On rappelle la définition des premiers moments de l'opérateur densité  $\varrho$ , i.e. la densité de masse  $n$  et la densité de courant  $nu$ . Ces quantités sont définies par dualité de la façon suivante

$$\forall \phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3) \quad \int n\phi dx = \text{Tr}\{\varrho\phi\}, \quad (7.2.1)$$

$$\forall \Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)^3 \quad \int nu \cdot \Phi dx = \text{Tr}\{\varrho W^{-1}[p \cdot \Phi]\} = -i\hbar \text{Tr}\left\{\varrho \left(\Phi \cdot \nabla + \frac{1}{2}(\nabla \cdot \Phi)\right)\right\}. \quad (7.2.2)$$

En (7.2.2),  $W^{-1}$  désigne la transformée de Wigner inverse. La transformée de Wigner  $W[\varrho](x, p)$  est alors définie par :

$$W[\varrho](x, p) = \int \varrho \left(x - \frac{1}{2}\eta, x + \frac{1}{2}\eta\right) e^{\frac{i\eta \cdot p}{\hbar}} d\eta. \quad (7.2.3)$$

Dans le but de traiter des problèmes isothermes, on introduit l'énergie libre quantique définie par :

$$G(\varrho) = \text{Tr}(T(\varrho \ln \varrho - \varrho) + \mathcal{H}\varrho), \quad (7.2.4)$$

où  $\mathcal{H}$  est le Hamiltonien défini par  $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V$ . Le potentiel  $V = V(t, x)$  appliqué au système de particules est supposé donné. Dans ce travail, on suppose que le système de particules interagit avec un bain thermique et que la masse et le courant sont conservés au cours de cette interaction. En suivant ([75], [74], [73]), on modélise cette interaction par un opérateur de relaxation construit à partir du principe de minimisation de l'énergie libre. Ainsi, on définit l'équilibre thermique local associé à  $n$  et à  $nu$ , à la température  $T$  par

$$\varrho_{n,nu}^{eq} = \exp\left(-\frac{1}{T}H(A, B)\right), \quad (7.2.5)$$

où  $H(A, B)$  est l'Hamiltonien modifié suivant :

$$H(A, B) = W^{-1}\left[\frac{1}{2}(p - B)^2 + A\right] = \frac{1}{2}(i\hbar\nabla + B)^2 + A, \quad (7.2.6)$$

$A$  et  $B$  sont les multiplicateurs de Lagrange associés au problème de minimisation ([75], [73]). La fonction de Wigner d'équilibre local associée à  $n$  et  $nu$  est la transformée de Wigner de  $\varrho_{n,nu}^{eq} : f_{n,nu}^{eq} = W[\varrho_{n,nu}^{eq}]$ .

### 7.2.1 Dérivation du système de Navier-Stokes quantique

On introduit maintenant le modèle BGK quantique en rajoutant un opérateur de relaxation de type BGK à l'équation de Liouville quantique.  $\varrho$  vérifie alors

$$i\hbar\partial_t\varrho = [\mathcal{H}, \varrho] + i\hbar\frac{\varrho_{n,nu}^{eq} - \varrho}{\varepsilon}. \quad (7.2.7)$$

Afin de revenir à une description de notre modèle dans l'espace des phases, on applique la transformation de Wigner à l'équation 7.2.7. Ainsi on obtient l'équation de Wigner-BGK

$$\partial_t f + p \cdot \nabla_x f - \Theta(V)f = \frac{f_{n,nu}^{eq} - f}{\varepsilon} \quad (7.2.8)$$

avec

$$\Theta(V)f = \frac{i}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^6} \frac{V(t, x + \frac{\hbar}{2}\eta) - V(t, x - \frac{\hbar}{2}\eta)}{\hbar} f(x, p') e^{i(p-p') \cdot \eta} d\eta dp'. \quad (7.2.9)$$

La fonction de Wigner  $f(t, x, p)$  peut être vue comme une extension quantique de la fonction de distribution de Boltzmann, bien que  $f(t, x, p)$  ne soit pas une fonction positive. La transformation de Wigner du développement de  $\varrho$  entraîne  $f = f_{n,nu}^{eq} + \varepsilon f_1$ . Cela permet donc de calculer  $f_1$  à partir de (7.2.8). Ainsi, en considérant les premiers moments de (7.2.8) par rapport à  $p$ , on obtient le système de Navier-Stokes quantique isotherme suivant

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = 0, \quad (7.2.10)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(nu) + \operatorname{div} \int p \otimes p f_{n,nu}^{eq} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3} + n \nabla_x V \\ = \varepsilon \operatorname{div} \int p \otimes p \left( \partial_t f_{n,nu}^{eq} + p \cdot \nabla_x f_{n,nu}^{eq} - \Theta(V) f_{n,nu}^{eq} \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}. \end{aligned} \quad (7.2.11)$$

L'équation (7.2.11) contient des moments d'ordres 2 et 3 de la fonction d'équilibre  $f_{n,nu}^{eq}$  qui s'écrivent

$$\Pi_{ij} = \int p_i p_j f_{n,nu}^{eq} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \mathbb{Q}_{ijk} = \int p_i p_j p_k f_{n,nu}^{eq} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (7.2.12)$$

En utilisant les propriétés des commutateurs comme dans ([73], [72]), on exprime  $\operatorname{div}(\Pi)$  et  $\operatorname{div}(\mathbb{Q})$  en fonction de  $n$ ,  $nu$ ,  $A$  et  $B$  seulement. On obtient ainsi le théorème suivant :

**Théorème 7.2.1.** *Le système de Navier-Stokes isotherme quantique (7.2.10, 7.2.11) est formellement équivalent au système suivant, à des termes d'ordre  $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$  près :*

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = 0, \quad (7.2.13)$$

$$\partial_t(nu_i) + \sum_{j=1}^3 \left( \partial_{x_j}(nu_i B_j) + n(u_j - B_j) \partial_{x_i} B_j \right) + n \partial_{x_i}(V - A) = \varepsilon S_i \quad (7.2.14)$$

où  $A$  et  $B$  sont reliés à  $n$  et  $nu$  via (7.2.5) et où  $S_i$  a été calculé dans ([40]).

## 7.2.2 Le système dans le cas irrotationnel

On se place dans le cas particulier d'un flot irrotationnel, qui permet de simplifier le système obtenu dans le Théorème 7.2.1. En effet, il est démontré dans ([73], [72]) que lorsque  $\nabla \times u = 0$ , alors  $B = u$ . Dans le cas de l'équation d'Euler isotherme quantique (i.e. lorsqu'on prend  $\varepsilon = 0$  dans 7.2.14), il est démontré dans [73] que lorsque la condition initiale est irrotationnelle, alors la solution reste irrotationnelle pour tout temps. Malheureusement, il n'est pas clair que cette propriété reste vraie pour les équations de Navier-Stokes quantiques (7.2.13, 7.2.14). A la place, on a la propriété suivante : si  $(\nabla \times u)(t=0) = \mathcal{O}(\varepsilon)$  on a alors  $(\nabla \times u)(t) = \mathcal{O}(\varepsilon)$ , ce qui implique  $B = u + \mathcal{O}(\varepsilon)$ . Dans une telle situation, le modèle obtenu en remplaçant  $B$  par  $u$  dans le membre de droite de (7.2.14) va seulement différer de (7.2.14) d'un terme en  $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$  qui sera consistant avec notre théorie.

**Proposition 7.** *Supposons  $(\nabla \times u)(t=0) = \mathcal{O}(\varepsilon)$ . Alors, pour tout temps, on a  $(\nabla \times u)(t) = \mathcal{O}(\varepsilon)$  et le système suivant est formellement équivalent à (7.2.13, 7.2.14), à  $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$  près :*

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = 0, \quad (7.2.15)$$

$$\partial_t(nu_i) + \sum_{j=1}^3 \left( \partial_{x_j}(nu_i B_j) + n(u_j - B_j) \partial_{x_i} B_j \right) + n \partial_{x_i}(V - A) = \varepsilon \tilde{S}_i, \quad (7.2.16)$$

où

$$\begin{aligned} \tilde{S}_i = & \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \left( \partial_{x_j} (\partial_{x_j} u_k \mathbb{P}_{ik}) + \partial_{x_j} (\partial_{x_i} u_k \mathbb{P}_{jk}) + \partial_{x_j x_k}^2 (\mathbb{P}_{ij} u_k) \right) \\ & + \sum_{k=1}^3 \partial_{x_k} (n u_k) \partial_{x_i} A - n \partial_{x_i} (\partial_t A) - \frac{\hbar^2}{4} \sum_{k=1}^3 \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} \partial_{x_k} (n \partial_{x_i} \partial_{x_j} u_k) \end{aligned} \quad (7.2.17)$$

où  $\mathbb{P}$  est le tenseur défini avec  $f = f_{eq}$ .

**Remarque 7.** La limite semi-classique de (7.2.17) donne les équations de Navier-Stokes classiques. En effet dans ce cas,  $\mathbb{P}_{ij}$ ,  $A$  et  $B$  ont pour expressions ([73])  $\mathbb{P}_{ij} = nT \delta_{ij}$ ,  $A = -T \ln(n)$ ,  $B = u$  et on obtient

$$\tilde{S}_i = \sum_{j=1}^3 \partial_{x_j} \left( (\partial_{x_j} u_i + \partial_{x_i} u_j) nT \right).$$

Notons au passage que dans ([121]), les auteurs ont établi une équation supplémentaire sur l'énergie moyennant une hypothèse simplificatrice et qu'une analyse mathématique de notre modèle a été effectuée dans ([120]).



## Chapitre 8

# Modèles fluides pour les plasmas

Ce chapitre décrivant les travaux ([38], [39], [37]) est consacré aux développements de méthodes numériques pour les équations d'Euler de la mécanique des fluides soumis à une force de Lorentz de grande amplitude. Il s'agit d'un modèle fluide utilisé pour décrire les plasmas fortement magnétisés dans le cadre par exemple du Tokamak d'ITER. Dans cette limite où l'amplitude devient infinie, le modèle relaxe vers le modèle dit de dérive-fluide.

Le problème qui se pose alors est que les schémas classiquement utilisés pour décrire ces systèmes sont sujets à des contraintes numériques très sévères. Dans le cas présent, la contrainte provient de l'amplitude de la force de Lorentz qui devient infinie. Le but de ces travaux est de proposer un schéma numérique supportant la limite d'une force de Lorentz tendant vers l'infini sans nécessiter de contracter les pas de temps et d'espace. Ces schémas introduits par S. Jin ([118]) sont désignés dans la littérature comme "asymptotic preserving". Citons au passage quelques travaux concernant de tels schémas pour d'autres modèles physiques et d'autres asymptotiques ([128, 17, 18, 19, 96, 97, 54, 65]).

Dans cette limite, la composante de la vitesse du fluide perpendiculaire au champ magnétique est donnée par une relation algébrique reliant le champ électrique et le gradient de pression (dérive centre-guide) alors que la composante de la vitesse parallèle au champ magnétique s'établit de manière à garantir à tout instant un équilibre entre les composantes parallèles du gradient de pression et du champ électrique. Cette dernière condition conduit à un problème elliptique pour la vitesse parallèle le long d'une ligne de champ. Ainsi lors de la mise en oeuvre du schéma, un des points clé est la résolution d'un problème diffusif fortement anisotrope dans la direction du champ magnétique. Il s'agit alors d'en donner une discrétisation qui soit indépendante de la direction d'anisotropie sans recourir à l'usage de coordonnées adaptées. La plupart des méthodes développées jusqu'à présent sont basées sur l'usage de coordonnées curvilignes dont l'une des coordonnées est tangente à l'une des coordonnées du champ magnétique ([107], [27]), très coûteuses. Pour mettre en oeuvre l'approche proposée dans ce chapitre, le problème est projeté selon une composante moyenne qui ne varie que dans la direction perpendiculaire au champ magnétique et une fluctuation qui est solution d'un problème elliptique beaucoup mieux conditionné que le problème de départ. Ce dernier problème est transformé en problème elliptique du quatrième ordre. Notons que cette méthode de décomposition a été appliquée à un problème de diffusion anisotrope dans le cadre des plasmas ionosphériques ([69], [70]) avec un formalisme de type éléments finis.

Cette approche est ensuite généralisée à un problème elliptique non linéaire afin de pouvoir traiter des lois de pression non linéaires. La non-linéarité est alors gérée via un algorithme de Gummel.

Enfin, dans une dernière partie, on considère un plasma constitué d'une espèce d'électron et d'une espèce d'ion. Ce mélange est alors décrit par le système d'Euler-Lorentz bifluide couplé à la contrainte de quasi neutralité. On construit alors un schéma AP pour ce modèle pour la limite de dérive.

## 8.1 Problèmes de diffusion anisotrope

Dans ([38]), on s'intéresse à la résolution numérique du problème anisotrope dégénéré :

$$-(\mathbf{b} \cdot \nabla)(\nabla \cdot (\mathbf{b} \phi^\tau)) + \tau \phi^\tau = f^\tau, \text{ sur } \Omega, \quad (8.1.1)$$

$$(\mathbf{b} \cdot \nu) \nabla \cdot (\mathbf{b} \phi^\tau) = 0 \text{ sur } \partial\Omega, \quad (8.1.2)$$

où  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  ou  $\mathbb{R}^3$ ,  $f^\tau$  est une fonction donnée,  $\mathbf{b}$  est un vecteur normalisé définissant la direction d'anisotropie et  $\tau$  mesure l'intensité de cette anisotropie. Dans cette expression  $\nabla$  et  $\nabla \cdot$  sont respectivement les opérateurs de gradient et de divergence. La normale extérieure en  $x \in \partial\Omega$  est notée  $\nu$ . Dans le contexte des plasmas, le paramètre  $\tau$  est relié à la gyro-période (i.e. la période du mouvement de gyration des particules proches des lignes de champ magnétique), et la direction d'anisotropie  $\mathbf{b}$  satisfait  $\mathbf{b} = \mathbf{B}/\|\mathbf{B}\|$  où le champ magnétique  $\mathbf{B}$  vérifie la contrainte  $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ .

Notons que l'équation elliptique n'est pas écrite dans sa forme usuelle. Mais la forme actuelle est motivée par les applications au système d'Euler-Lorentz que nous verrons ultérieurement. Cette application a déjà été considérée dans un contexte plus simple dans ([71]), où  $\mathbf{b}$  a été supposé constant et aligné à une direction de coordonnée pour des conditions de bord de type Dirichlet. Dans le cas présent, les conditions de bord de type Neumann entraînent que le système obtenu à la limite est dégénéré. Ainsi, une discrétisation classique du problème (8.1.1, 8.1.2) conduit à un système mal conditionné lorsque  $\tau \rightarrow 0$ . Afin de supprimer cette limitation, on décompose la solution du problème selon sa moyenne le long des lignes de champ et une fluctuation autour de cette moyenne. On écrit alors le problèmes (8.1.1, 8.1.2) sous forme variationnelle, en choisissant convenablement les fonctions tests. C'est cette étape qui permet de s'affranchir des coordonnées locales, car elle transforme les intégrales curvilignes en intégrales en volumes.

### 8.1.1 Présentation de la méthode

On introduit dans un premier temps les espaces fonctionnels suivants

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &= \{\phi \in L^2(\Omega) / \nabla \cdot (\mathbf{b}\phi) \in L^2(\Omega)\}, \quad K = \{\phi \in \mathcal{V} / \nabla \cdot (\mathbf{b}\phi) = 0 \text{ sur } \Omega\}, \\ \mathcal{W} &= \{h \in L^2(\Omega) / (\mathbf{b} \cdot \nabla)h \in L^2(\Omega)\}, \quad \mathcal{W}_0 = \{h \in \mathcal{W} / (\mathbf{b} \cdot \nu)h = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}. \end{aligned}$$

Les éléments de  $K$  représentent les fonctions constantes le long des lignes de champ. Ainsi, la projection d'une fonction sur  $K$  correspond à sa moyennisation le long des lignes de champ, tandis que la projection sur  $K^\perp$  détermine la fluctuation autour de sa moyenne. Ces projections sont alors bien définies grâce au théorème suivant

**Théorème 8.1.1.** *On a les propriétés suivantes*

1.  $K$  est fermé dans  $L^2(\Omega)$ .
2.  $\mathcal{W}_0$  équipé avec la norme  $\|h\|_{\mathcal{W}_0} = \|(\mathbf{b} \cdot \nabla)h\|_{L^2(\Omega)}$  est un espace de Hilbert et  $(\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathcal{W}_0$  est un espace fermé de  $L^2(\Omega)$ .
3.  $K^\perp = (\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathcal{W}_0$ .

On décompose alors  $\phi^\tau$  de manière unique selon

$$\phi^\tau = p^\tau + q^\tau, \quad p^\tau \in K, \quad q^\tau \in K^\perp, \quad (8.1.3)$$

et on pose le problème (8.1.1), (8.1.2) comme

$$-(\mathbf{b} \cdot \nabla)(\nabla \cdot (\mathbf{b} q^\tau)) + \tau(p^\tau + q^\tau) = f^\tau, \text{ dans } \Omega, \quad (8.1.4)$$

$$(\mathbf{b} \cdot \nu) \nabla \cdot (\mathbf{b} q^\tau) = 0, \text{ dans } \partial\Omega, \quad (8.1.5)$$

$$p^\tau \in K \text{ et } q^\tau \in K^\perp. \quad (8.1.6)$$

ou en formulation variationnelle,

$$(\psi \in \mathcal{V}) \int_\Omega \nabla \cdot (\mathbf{b} q^\tau) \nabla \cdot (\mathbf{b} \psi) dx + \tau \int_\Omega (p^\tau + q^\tau) \psi dx = \int_\Omega f^\tau \psi dx. \quad (8.1.7)$$

On découple maintenant le problème (8.1.7) en un problème pour  $p^\tau$  et un problème pour  $q^\tau$  en choisissant la fonction test successivement dans  $K$  puis dans  $K^\perp$ .

**Proposition 8.** Soient  $p^\tau$  et  $q^\tau$  donnés par (8.1.3) où  $\phi^\tau$  est la solution du problème (8.1.1, 8.1.2). Alors : (i)  $p^\tau$  est donné par

$$p^\tau = \frac{1}{\tau} (f^\tau + \mathbf{b} \cdot \nabla g^\tau) \quad \text{dans } \Omega, \quad (8.1.8)$$

où  $g^\tau$  vérifie le problème

$$-\nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla g^\tau) = \nabla \cdot (f^\tau \mathbf{b}) \quad \text{sur } \Omega, \quad (8.1.9)$$

$$(\mathbf{b} \cdot \nu) g^\tau = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (8.1.10)$$

ou, en formulation variationnelle : "Déterminer  $g^\tau \in \mathcal{W}_0$  tel que

$$\int_{\Omega} (\mathbf{b} \cdot \nabla g^\tau) (\mathbf{b} \cdot \nabla \theta) = \int_{\Omega} f^\tau \mathbf{b} \cdot \nabla \theta \, dx, \quad \forall \theta \in \mathcal{W}_0 \text{ ".} \quad (8.1.11)$$

(ii)  $q^\tau$  est donnée par

$$q^\tau = \mathbf{b} \cdot \nabla h^\tau, \quad (8.1.12)$$

où  $h^\tau$  vérifie le problème du 4<sup>ème</sup> ordre :

$$-\nabla \cdot [(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla (\nabla \cdot (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla h^\tau)] + \tau \nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla h^\tau) = \nabla \cdot (\mathbf{b} f^\tau), \quad \text{dans } \Omega, \quad (8.1.13)$$

$$(\mathbf{b} \cdot \nu) \nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla h^\tau) = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (8.1.14)$$

$$(\mathbf{b} \cdot \nu) h^\tau = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (8.1.15)$$

ou en formulation variationnelle : "Déterminer  $h^\tau \in \mathcal{W}_0$  tel que

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla h^\tau) \nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla \theta) \, dx + \tau \int_{\Omega} (\mathbf{b} \cdot \nabla h^\tau) (\mathbf{b} \cdot \nabla \theta) \, dx = \int_{\Omega} f^\tau (\mathbf{b} \cdot \nabla \theta) \, dx \text{ ".} \quad (8.1.16)$$

Ce problème admet une solution dans  $K$  uniformément bornée dans  $L^2(\Omega)$  lorsque  $\tau \rightarrow 0$  sous la condition de compatibilité

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \left( \frac{1}{\tau} \int_{\Omega} f^\tau \, dx \right) \text{ existe et est finie, } \quad \forall r \in K. \quad (8.1.17)$$

Supposons que  $f^\tau$  possède la décomposition  $f^\tau = f^{(0)} + \tau f^{(1)} + \mathcal{O}(\tau)$  dans  $L^2(\Omega)$ . Cette condition implique alors que  $f^{(0)} \in K^\perp$ .

## 8.1.2 Discrétisation spatiale

Le domaine en espace se décompose en une famille  $\mathcal{R}$  de rectangles

$$M_{i-1/2, j-1/2} = ]x_{i-1}, x_i[ \times ]y_{j-1}, y_j[, \quad x_i = x_{\min} + i\Delta x, \quad y_j = y_{\min} + j\Delta y.$$

On cherche une approximation constante par morceaux  $p_{\mathcal{R}}^\tau$  de  $p^\tau$  sur chaque  $M_{i-1/2, j-1/2}$  et on note par  $p_{i-1/2, j-1/2}$  sa valeur constante sur ce rectangle. La fonction  $g^\tau$  est approchée par une fonction constante sur le maillage dual  $\mathcal{D}$ , composé des rectangles

$$\mathcal{D}_{i,j} = ]x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[ \times ]y_{j-1/2}, y_{j+1/2}[, \quad \text{où } x_{i-1/2} = (i-1/2)\Delta x, \quad y_{i-1/2} = (i-1/2)\Delta y.$$

Alors  $g^\tau$  est approchée par une fonction constante par morceaux  $g_{\mathcal{D}}^\tau$ .

On désignera par  $\partial_h$  la discrétisation de  $\mathbf{b} \cdot \nabla$  et par  $\partial_{h,*}$  une discrétisation de  $\nabla(\mathbf{b})$ . Il est alors fondamental de définir les opérateurs  $\partial_h : L_{\mathcal{D}} \rightarrow L_{\mathcal{R}}$  et  $\partial_{h,*} : L_{\mathcal{R}} \rightarrow L_{\mathcal{D}}$  de telle sorte qu'ils soient adjoints au sens discret. Finalement, le problème d'approximation (8.1.9, 8.1.10) est obtenu en résolvant le problème discret pour la fonction constante par morceaux  $g$  sur  $\mathcal{D}$  :

$$\partial_{h,*}(\partial_h g) = \partial_{h,*} f, \quad (8.1.18)$$

avec conditions de Dirichlet sur  $g$ , où  $f$  est une fonction constante par morceaux sur  $\mathcal{R}$ .

Le problème (8.1.13, 8.1.14, 8.1.15) pour  $q^\tau$  se décompose en deux problèmes elliptiques découplés du second ordre du type (8.1.9, 8.1.10) que l'on résout par une méthode analogue. En effet en posant  $u = -\nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla h^\tau)$ , on obtient que (8.1.13, 8.1.14, 8.1.15) est équivalent aux deux problèmes elliptiques :

$$\nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla u) - \tau u = \nabla \cdot (\mathbf{b} f) \quad \text{dans } \Omega, \quad (8.1.19)$$

$$(\mathbf{b} \cdot \nu) u = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega \quad (8.1.20)$$

et

$$-\nabla \cdot ((\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \nabla h) = u \quad \text{dans } \Omega, \quad (8.1.21)$$

$$(\mathbf{b} \cdot \nu) h = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (8.1.22)$$

### 8.1.3 Résultats numériques pour le problème elliptique

Pour les cas test présentés, on utilise les normes  $L^1$ ,  $L^2$  et  $L^\infty$  afin d'estimer l'erreur entre l'approximation numérique  $\phi^h$  et une solution analytique  $\tilde{\phi}_a$  pour le problème (8.1.1, 8.1.2) :

$$\begin{aligned} e_1 &= \frac{\|\tilde{\phi}_a - \phi^h\|_{L^1}}{\|\tilde{\phi}_a\|_{L^1}} = \frac{\sum_{i,j} |\phi_a(x_i, y_j) - \phi^h(i, j)|}{\sum_{i,j} |\phi_a(x_i, y_j)|}, \\ e_2 &= \frac{\|\tilde{\phi}_a - \phi^h\|_{L^2}}{\|\tilde{\phi}_a\|_{L^2}} = \frac{(\sum_{i,j} |\phi_a(x_i, y_j) - \phi_{i,j}^h|^2)^{\frac{1}{2}}}{(\sum_{i,j} |\phi_a(x_i, y_j)|^2)^{\frac{1}{2}}}, \\ e_\infty &= \frac{\|\tilde{\phi}_a - \phi^h\|_{L^\infty}}{\|\tilde{\phi}_a\|_{L^\infty}} = \frac{\max_{i,j} |\phi_a(x_i, y_j) - \phi_{i,j}^h|}{\max_{i,j} |\phi_a(x_i, y_j)|}. \end{aligned} \quad (8.1.23)$$

On développe alors deux cas test. Pour le premier, le domaine en espace est  $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$  et le champ magnétique est uniforme

$$\mathbf{b} = (\sin \alpha, \cos \alpha), \quad [0, \frac{\pi}{2}], \quad (8.1.24)$$

où  $\alpha$  désigne l'angle entre  $\mathbf{b}$  et l'axe des abscisses.

Pour le second cas test  $\Omega = [1, 2] \times [1, 2]$  et le champ magnétique variable est donné par :

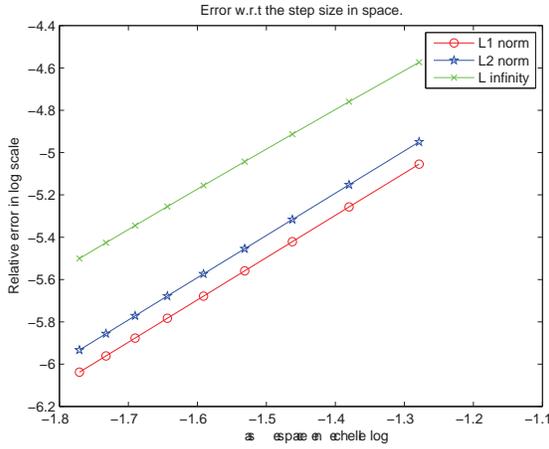
$$\mathbf{b} = (\sin(\theta), -\cos(\theta)), \quad \tan(\theta) = \frac{y}{x}. \quad (8.1.25)$$

Par ailleurs signalons au passage, qu'il est nécessaire de s'assurer que la condition de compatibilité (8.1.17) est satisfaite pour les opérateurs discrets. Ainsi le second membre  $f_a^\tau$  se décompose comme

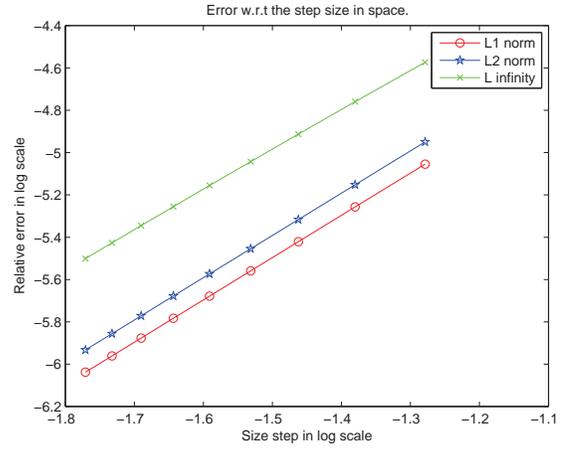
$$f_a^\tau = f_a^{(0)} + \tau f_a^{(1)}, \quad f_a^{(0)} \in K_{\text{app}}^\perp, \quad \text{où } K_{\text{app}} = \{\phi / \nabla \cdot (\mathbf{b}\phi)_{\text{app}} = 0\}.$$

On présente les résultats numériques donnés pour l'approximation de (8.1.1, 8.1.2) pour la discrétisation (8.1.18). La figure 8.1 présente les courbes d'erreur en échelle logarithmique pour différentes valeurs de  $\tau$ . Ces courbes sont des droites de pente égale à 2, montrant que notre schéma est d'ordre 2 pour les différentes valeurs de  $\tau$ . On note cependant une petite dégradation pour les petites valeurs de  $\tau$ .

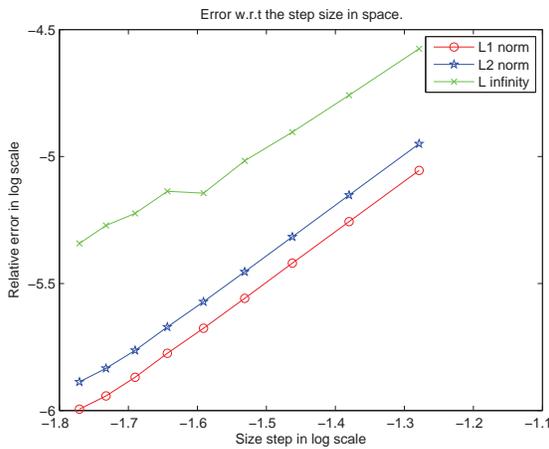
Cette petite dégradation peut être expliquée comme suit. (8.1.8) montre que  $p^\tau$  est le résultat d'un problème raide puisque  $\tau p^\tau$  est obtenu comme la différence de deux quantités d'ordre 0 en  $\tau$ . Afin de mettre en évidence l'influence de  $\tau$  sur l'erreur commise sur  $p^\tau$ , on a représenté à la figure 8.2 l'erreur commise en norme  $L^\infty$  sur  $p^\tau$  ainsi que  $\nabla \cdot (\mathbf{b} p^\tau)$  en fonction de  $\tau$  lorsque  $\tau \rightarrow 0$ . La figure 8.2(a) montre une croissance de  $\nabla \cdot (\mathbf{b} p^\tau)$ . Cela s'explique par la discrétisation du second ordre de l'opérateur qui fournit une valeur de  $\tau(\nabla \cdot (\cdot \mathbf{b})) (p^\tau)$  dont la précision est celle du système linéaire utilisé pour le calcul de  $g^\tau$  et est limitée par les erreurs d'arrondis. Cette erreur est alors amplifiée par la multiplication par le facteur  $\frac{1}{\tau}$ . Cette analyse est également valable pour la précision de  $p^\tau$  en fonction de  $\tau$  représentée à la figure 8.2. Pour les grandes valeurs de  $\tau$ , on observe un plateau qui s'explique par les erreurs de discrétisation sur les opérateurs mis en jeu. Puisque le second membre est bien préparé, cette erreur s'applique seulement au terme  $\tau f_1$  de  $f^\tau$  qui est proportionnel à  $\tau \mathcal{O}(h^2)$  dans  $\mathbf{b} \cdot \nabla g^\tau$  et qui donne naissance à une erreur de



(a)  $\tau = 10^{-3}$

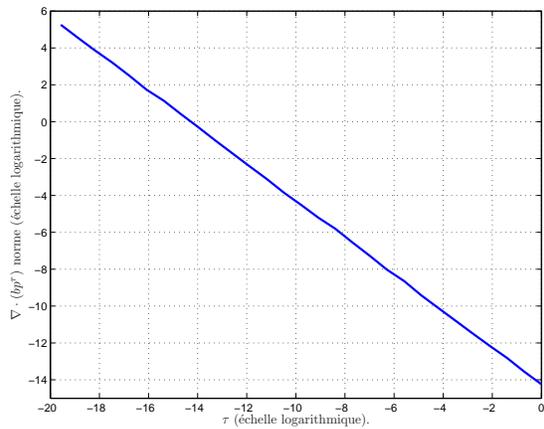


(b)  $\tau = 10^{-6}$

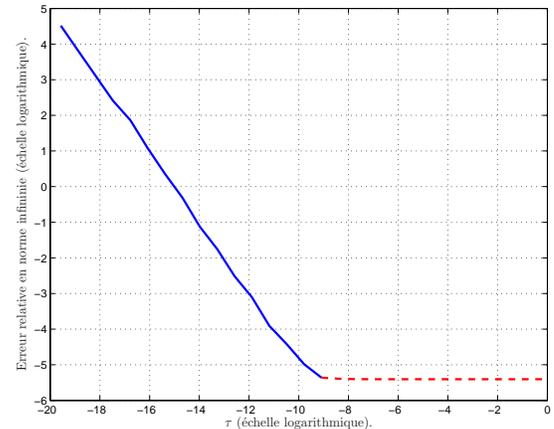


(c)  $\tau = 10^{-9}$

FIG. 8.1 – Cas test pour le champ magnétique non uniforme (8.1.25) : normes  $L^1$ ,  $L^2$  et  $L^\infty$  des erreurs relatives, pour la solution  $\phi^\tau$  en fonction de la taille du maillage, en échelle logarithmique pour différentes valeurs de  $\tau$ .



(a) Norme infinie pour  $\nabla \cdot (bp^\tau)$  en fonction de  $\tau$  en échelle log.



(b) Erreur relative en norme infinie pour  $p^\tau$  en fonction de  $\tau$  en échelle logarithmique.

FIG. 8.2 – Champ magnétique oblique (8.1.24) pour  $\alpha = \pi/3$  et  $\Delta x = \Delta y = 1/60$ . Approximation de la partie  $p^\tau$  de la solution.

$\mathcal{O}(h^2)$  pour  $p^\tau$ . La valeur du plateau dépend seulement de la taille du maillage mais ne dépend pas de  $\tau$ . L'approximation sur  $p^\tau$  peut être rendue totalement indépendante de  $\tau$  sous l'hypothèse  $f^0 = 0$ . Notons au passage que dans ([68], [69], [70]), la méthode numérique a été développée sous cette hypothèse. Dans le présent travail, cette hypothèse a été affaiblie en vue des applications au système d'Euler-Lorentz en limite de dérive. Ainsi, notre schéma est AP stricto sensu seulement lorsque  $f^0 = 0$  ou lorsque  $f^0 \neq 0$  seulement si les erreurs d'arrondis générées par le système sont plus petite que l'erreur de discrétisation. Il reste cependant AP sans aucune restrictions pour le calcul de  $q^\tau$ . Par ailleurs, dans une prochaine section, nous montrerons qu'en implicitant d'autres quantités lors de la discrétisation d'Euler-Lorentz, nous pourrions nous ramener à un système anisotrope pour lequel  $f^0 = 0$  et qui sera donc pleinement AP.

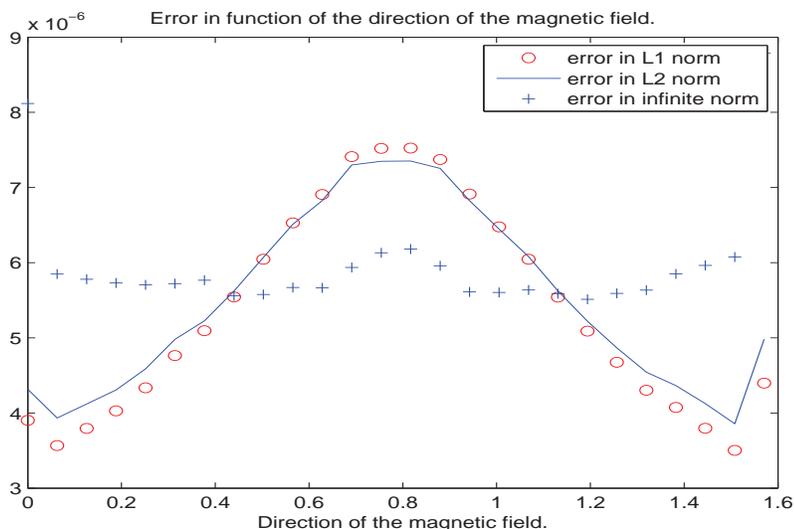


FIG. 8.3 – Cas test pour le champ magnétique 8.1.24 lorsque  $\tau = 10^{-9}$  et  $\Delta x = \Delta y = 1/40$ . Normes des erreurs relatives (8.1.23) en fonction de l'angle  $\alpha$  entre le champ magnétique et l'axe des abscisses.

La figure 8.3 représente les différentes erreurs en fonction de l'angle de l'anisotropie et montre que ces écarts sont tous du même ordre. Cela conforte notre idée de construire une méthode numérique qui ne soit pas basée sur l'usage de coordonnées locales adaptées au champ magnétique.

## 8.2 Application au système d'Euler-Lorentz en régime de dérive ([38])

### 8.2.1 Présentation du modèle

On considère maintenant le système d'Euler Lorentz isotherme constitué du système d'Euler isotherme de la mécanique des fluides avec une force de Lorentz. Dans cette étude, les champs magnétiques et électriques seront donnés, sachant que nous gardons à l'esprit que dans une étude plus réaliste ceux-ci doivent être donnés par les équations de Maxwell. Après une mise à l'échelle convenable, le système d'Euler-Lorentz isotherme en régime de dérive s'écrit :

$$\partial_t n_\tau + \nabla \cdot (n_\tau u_\tau) = 0, \quad (8.2.26)$$

$$\tau \left[ \partial_t (n_\tau u_\tau) + \nabla \cdot (n_\tau u_\tau \otimes u_\tau) \right] + T \nabla n_\tau = n_\tau (E + u_\tau \times B), \quad (8.2.27)$$

où  $n_\tau$ ,  $u_\tau$  et  $T$  sont la densité, la vitesse et la température des ions, respectivement. Nous ne détaillerons pas l'adimensionnement. Pour plus de précisions nous renvoyons à ([71, 38, 67]). La limite de dérive du

système d'Euler isotherme conduit à

$$\partial_t n + \nabla \cdot (n u) = 0, \quad (8.2.28)$$

$$T \nabla n = n (E + u \times B). \quad (8.2.29)$$

On remarque au passage que dans la limite de bas Mach classique, le terme de Lorentz est absent et on obtient bien que la limite est isobare. Dans le cas présent, les forces de pression équilibrent la force de Lorentz.

La partie perpendiculaire de la vitesse est donné par la relation algébrique

$$n u_{\perp} = \frac{1}{B} \mathbf{b} \times (T \nabla n - n E), \quad (8.2.30)$$

tandis que la projection sur la direction parallèle à la vitesse donne

$$T \nabla_{\parallel} n - n E_{\parallel} = 0.$$

L'équation précédente peut alors être réécrite ([71])

$$-\nabla_{\parallel} (\nabla_{\parallel} \cdot (n u_{\parallel})) = \partial_t \left( \frac{n E_{\parallel}}{T} \right) - \partial_t b \cdot \nabla n + \nabla_{\parallel} \nabla_{\perp} \cdot (n u_{\perp}). \quad (8.2.31)$$

La limite de dérive est constituée de (8.2.28, 8.2.30, 8.2.31). On constate alors que cette limite de dérive est une limite singulière. En effet, à la limite, certaines équations changent de nature : la vitesse est donnée dans (8.2.27) par une équation d'évolution de type hyperbolique tandis qu'à la limite, la composante perpendiculaire de la vitesse s'exprime par une relation algébrique alors que la vitesse parallèle est le résultat d'une équation elliptique. Ainsi pour obtenir un schéma AP, il est essentiel de "régulariser la perturbation" i.e. de reformuler le système d'Euler-Lorentz de telle sorte que les équations limites pour la vitesse apparaissent de manière explicite. C'est ce que l'on appelle l'étape de reformulation. Nous ne la détaillerons pas dans le cas présent et on renvoie à ([71, 38, 67]).

**Définition 8.2.11.** *Le schéma AP est le schéma défini par :*

$$\begin{aligned} \frac{n^{m+1} - n^m}{\Delta t} + \nabla \cdot (n u)^{m+1} &= 0, \\ \tau \left[ \frac{(n u)^{m+1} - (n u)^m}{\Delta t} + \nabla \cdot (n u \otimes u)^m \right] + T (\nabla n^{\#})^{m+1} &= n^m E^{m+1} + (n u)^{m+1} \times B^{m+1}, \end{aligned}$$

$$\text{où } (\nabla n^{\#})^{m+1} = (\nabla n^m)_{\perp}^{m+1} + (\nabla n^{m+1})_{\parallel}^{m+1} b^{m+1}.$$

Comme dans ([71], [38]), le schéma AP est comparé au schéma semi-discret classique pour le modèle d'Euler-Lorentz suivant :

**Définition 8.2.12.** *Le schéma classique semi-discret est défini par :*

$$\begin{aligned} \frac{n^{m+1} - n^m}{\Delta t} + \nabla \cdot (n u)^m &= 0, \\ \tau \left[ \frac{(n u)^{m+1} - (n u)^m}{\Delta t} + \nabla \cdot (n u \otimes u)^m \right] + T (\nabla n)^m &= n^m E^{m+1} + (n u)^{m+1} \times B^{m+1}. \end{aligned}$$

## 8.2.2 Résultats numériques pour Euler-Lorentz en régime de dérive

On valide dans cette partie le schéma AP pour le système d'Euler-Lorentz. La validation dans ([38]) s'effectue sur deux cas tests, le premier pour un champ magnétique oblique uniforme, le second pour un champ magnétique non uniforme. Nous ne présenterons que les résultats du second car ils sont plus généraux et donc plus significatifs. Dans les deux cas, le champ électrique  $E = (0, 0, B_x + B_y)$ , où  $B_x$  et  $B_y$  sont les composantes du champ magnétique. La condition initiale est définie par la donnée uniforme :  $n = 1$ ,  $(n u)_x = 1$ ,  $(n u)_y = -1$  et  $(n u)_z = 0$  qui définit une solution stationnaire du système d'Euler-Lorentz. Une perturbation locale d'ordre  $\tau$  est alors appliquée à cet état stationnaire et l'évolution du système est comparée pour les schémas AP et classique. On distingue alors deux situations opposées :

- *Le cas résolu* : Le pas de temps est suffisamment petit pour assurer la condition de stabilité du schéma.
- *Le cas non résolu* : Le pas de temps ne permet pas de capturer les variations de temps rapides mais assure au moins la stabilité du schéma AP.

Les résultats obtenus pour le schéma AP et le schéma classique sont comparés à la figure 8.4 et montrent des résultats comparables. On se place ensuite dans le cas non résolu pour lequel le schéma classique est instable. Par contre le schéma AP fournit des résultats stables. Par ailleurs, étant donné que les conditions initiales ne sont pas des solutions stationnaires d'Euler-Lorentz, on vérifie que les résultats donnés par le schéma AP correspondent au bon régime. Ainsi dans [38] on montre que la différence entre les résultats obtenus en perturbant ou en ne perturbant pas les conditions initiales diffèrent de  $10^{-10}$  pour la densité et de  $10^{-6}$  pour l'impulsion. Cette différence avec la valeur  $\tau = 10^{-9}$  s'explique par l'accumulation des erreurs d'arrondis au cours de la simulation.

### 8.3 Problème diffusif anisotrope non linéaire ([39])

Le but de ce travail est la construction d'un schéma numérique pour un problème de diffusion anisotrope non linéaire. Ce travail est motivé par les applications pour les plasmas fortement magnétisés plus particulièrement pour le modèle d'Euler-Lorentz en régime de bas Mach. On considère plus précisément le modèle suivant :

$$\begin{cases} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_{\tau}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \frac{\nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau} - \mathbf{S}_{\tau}}{\tau} \right) + g_{\tau}(p_{\tau}) = f_{\tau}, & \text{sur } \Omega, \\ \left( H_{\tau}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \frac{\nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau} - \mathbf{S}_{\tau}}{\tau} \right) \cdot \nu \equiv 0, & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (8.3.32)$$

Dans ce système,  $\Omega$  est un sous-ensemble borné de  $\mathbb{R}^d$  ( $d = 1, 2, 3$ ),  $\tau \geq 0$  est un paramètre donné, pour tout  $\mathbf{x} \in \partial\Omega$ ,  $\nu = \nu(\mathbf{x})$  représente la normale extérieure.  $H_{\tau} : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}_+^*$ ,  $\mathbf{b} : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^d - \{0\}$ ,  $f_{\tau} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\mathbf{S}_{\tau} : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^d$  sont donnés et l'inconnue du problème est la fonction  $p_{\tau} : \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ . Finalement, on suppose que pour tout  $\tau$ , la fonction  $p \mapsto g_{\tau}(p)$  est strictement croissante et peut être non linéaire.

La limite  $\tau \rightarrow 0$  pour le problème (8.3.32) entraîne

$$\begin{cases} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_0(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} p_0 - \mathbf{S}_0) \right) = 0, & \text{sur } \Omega, \\ \left( H_0(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} p_0 - \mathbf{S}_0) \right) \cdot \nu \equiv 0, & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \quad (8.3.33)$$

Cette limite est alors singulière car la solution de ce système n'est pas unique. Ainsi une discrétisation classique du problème de diffusion (8.3.32) est mal conditionnée pour  $\tau$  petit.

#### 8.3.1 Cadre linéaire

On suppose que  $(g_{\tau})_{\tau \geq 0}$  est de la forme  $g_{\tau}(p)(\mathbf{x}) = \lambda_{\tau} p(\mathbf{x})$ , où  $\lambda_{\tau} > 0$  est une constante. Le problème de diffusion (8.3.32) s'écrit alors

$$\begin{cases} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_{\tau}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau} - \mathbf{S}_{\tau}) \right) + \tau \lambda_{\tau} p_{\tau} = \tau f_{\tau}, & \text{sur } \Omega, \\ \left( H_{\tau}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau} - \mathbf{S}_{\tau}) \right) \cdot \nu \equiv 0, & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (8.3.34)$$

La limite  $\tau \rightarrow 0$  du problème de perturbation singulière (8.3.34) vérifie

$$\begin{cases} -\lim_{\tau \rightarrow 0} \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_{\tau}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \frac{\nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau} - \mathbf{S}_{\tau}}{\tau} \right) + \lambda_0 p_0 = f_0, & \text{sur } \Omega, \\ \left( H_0(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} p_0 - \mathbf{S}_0) \right) \cdot \nu \equiv 0, & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (8.3.35)$$

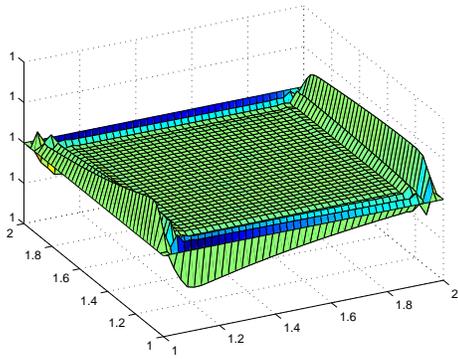
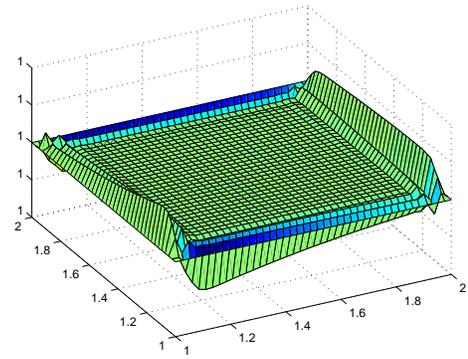
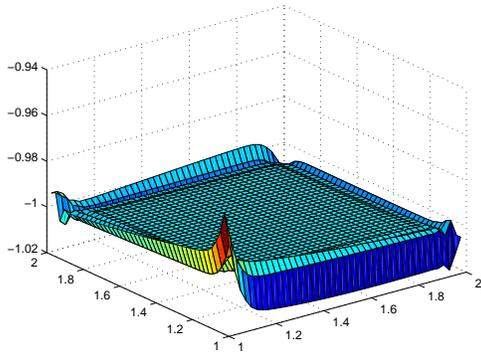
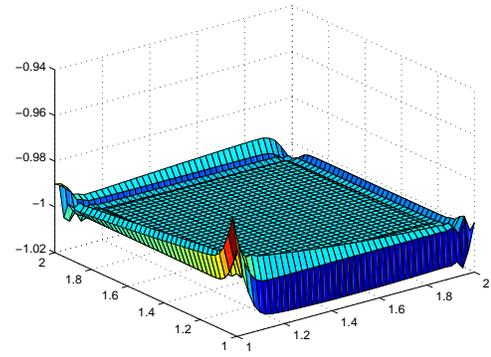
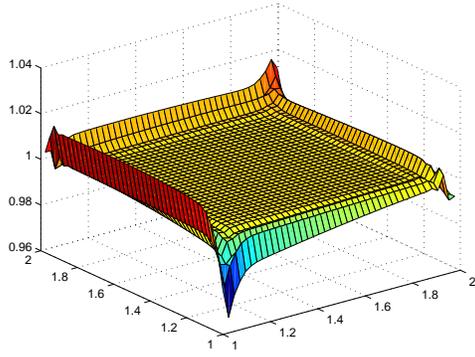
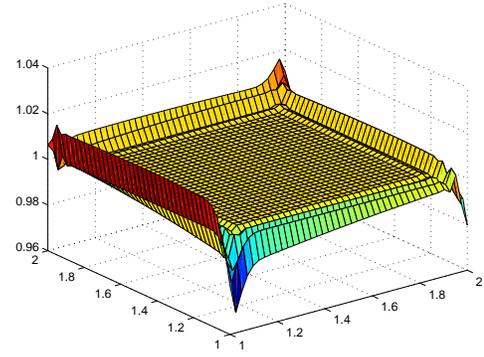
(a)  $n$  (Schéma AP)(b)  $n$  (Schéma classique)(c)  $nu_x$  (Schéma AP)(d)  $nu_x$  (Schéma classique)(e)  $nu_y$  (Schéma AP)(f)  $nu_y$  (Schéma classique)

FIG. 8.4 – Cas test pour Euler-Lorentz pour un champ magnétique non uniforme dans le cas résolu à  $t = 3.95 \cdot 10^{-6}$  s : densité ( $n$ ) et moment ( $nu_x, nu_y$ ) calculé avec le schéma AP (gauche) et le schéma classique (droite) pour  $\tau = 10^{-9}$  et  $\Delta x = \Delta y = 1/40$ .

L'équation précédente admet une solution sous l'hypothèse

$$H_\tau (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b})(\nabla_{\mathbf{x}} p_\epsilon - \mathbf{S}_\tau) = \mathcal{O}(\tau), \quad (8.3.36)$$

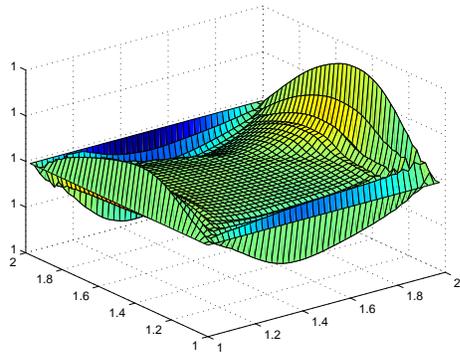
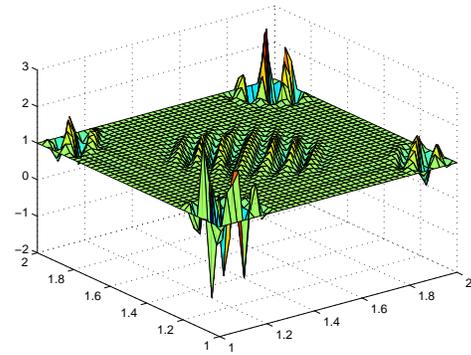
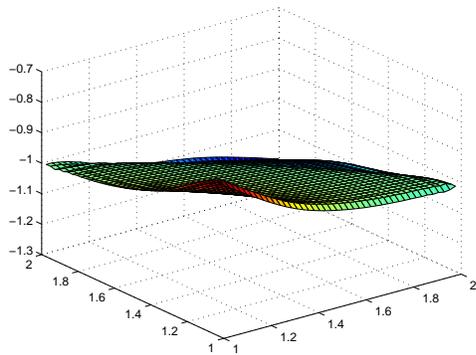
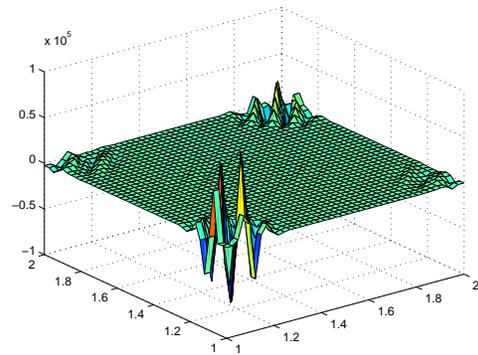
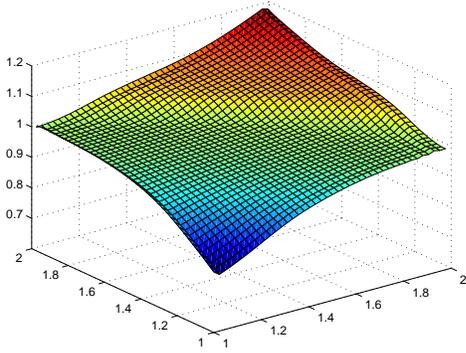
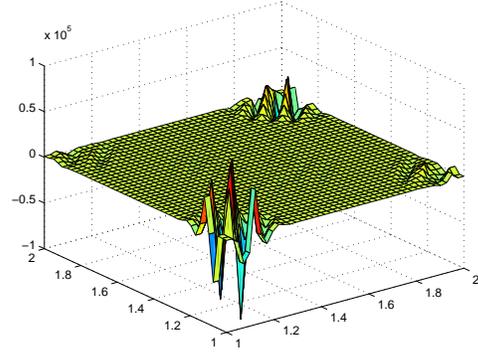
(a)  $n$  (schéma AP)(b)  $n$  (schéma classique)(c)  $nu_x$  (schéma AP)(d)  $nu_x$  (schéma classique)(e)  $nu_y$  (schéma AP)(f)  $nu_y$  (schéma classique)

FIG. 8.5 – Densité ( $n$ ) et moment ( $nu_x, nu_y$ ) pour Euler-Lorentz calculés au temps  $t = 3.95 \cdot 10^{-5}$  s pour un champ magnétique non uniforme dans le cas non résolu : pour le schéma AP (gauche) et le schéma classique (droite) pour  $\tau = 10^{-9}$  et  $\Delta x = \Delta y = 1/40$ .

qui doit être remplie par la méthode numérique. On introduit alors les espaces de Sobolev suivants afin de pouvoir écrire notre principe variationnel

$$V = \{p \in L^2(\Omega) : \mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} p \in L^2(\Omega)\}, W = \{q \in L^2(\Omega) : \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{b}q) \in L^2(\Omega)\},$$

$$W_0 = \{q \in W : (\mathbf{b}q) \cdot \nu \equiv 0 \text{ sur } \partial\Omega\}.$$

Dans le cas présent, les fonctions constantes le long des lignes de champ sont données par

$$K = \{ \pi \in V : \mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \pi = 0 \text{ sur } \Omega \}.$$

On utilise à nouveau la décomposition de la solution de (8.3.34) entre sa moyenne et sa fluctuation. On établit alors un théorème analogue au théorème 8.1.1 où les rôles de  $\mathbf{b} \cdot \nabla$  et  $\nabla \cdot (\mathbf{b} \cdot)$  sont inversés. Ainsi, on a l'unique décomposition  $p_\tau = \pi_\tau + q_\tau$ ,  $\pi_\tau \in K$ ,  $q_\tau \in K^\perp$  pour tout  $\tau \geq 0$ . On établit maintenant une équation pour  $\pi_\tau$  et une équation pour  $q_\tau$  qui soit bien posées pour tout  $\tau$ , incluant  $\tau = 0$ . Ainsi, la présente décomposition appliquée à (8.3.34) conduit à

$$\begin{cases} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_\tau (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} q_\tau - \mathbf{S}_\tau) \right) + \tau \lambda_\tau (\pi_\tau + q_\tau) = \tau f_\tau, & \text{sur } \Omega, \\ \left( H_\tau (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} q_\tau - \mathbf{S}_\tau) \right) \cdot \nu \equiv 0, & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (8.3.37)$$

On considère alors la formulation variationnelle de (8.3.37) et on choisit successivement les fonctions tests dans  $K$  et  $K^\perp$ . Ainsi

$$\pi_\tau = \frac{1}{\lambda_\tau} [f_\tau + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{b} h_\tau)]. \quad (8.3.38)$$

où  $h_\tau$  est solution d'un problème elliptique avec conditions de Dirichlet. On remarque au passage que contrairement au problème (8.1.8), (8.3.38) n'est pas un problème raide.

De même que dans la sous-section 8.1,  $q_\tau$  s'obtient après avoir résolu un problème d'ordre 4 de type bilaplacien. Cette procédure se généralise à la situation importante pour la mise en place de l'algorithme de Gummel où  $g_\tau(p)(\mathbf{x}) = G_\tau(\mathbf{x}) p(\mathbf{x})$ . Ainsi, ce cas est traité en se plaçant dans l'espace à poids

$$L^2(\Omega; G_\tau) = \left\{ p : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \|p\|_{L^2(\Omega; G_\tau)}^2 = \int_{\Omega} G_\tau(\mathbf{x}) |p(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} < +\infty \right\}.$$

et les espaces de Sobolev pondérés pour écrire la formulation variationnelle

$$\begin{aligned} V_\tau &= \{ p \in L^2(\Omega; G_\tau) : \mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} p \in L^2(\Omega; G_\tau) \}, \\ W_\tau &= \{ q \in L^2(\Omega; G_\tau) : \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (G_\tau \mathbf{b} q) \in L^2(\Omega; G_\tau) \}, \\ W_{0,\tau} &= \{ q \in W_\tau : (G_\tau \mathbf{b} q) \cdot \nu \equiv 0 \text{ sur } \partial\Omega \}. \end{aligned}$$

### 8.3.2 Linéarisation du problème non linéaire

On considère maintenant (8.3.32) dans le cas général lorsque la fonction  $p \mapsto g_\tau(p)$  est non linéaire. Du fait de cette non linéarité, la décomposition orthogonale ne peut pas être utilisée. On linéarise alors l'équation de diffusion (8.3.32) par un algorithme de Gummel ([111]). Cette méthode itérative consiste à approximer la solution  $p_\tau$  par une suite  $(p_{\tau,N})_{N \geq 0}$  définie par

$$p_{\tau,N+1} = p_{\tau,N} + \delta_{\tau,N}, \quad (8.3.39)$$

et initialisée avec un  $p_{\tau,0}$  arbitraire.  $\delta_{\tau,N}$  peut être vu comme une petite correction de  $p_{\tau,N}$  afin d'obtenir  $p_{\tau,N+1}$ . Ainsi, en supposant que  $p_{\tau,N+1}$  est solution de (8.3.32), on a

$$\begin{cases} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_\tau (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \frac{\nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau,N} + \nabla_{\mathbf{x}} \delta_{\tau,N} - \mathbf{S}_\tau}{\tau} \right) \\ \quad + g_\tau(p_{\tau,N}) + \delta_{\tau,N} g'_\tau(p_{\tau,N}) + \mathcal{O}(\delta_{\tau,N}^2) = f_\tau, & \text{sur } \Omega, \\ \left( H_\tau (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \frac{\nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau,N} + \nabla_{\mathbf{x}} \delta_{\tau,N} - \mathbf{S}_\tau}{\tau} \right) \cdot \nu \equiv 0, & \text{sur } \partial\Omega. \end{cases} \quad (8.3.40)$$

En négligeant le second terme en  $\delta_{\tau,N}$ , on obtient un problème de diffusion pour  $\delta_{\tau,N}$  qui s'écrit

$$\begin{cases} -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_\tau (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} \delta_{\tau,N} - \mathbf{S}_{\tau,N}) \right) + \tau G_{\tau,N} \delta_{\tau,N} = \tau f_{\tau,N}, & \text{sur } \Omega, \\ \left( H_\tau (\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) (\nabla_{\mathbf{x}} \delta_{\tau,N} - \mathbf{S}_{\tau,N}) \right) \cdot \nu \equiv 0, & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \quad (8.3.41)$$

où  $G_{\tau,N} = g'_{\tau}(p_{\tau,N})$ ,  $f_{\tau,N} = f_{\tau} - g_{\tau}(p_{\tau,N})$ ,  $\mathbf{S}_{\tau,N} = \mathbf{S}_{\tau} - \nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau,N}$ .

Cette suite de problème linéarisé peut être obtenue via des itérations classiques de Newton pour résoudre  $F_{\tau}(p_{\tau}) = 0$ , où  $F_{\tau}$  est défini par

$$F_{\tau}(p) = -\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( H_{\tau}(\mathbf{b} \otimes \mathbf{b}) \frac{\nabla_{\mathbf{x}} p - \mathbf{S}_{\tau}}{\tau} \right) + g_{\tau}(p) - f_{\tau}.$$

### 8.3.3 Méthode numérique

On considère un maillage uniforme  $(x_i, y_j)$  défini par

$$x_i = x_{min} + i \Delta x, \quad y_j = y_{min} + j \Delta y, \quad \Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{N_x + 1}, \quad \Delta y = \frac{y_{max} - y_{min}}{N_y + 1},$$

et on écrit le domaine de simulation comme  $\Omega = [x_{-1/2}, x_{N_x+1/2}] \times [y_{-1/2}, y_{N_y+1/2}]$ . On considère les sous ensembles de  $\mathbb{Z}^2$  suivants :

$$\begin{aligned} I &= \{0, \dots, N_x\} \times \{0, \dots, N_y\}, \quad \bar{I} = \{-1, \dots, N_x + 1\} \times \{-1, \dots, N_y + 1\}, \\ I_* &= \{0, \dots, N_x - 1\} \times \{0, \dots, N_y - 1\}, \quad \bar{I}_* = \{-1, \dots, N_x\} \times \{-1, \dots, N_y\}, \end{aligned}$$

et la notation  $h = \max(\Delta x, \Delta y)$ .

On approxime  $p \mapsto \mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} p$  et  $p \mapsto \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{b} p)$ , de telle sorte que les approximations soient duales au sens discret. On initialise la boucle en calculant les quantités suivantes :

$$\begin{aligned} p_{\tau,0,i,j} &= p_{\tau,0}(x_i, y_j), \quad \forall (i, j) \in \bar{I}, \\ \mathbf{S}_{\tau,i+1/2,j+1/2} &= \mathbf{S}_{\tau}(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}), \quad \forall (i, j) \in \bar{I}_*, \\ f_{\tau,i,j} &= f_{\tau}(x_i, y_j), \quad \forall (i, j) \in I, \\ H_{\tau,i+1/2,j+1/2} &= H_{\tau}(x_{i+1/2}, y_{j+1/2}), \quad \forall (i, j) \in \bar{I}_*. \end{aligned}$$

Ainsi, la  $N^{eme}$  itération de l'algorithme de Gummel s'écrit :

– Etape 1 : On suppose que  $p_{\tau,N,i,j}$ , pour tout  $(i, j) \in \bar{I}$ , sont connus, on a alors

$$\begin{aligned} (\mathbf{b} \cdot \mathbf{S}_{\tau,N})_{i+1/2,j+1/2} &= (\mathbf{b} \cdot \mathbf{S}_{\tau} - \partial_h p_{\tau,N})_{i+1/2,j+1/2}, \quad \forall (i, j) \in \bar{I}_*, \\ f_{\tau,N,i,j} &= f_{\tau,i,j} - g_{\tau}(p_{\tau,N,i,j}), \quad \forall (i, j) \in I, \\ G_{\tau,N,i,j} &= g'_{\tau}(p_{\tau,N,i,j}), \quad \forall (i, j) \in I, \\ G_{\tau,N,i+1/2,j+1/2} &= g'_{\tau}(p_{\tau,N,i+1/2,j+1/2}), \quad \forall (i, j) \in \bar{I}_*, \end{aligned}$$

où  $p_{\tau,N,i+1/2,j+1/2} = \frac{1}{4}(p_{\tau,N,i+1,j+1} + p_{\tau,N,i+1,j} + p_{\tau,N,i,j+1} + p_{\tau,N,i,j})$ .

– Etape 2 : on calcule  $h_{\tau,N,i+1/2,j+1/2}$  et  $l_{\tau,N,i+1/2,j+1/2}$  pour tout  $(i, j) \in \bar{I}_*$  en résolvant

$$\begin{cases} -\left(\partial_h \left(\frac{1}{G_{\tau,N}} \partial_{h,*}(G_{\tau,N} h_{\tau,N})\right)\right)_{i+1/2,j+1/2} & \forall (i, j) \in I_*, \\ \qquad \qquad \qquad = \left(\partial_h \left(\frac{f_{\tau,N}}{G_{\tau,N}}\right)\right)_{i+1/2,j+1/2}, & \\ h_{\tau,N,i+1/2,j+1/2} = 0, & \forall (i, j) \in \bar{I}_* \setminus I_*, \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\left(\partial_h \left(\frac{1}{G_{\tau,N}} \partial_{h,*}(H_{\tau} L_{\tau,N})\right)\right)_{i+1/2,j+1/2} & \forall (i, j) \in I_*, \\ \qquad \qquad \qquad + \tau L_{\tau,N,i+1/2,j+1/2} = -\tau \left(\partial_h \left(\frac{f_{\tau,N}}{G_{\tau,N}}\right) - \mathbf{b} \cdot \mathbf{S}_{\tau,N}\right)_{i+1/2,j+1/2}, & \\ L_{\tau,N,i+1/2,j+1/2} = 0, & \forall (i, j) \in \bar{I}_* \setminus I_*, \end{cases}$$

et

$$\begin{cases} -\left(\partial_h\left(\frac{1}{G_{\tau,N}}\partial_{h,*}(G_{\tau,N}l_{\tau,N})\right)\right)_{i+1/2,j+1/2} & \forall (i,j) \in I_*, \\ = L_{\tau,N,i+1/2,j+1/2} - \mathbf{b}_{i+1/2,j+1/2} \cdot \mathbf{S}_{\tau,N,i+1/2,j+1/2}, & \forall (i,j) \in \bar{I}_* \setminus I_*, \\ l_{\tau,N,i+1/2,j+1/2} = 0, & \forall (i,j) \in \bar{I}_* \setminus I_*. \end{cases}$$

Cette étape correspond à la résolution des systèmes elliptiques successifs.  $l_{\tau,N,i+1/2,j+1/2}$  désigne l'approximation du multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte imposant d'être constant le long des lignes de champ.  $h_{\tau,N,i+1/2,j+1/2}$  est une approximation de la solution du problème en bilaplacien.

– Etape 3 : On calcule  $\delta_{\tau,N,i,j}$  pour tout  $(i,j) \in I$  en utilisant

$$\delta_{\tau,N,i,j} = \frac{1}{G_{\tau,N,i,j}} \left[ f_{\tau,N,i,j} + \left( \partial_{h,*}(G_{\tau,N}(h_{\tau,N} + l_{\tau,N})) \right)_{i,j} \right],$$

et on obtient  $p_{\tau,N+1,i,j}$  pour tout  $(i,j) \in I$ .

– Etape 4 : On calcule  $p_{\tau,N+1,i,j}$  pour tout  $(i,j) \in \bar{I} \setminus I$  d'après les conditions de bord

$$(\partial_h p_{\tau,N+1})_{i+1/2,j+1/2} - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{S}_{\tau})_{i+1/2,j+1/2} = 0, \quad \forall (i,j) \in \bar{I}_* \setminus I_*.$$

### 8.3.4 Résultats numériques pour le schéma AP

On valide les principales propriétés du schéma construit précédemment. Le point important est l'étude des propriétés de correction rapide de l'algorithme de Gummel.

On considère dans un premier temps (8.3.32) dans le cas linéaire avec  $g_{\tau}(p) = G_{\tau}(\mathbf{x})p(\mathbf{x})$ . Les simulations sont effectuées pour  $H_{\tau}$ ,  $G_{\tau}$  et  $\mathbf{b}$  donnés par

$$\begin{aligned} G_{\tau}(x,y) &= H_{\tau}(x,y) = 1 + \sin^2(x) \sin^2(y), \\ \mathbf{b} &= (\sin \theta, -\cos \theta) \quad \text{avec} \quad \theta(x,y) = \arctan\left(\frac{y}{x}\right). \end{aligned} \tag{8.3.42}$$

L'évolution de l'erreur relative  $p_{\tau} - p_{\tau,app}$  est représentée en échelle logarithmique à la figure 8.6(a) en fonction du pas d'espace  $h$  pour  $\tau = 10^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-9}$  et  $\tau = 0$ . Pour chaque valeur de  $\tau$ , les erreurs  $e_2$  et  $e_{\infty}$  décroissent linéairement en  $h$  avec une pente égale à 2. Cela est consistant avec les ordres des approximations de  $\mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}$  et  $\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{b} \cdot)$ .

Comme l'approximation numérique de  $\pi_{\tau}$  doit vérifier  $\mathbf{b} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \pi_{\tau} = 0$  au niveau discret, on teste l'évolution de  $\|\partial_h \pi_{\tau,app}\|_{\ell^p(I_*)} / \|p_{\tau}\|_{\ell^p(I)}$  pour  $p = 2, \infty$ . Cette quantité est représentée en échelle logarithmique en fonction du pas d'espace sur la figure 8.6(b) pour  $\tau = 10^{-1}$ ,  $\tau = 10^{-9}$  et  $\tau = 0$  et on constate se situe proche de la précision machine.

### 8.3.5 Convergence de l'algorithme de Gummel

On s'intéresse maintenant à la résolution du modèle non linéaire (8.3.32) et à la convergence de l'algorithme de Gummel. On note par  $(p_{\tau})_{\tau \geq 0}$  la solution analytique pour  $f_{\tau} = g_{\tau}(p_{\tau})$ ,  $\mathbf{S}_{\tau} = \nabla_{\mathbf{x}} p_{\tau}$ . On initialise l'algorithme par une perturbation de la solution du problème non linéaire,

$$p_{\tau,0}(x,y) = p_{\tau}(x,y) + \eta \max(0, 1 - \mu(x - x_0)^2 - \mu(y - y_0)^2), \tag{8.3.43}$$

où  $\eta$  est une constante proche de 0,  $(x_0, y_0) \in \Omega$  et  $\mu$  est une constante positive telle que  $p_{\tau,0} \equiv p_{\tau}$  sur un voisinage de  $\partial\Omega$ . On suppose que  $H_{\tau}$ ,  $g_{\tau}$  et  $\mathbf{b}$  sont donnés par

$$\begin{aligned} H_{\tau}(x,y) &= 1 + \cos^2(x) \cos^2(y), & g_{\tau}(p) &= p^6, \\ \mathbf{b} &= (\sin \theta, -\cos \theta), & \text{avec} \quad \theta(x,y) &= \arctan\left(\frac{y}{x}\right), \end{aligned} \tag{8.3.44}$$

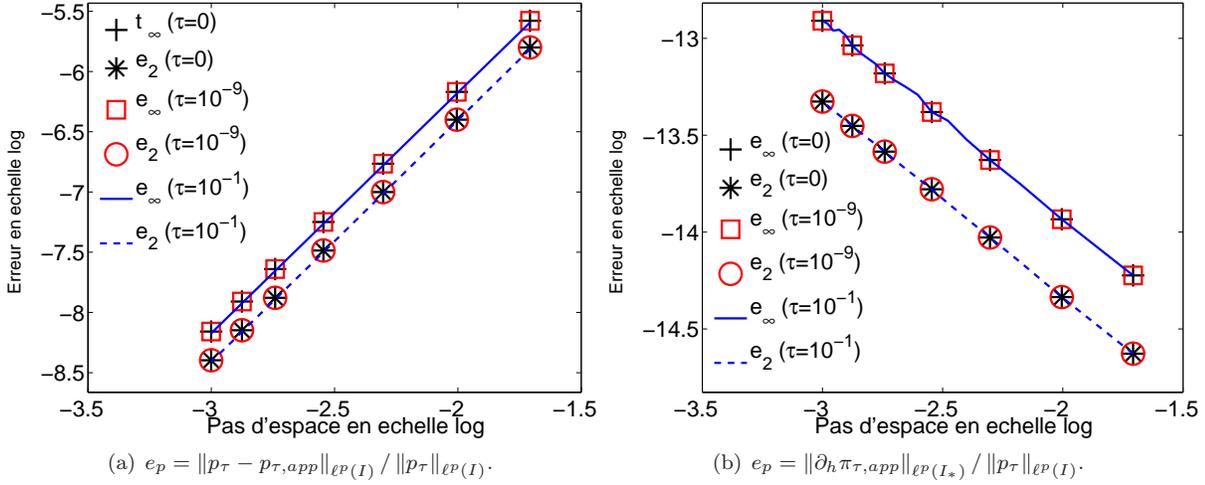


FIG. 8.6 – Erreur relative  $\|p_\tau - p_{\tau,app}\|_{\ell^p(I)} / \|p_\tau\|_{\ell^p(I)}$  (gauche) et du gradient parallèle  $\|\partial_h \pi_{\tau,app}\|_{\ell^p(I_*)} / \|p_\tau\|_{\ell^p(I)}$  (droite) en normes  $\ell^2$  et  $\ell^\infty$  en fonction du pas d'espace  $h$  lorsque  $G_\tau$ ,  $H_\tau$  et  $\mathbf{b}$  sont définis en (8.3.42) pour  $\tau = 1$ ,  $\tau = 10^{-9}$ ,  $\tau = 0$ .

et que la solution analytique  $p_\tau$  est une spline cubique de la forme

$$p_\tau(x, y) = 1 + S\left(\frac{x - x_{mid}}{L_x}\right) S\left(\frac{y - y_{mid}}{L_y}\right), \quad (8.3.45)$$

avec  $S$  définie par

$$S(z) = \begin{cases} \frac{1}{6}(2 - |z|^3), & \text{si } 1 \leq |z| \leq 2, \\ \frac{2}{3} - |z|^2 + \frac{1}{2}|z|^3, & \text{si } 0 \leq |z| < 1, \\ 0, & \text{sinon,} \end{cases} \quad (8.3.46)$$

et  $x_{mid} = \frac{1}{2}(x_{min} + x_{max})$ ,  $y_{mid} = \frac{1}{2}(y_{min} + y_{max})$ ,  $L_x = \frac{1}{10}(x_{max} - x_{min})$ ,  $L_y = \frac{1}{10}(y_{max} - y_{min})$ . Le domaine de simulation est  $\Omega = [1, 2] \times [1, 2]$  et on prend  $\mu = 60$ ,  $(x_0, y_0) = (\frac{3}{2}, \frac{3}{2})$ . La figure 8.7(a) montre l'évolution de l'erreur relative

$$E_{2,N} = \frac{\|p_\tau - p_{\tau,N,app}\|_{\ell^2(I)}}{\|p_\tau\|_{\ell^2(I)}},$$

en fonction de  $N$  où  $p_{\tau,N,app}$  représente l'approximation de  $p_\tau$  obtenue après  $N$  itérations. Ces simulations ont été réalisées avec différentes valeurs de  $\tau$  appartenant à  $\{10^{-1}, 10^{-12}, 0\}$ , pour les maillages uniformes  $M_{100}$  et  $M_{1000}$  et ont été initialisées avec la fonction  $p_{\tau,0}$  définie en (8.3.43) pour  $\eta = 0.1$ . Malgré la grande amplitude de la perturbation de  $p_\tau$  introduite à l'initialisation de Gummel, la méthode converge après un petit nombre d'itérations. En effet, pour les maillages  $M_{100}$  et  $M_{1000}$  et pour les valeurs de  $\tau$  considérées, le terme correcteur  $\delta_{\tau,N,app}$  décroît rapidement et atteint la précision machine après 4 itérations de Gummel. En même temps, l'erreur relative  $E_{2,N}$  décroît également et devient stable après un petit nombre d'itérations. Afin d'affiner ces résultats, on a résumé dans la Table 8.1 les valeurs de  $E_{p,N_f}$  ( $p = 1, 2, \infty$ ) où  $N_f = 4$ .  $N_f$  a été choisi tel que, pour tout  $N > N_f$ , l'erreur à la  $N^{eme}$  itération de Gummel soit stable. Ainsi, l'amplitude de  $\tau$  n'affecte pas l'efficacité de l'algorithme de Gummel.

Egalement, pour  $N$  suffisamment grand,  $\delta_{\tau,N,app}$  est de l'ordre de la précision machine et l'erreur relative  $E_{p,N}$  demeure stable. De plus, les figures 8.7 et la table 8.1 montrent que  $E_{p,N}$  décroît de manière quadratique.

On valide maintenant le caractère AP du schéma numérique. A cet effet, on considère  $g_\tau$ ,  $H_\tau$  et  $\mathbf{b}$  définis comme précédemment et  $p_\tau$  solution du problème (8.3.32) pour toute valeur de  $\tau$ . On prend pour

$\tau$	Erreur	$M_{100}$	$M_{200}$	$M_{500}$	$M_{1000}$
$10^{-1}$	$E_{1,N_f}$	$3.9452 \times 10^{-5}$	$9.8116 \times 10^{-6}$	$1.5673 \times 10^{-6}$	$3.9166 \times 10^{-7}$
	$E_{2,N_f}$	$1.0446 \times 10^{-4}$	$2.6188 \times 10^{-5}$	$4.1988 \times 10^{-6}$	$1.0505 \times 10^{-6}$
	$E_{\infty,N_f}$	$6.0730 \times 10^{-4}$	$1.5793 \times 10^{-4}$	$2.5942 \times 10^{-5}$	$6.5451 \times 10^{-6}$
$10^{-12}$	$E_{1,N_f}$	$3.9796 \times 10^{-5}$	$9.8969 \times 10^{-6}$	$1.5808 \times 10^{-6}$	$3.9504 \times 10^{-7}$
	$E_{2,N_f}$	$1.0496 \times 10^{-4}$	$2.6311 \times 10^{-5}$	$4.2184 \times 10^{-6}$	$1.0554 \times 10^{-6}$
	$E_{\infty,N_f}$	$6.1098 \times 10^{-4}$	$1.5885 \times 10^{-4}$	$2.6087 \times 10^{-5}$	$6.5815 \times 10^{-6}$
0	$E_{1,N_f}$	$3.9796 \times 10^{-5}$	$9.8969 \times 10^{-6}$	$1.5808 \times 10^{-6}$	$3.9504 \times 10^{-7}$
	$E_{2,N_f}$	$1.0496 \times 10^{-4}$	$2.6311 \times 10^{-5}$	$4.2184 \times 10^{-6}$	$1.0554 \times 10^{-6}$
	$E_{\infty,N_f}$	$6.1098 \times 10^{-4}$	$1.5885 \times 10^{-4}$	$2.6087 \times 10^{-5}$	$6.5815 \times 10^{-6}$

TAB. 8.1 – Erreur relative  $E_{p,N_f} = \|p_\tau - p_{\tau,N_f,app}\|_{\ell^p(I)} / \|p_\tau\|_{\ell^p(I)}$  ( $p = 1, 2, \infty$ ) pour  $H_\tau$  et  $\mathbf{b}$  variables,  $g_\tau(p) = p^6$ . Les simulations ont été réalisées pour des maillages uniformes  $M_k$ , ( $k = 100, 200, 500, 1000$ ), après 4 itérations de Gummel et différentes valeurs de  $\tau$ .

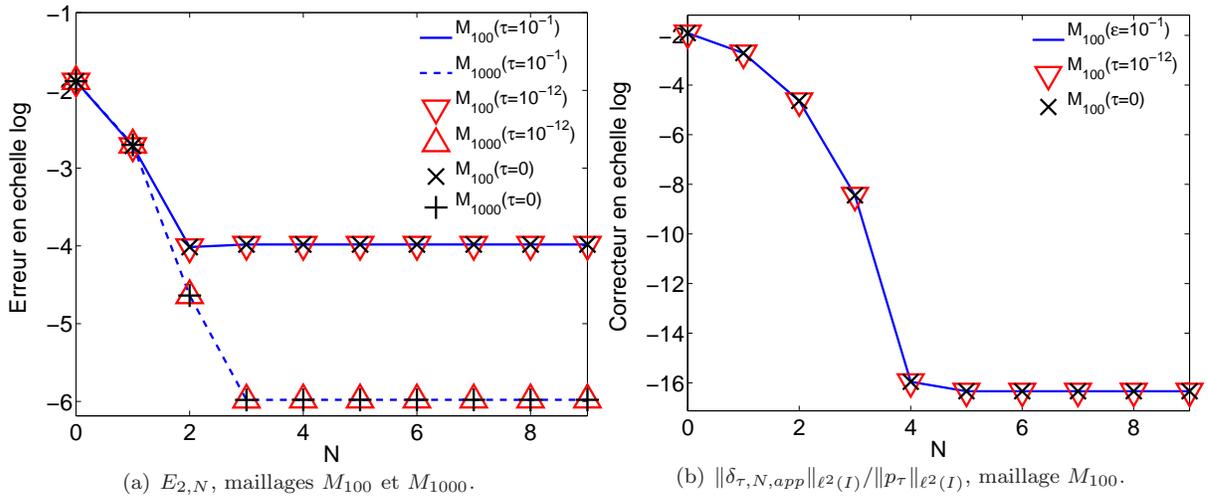


FIG. 8.7 – Convergence de l’algorithme de Gummel : évolution en échelle logarithmique de l’erreur relative  $E_{2,N} = \|p_\tau - p_{\tau,N_f,app}\|_{\ell^2(I)} / \|p_\tau\|_{\ell^2(I)}$  (gauche) pour les maillages  $M_{100}$  et  $M_{1000}$  et de  $\|\delta_{\tau,N,app}\|_{\ell^2(I)} / \|p_\tau\|_{\ell^2(I)}$  (droite) pour le maillage  $M_{100}$  en fonction du nombre d’itérations.  $H_\tau$  et  $\mathbf{b}$  sont non uniformes et définis par (8.3.44).

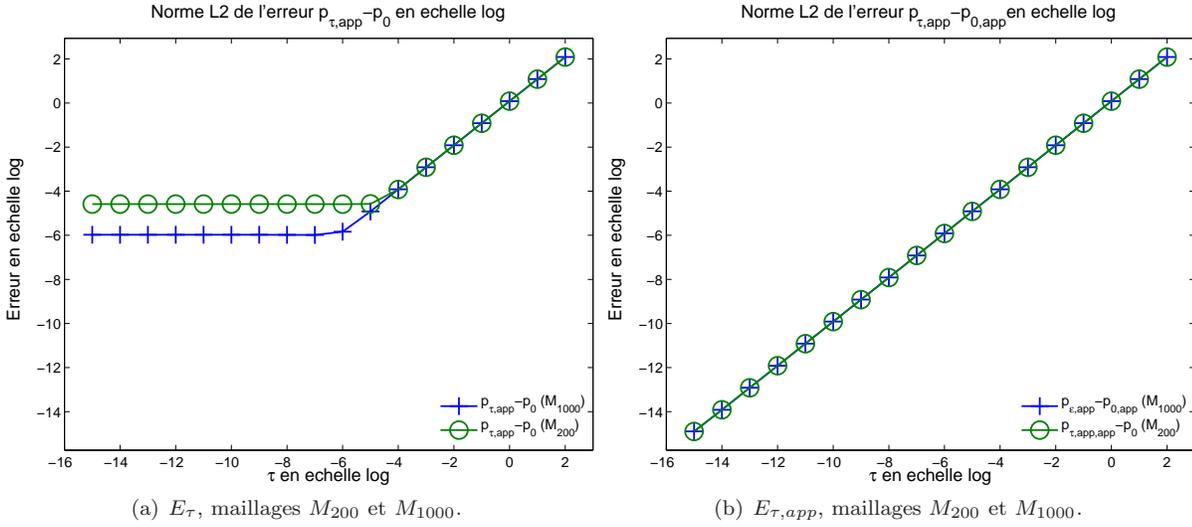


FIG. 8.8 – Evolution en échelle logarithmique de  $E_\tau = \|p_{\tau,app} - p_0\|_{\ell^2(I)} / \|p_0\|_{\ell^2(I)}$  (gauche) et de  $E_{\tau,app} = \|p_{\tau,app} - p_{0,app}\|_{\ell^2(I)} / \|p_0\|_{\ell^2(I)}$  (droite) en fonction de  $\tau$  pour de maillages uniformes  $200 \times 200$  ( $M_{200}$ ) et  $1000 \times 1000$  ( $M_{1000}$ ) pour  $\mathbf{b}$ ,  $H_\tau$ ,  $g_\tau$  définis en (8.3.44) .

condition initiale  $p_{\tau,0}$  défini en (8.3.43) et on obtient  $p_{\tau,app} = p_{\tau,N_f,app}$  avec  $N_f$  itérations de Gummel,  $N_f \in \mathbb{N}^*$  étant suffisamment grand pour que  $\delta_{\tau,N_f,app}$  soit de l'ordre de la précision machine. On a représenté à la figure 8.8(a), l'erreur relative

$$E_\tau = \frac{\|p_{\tau,app} - p_0\|_{\ell^2(I)}}{\|p_0\|_{\ell^2(I)}},$$

en échelle logarithmique en fonction de  $\tau$  lorsque la convergence pour la méthode de Gummel est atteinte. On identifie alors deux régimes. Le premier concerne les grandes valeurs de  $\tau$  où cette erreur décroît est le second correspond à la situation où  $\tau$  tend vers 0. Pour ce dernier, on observe un plateau qui dépend du pas d'espace. Pour expliquer cette observation, on utilise la décomposition

$$p_{\tau,app} - p_0 = p_{\tau,app} - p_{0,app} + p_{0,app} - p_0.$$

Cela implique alors que  $E_\tau \leq E_{\tau,app} + e_0$ , où  $e_0 = \|p_{0,app} - p_0\|_{\ell^2(I)} / \|p_0\|_{\ell^2(I)}$  représente l'erreur commise par le schéma AP pour  $\tau = 0$  et  $E_{\tau,app} = \|p_{\tau,app} - p_{0,app}\|_{\ell^2(I)} / \|p_0\|_{\ell^2(I)}$ . L'erreur  $E_\tau$  décroît avec  $\tau$  tant que l'erreur  $e_0$  reste négligeable devant  $E_{\tau,app}$ . En dessous d'une certaine valeur de  $\tau$ , l'erreur totale peut être assimilée à  $e_0 = \mathcal{O}(h^2)$ . Ainsi,  $p_{\tau,app}$  converge vers  $p_0$  lorsque  $\tau$  et  $h$  tendent vers 0. Cela permet de conclure au caractère AP du schéma.

## 8.4 Généralisation au système d'Euler-Lorentz bi-fluide ([37])

On considère le modèle d'Euler-Lorentz pour décrire le plasma considéré comme le d'une espèce d'ion et une espèce d'électron. Ce modèle s'écrit

$$\begin{cases} \partial_t n_\alpha + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_\alpha = 0, \\ \partial_t \mathbf{q}_\alpha + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \frac{\mathbf{q}_\alpha \otimes \mathbf{q}_\alpha}{n_\alpha} \right) + \frac{1}{m_\alpha} \nabla_{\mathbf{x}} p_\alpha = \mathbf{q}_\alpha \frac{e}{m_\alpha} (n_\alpha \mathbf{E} + \mathbf{q}_\alpha \times \mathbf{B}), \\ \partial_t e_\alpha + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \frac{e_\alpha + p_\alpha}{n_\alpha} \mathbf{q}_\alpha \right) = \mathbf{q}_\alpha e \mathbf{E} \cdot \mathbf{q}_\alpha, \\ \alpha \in \{i, e\}, \end{cases} \quad (8.4.47)$$

et le couplage s'effectue via l'équation de quasi-neutralité  $n_i = n_e = n$ . Dans ce modèle bifluide,  $n_i$ ,  $\mathbf{q}_i$ ,  $e_i$  et  $p_i$  (resp.  $n_e$ ,  $\mathbf{q}_e$ ,  $e_e$  et  $p_e$ ) représentent la densité, l'impulsion, l'énergie totale et la pression pour les ions (resp. électrons). Les constantes physiques  $m_i$ ,  $m_e$ , et  $e$  représentent la masse d'un ion, d'un électron et la valeur absolue de la charge d'un électron. Le champ magnétique  $\mathbf{B}$  est toujours donné tandis que  $\mathbf{E}$  dérive d'un potentiel  $\phi$  selon  $\mathbf{E} = -\nabla_{\mathbf{x}}\phi$ .

On suppose alors que les ions et les électrons sont isothermes et que chaque pression  $p_i$  et  $p_e$  est donnée par  $p_i = k_B T_i n_i$ ,  $p_e = k_B T_e n_e$ , où les températures  $T_i$  et  $T_e$  sont constantes.

Ainsi après une mise à l'échelle convenable, le modèle étudié se ramène au modèle adimensionné suivant pour  $\alpha \in \{i, e\}$ ,

$$\partial_t n^\tau + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_\alpha^\tau = 0, \quad (8.4.48)$$

$$\epsilon_\alpha \tau \left[ \partial_t \mathbf{q}_\alpha^\tau + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \frac{\mathbf{q}_\alpha^\tau \otimes \mathbf{q}_\alpha^\tau}{n^\tau} \right) \right] + T_\alpha \nabla_{\mathbf{x}} n^\tau = \mathbf{q}_\alpha \left[ -n^\tau \nabla_{\mathbf{x}} \phi^\tau + \mathbf{q}_\alpha^\tau \times \mathbf{B} \right], \quad (8.4.49)$$

où  $\tau$  est le rapport entre la gyro-période des ions et le temps caractéristique mais aussi la racine carrée du nombre de Mach des ions.  $T_i = 1$ ,  $\epsilon_\alpha$  et  $\mathbf{q}_\alpha$  sont définis par

$$\epsilon_\alpha = \begin{cases} 1, & \text{si } \alpha = i, \\ \epsilon, & \text{si } \alpha = e, \end{cases} \quad \mathbf{q}_\alpha = \begin{cases} 1, & \text{si } \alpha = i, \\ -1, & \text{si } \alpha = e, \end{cases}$$

où  $\epsilon$  est le rapport entre la masse des électrons et celle des ions. Finalement,  $n^\tau$ ,  $\mathbf{q}_i^\tau$ ,  $\mathbf{q}_e^\tau$  et  $\phi^\tau$  correspondent à la densité des ions et des électrons, à la quantité de mouvement des ions, à la quantité de mouvement des électrons, au potentiel électrique. Lorsque  $\tau$  converge vers 0 dans (8.4.48), on obtient pour  $\alpha \in \{i, e\}$ ,

$$\partial_t n^0 + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_\alpha^0 = 0, \quad (8.4.50)$$

$$T_\alpha \nabla_{\mathbf{x}} n^0 = \mathbf{q}_\alpha \left[ -n^0 \nabla_{\mathbf{x}} \phi^0 + \mathbf{q}_\alpha^0 \times \mathbf{B} \right], \quad (8.4.51)$$

où la partie parallèle de  $\mathbf{q}_i^0$  et  $\mathbf{q}_e^0$  sont implicites. Cette limite est alors singulière pour les mêmes raisons que pour le cas mono-fluide développé précédemment. Le modèle limite ainsi que le modèle d'Euler-Lorentz doivent donc à nouveau être reformulés. Nous renvoyons donc à ([37, 67]) pour plus de détails.

### 8.4.1 Schémas AP pour le modèle bifluide d'Euler-Lorentz régularisé

On propose une semi-discrétisation de (8.4.48, 8.4.49) en temps qui soit consistante avec le problème reformulé. En procédant ainsi, on assure que l'approximation calculée par cette méthode numérique sera consistante avec la reformulation du problème (8.4.48, 8.4.49) ([37]) et avec (8.4.50, 8.4.51) lorsque  $\tau$  tend vers 0. Pour cela, on considère une semi-discrétisation en temps basée sur une semi-implication des flux de masse et d'une implication totale des gradients de pression ainsi que de la force de Lorentz. Cette méthode diffère de celle proposée précédemment ([38], [71]) où le flux de masse et la force de Lorentz sont totalement implicites tandis que le gradient de pression est semi-implicite. Cependant, la construction directe d'un schéma AP pour le modèle (8.4.48) en implicitant les flux de masse parallèles ainsi que les termes de Lorentz et de pression, conduit à un problème elliptique mal posé pour le calcul du potentiel électrique. Afin d'obtenir un problème bien posé en  $\phi^{\tau, m+1}$ , on introduit une perturbation dans les équations de conservation de la masse (8.4.48). Pour cela, on introduit les termes perturbatifs  $C_i \partial_t \phi$  et  $C_e \partial_t \phi$ . Le nouveau modèle s'écrit alors pour  $\alpha \in \{i, e\}$ ,

$$\begin{cases} \partial_t n^\tau + C_\alpha \partial_t \phi^\tau + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_\alpha^\tau = 0, \\ \epsilon_\alpha \tau \left[ \partial_t \mathbf{q}_\alpha^\tau + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \frac{\mathbf{q}_\alpha^\tau \otimes \mathbf{q}_\alpha^\tau}{n^\tau} \right) \right] + T_\alpha \nabla_{\mathbf{x}} n^\tau = \mathbf{q}_\alpha \left[ -n^\tau \nabla_{\mathbf{x}} \phi^\tau + \mathbf{q}_\alpha^\tau \times \mathbf{B} \right], \end{cases}$$

$C_i, C_e > 0$  étant deux petits paramètres fixés choisis ultérieurement.

**Définition 8.4.13.** On désignera par schéma AP pour le problème (8.4.52) le schéma suivant

$$\begin{aligned} \frac{n^{\tau,m+1} - n^{\tau,m}}{\Delta t} + C_\alpha \frac{\phi^{\tau,m+1} - \phi^{\tau,m}}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot ((\mathbf{b}^{m+1} \otimes \mathbf{b}^{m+1}) \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1}) \\ + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot ((\mathbb{I} - \mathbf{b}^{m+1} \otimes \mathbf{b}^{m+1}) \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m}) = 0, \end{aligned} \quad (8.4.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1} - \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m}}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \frac{\mathbf{q}_\alpha^{\tau,m} \otimes \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m}}{n^{\tau,m}} \right) + \frac{T_\alpha}{\epsilon_\alpha \tau} \nabla_{\mathbf{x}} n^{\tau,m+1} \\ = \frac{\mathbf{q}_\alpha}{\epsilon_\alpha \tau} \left[ -n^{\tau,m+1} \nabla_{\mathbf{x}} \phi^{\tau,m+1} + \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1} \times \mathbf{B}^{m+1} \right]. \end{aligned} \quad (8.4.53)$$

On remarque que dans 8.4.52, le flux de masse est implicite dans la direction parallèle aux lignes de champ et que le terme de pression dans 8.4.53 est totalement implicite. Ce dernier élément permet notamment de garantir l'état d'équilibre donné par la limite de dérive à chaque pas de temps.

En séparant les parties parallèles et perpendiculaires de (8.4.53), on obtient une relation pour  $(\mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1})_\perp^{m+1}$  et une autre pour  $(\mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1})_\parallel^{m+1}$ . On injecte ensuite l'expression de  $(\mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1})_\parallel^{m+1}$  dans (8.4.53) pour  $\alpha = e, i$ . Ainsi sous les hypothèses

$$C_i + \epsilon C_e = 0 \quad \text{et} \quad C_i - \frac{\epsilon}{T_e} C_e = C, \quad (8.4.54)$$

avec  $C > 0$  donné, on montre que  $n^{\tau,m+1}$  et  $\phi^{\tau,m+1}$  satisfont les équations de diffusion :

$$-\nabla_{\mathbf{x}} \cdot ((\mathbf{b}^{m+1} \otimes \mathbf{b}^{m+1}) \nabla_{\mathbf{x}} n^{\tau,m+1}) + \tau \lambda_1 n^{\tau,m+1} = \tau R^{\tau,m+1}, \quad (8.4.55)$$

$$-\nabla_{\mathbf{x}} \cdot (n^{\tau,m+1} (\mathbf{b}^{m+1} \otimes \mathbf{b}^{m+1}) \nabla_{\mathbf{x}} \phi^{\tau,m+1}) + \tau \lambda_2 \phi^{\tau,m+1} = \tau S^{\tau,m+1}, \quad (8.4.56)$$

où  $\lambda_1, \lambda_2$  dépendent seulement de  $\epsilon, \Delta t, T_e$  et  $C$ , avec

$$\begin{aligned} R^{\tau,m+1} &= R(\Delta t, T_e, \epsilon, n^{\tau,m}, \mathbf{q}_i^{\tau,m}, \mathbf{q}_e^{\tau,m}, \mathbf{b}^{m+1}), \\ S^{\tau,m+1} &= S(\Delta t, T_e, \epsilon, C, n^{\tau,m+1}, n^{\tau,m}, \phi^{\tau,m}, \mathbf{q}_i^{\tau,m}, \mathbf{q}_e^{\tau,m}, \mathbf{b}^{m+1}). \end{aligned}$$

Remarquons que les contraintes (8.4.54) sont équivalentes à

$$C_i = \frac{T_e C}{1 + T_e}, \quad C_e = -\frac{T_e C}{\epsilon(1 + T_e)}. \quad (8.4.57)$$

Ainsi, il est nécessaire de prendre  $C > 0$  suffisamment petit pour assurer que  $C_i$  et  $C_e$  soient proches de 0.

## 8.4.2 Résultats numériques

On présente ensuite une version totalement discrétisée de la méthode AP pour (8.4.52). On utilise ensuite un schéma de volumes finis basé sur la semi-discrétisation (8.4.52). Les flux explicites sont calculés à partir d'une méthode de Rusanov ([145], [130]). En suivant l'approche précédente, on reformule le modèle discrétisé en calculant séparément les parties perpendiculaires et parallèles des approximations de  $\mathbf{q}_i^{\tau,m+1}$  et  $\mathbf{q}_e^{\tau,m+1}$  et en résolvant deux équations de diffusion pour déterminer les valeurs approchées de  $n^{\tau,m+1}$  et  $\phi^{\tau,m+1}$ , on résout (8.4.55, 8.4.56) comme dans la section précédente, par l'approche de Degond & Tang ([76]) basée sur un schéma à trois points.

Afin de valider le schéma AP pour le système d'Euler-Lorentz perturbé (8.4.52), on compare ces résultats calculés par le schéma AP à ceux obtenus par le schéma classique.

**Définition 8.4.14.** On désignera par méthode classique un schéma de volume fini basé sur la semi-discrétisation en temps suivante pour  $\alpha \in \{i, e\}$ ,

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{n^{\tau,m+1} - n^{\tau,m}}{\Delta t} + C_\alpha \frac{\phi^{\tau,m+1} - \phi^{\tau,m}}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m} &= 0, \\ \frac{\mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1} - \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m}}{\Delta t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \left( \frac{\mathbf{q}_\alpha^{\tau,m} \otimes \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m}}{n^{\tau,m}} \right) + \frac{T_\alpha}{\epsilon_\alpha \tau} \nabla_{\mathbf{x}} n^{\tau,m} \\ &= \mathbf{q}_\alpha \left[ -\frac{1}{\epsilon_\alpha \tau} n^{\tau,m} \nabla_{\mathbf{x}} \phi^{\tau,m} + \mathbf{q}_\alpha^{\tau,m+1} \times \mathbf{B}^{m+1} \right]. \end{aligned} \right. \quad (8.4.58)$$

On remarque que la condition de stabilité d'une telle méthode dépend fortement de  $\tau$ . En effet, comme dans une situation de petit nombre de Mach,  $\Delta t$  doit être d'autant petit que  $\tau$  est petit pour assurer que la méthode basée sur le schéma (8.4.58) est stable.

Le cas test présenté est une perturbation du cas test stationnaire suivant :

- Le champ magnétique est uniforme et s'écrit  $\mathbf{B} = (\sin \alpha, -\cos \alpha, 0)$  avec  $\alpha \in \mathbb{R}$  fixé,
- $n^{\tau,0}(x, y) = n_0$ ,  $\phi^{\tau,0}(x, y) = \phi_0$ ,  $\mathbf{q}_i^{\tau,0} = \mathbf{q}_e^{\tau,0} = \mathbf{B}$  avec des constantes  $n_0$  et  $\phi_0$ .
- Le système (8.4.52) ne dépend pas de la variable  $z$ .

Ce cas test montre que le schéma AP développé pour le modèle d'Euler-Lorentz bifluide (8.4.52) permet de considérer un pas de temps qui ne satisfasse pas la condition de stabilité requise pour capturer les variations rapides en temps de la solution. De plus aucune dégradation des résultats obtenus avec le schéma AP n'est observée.

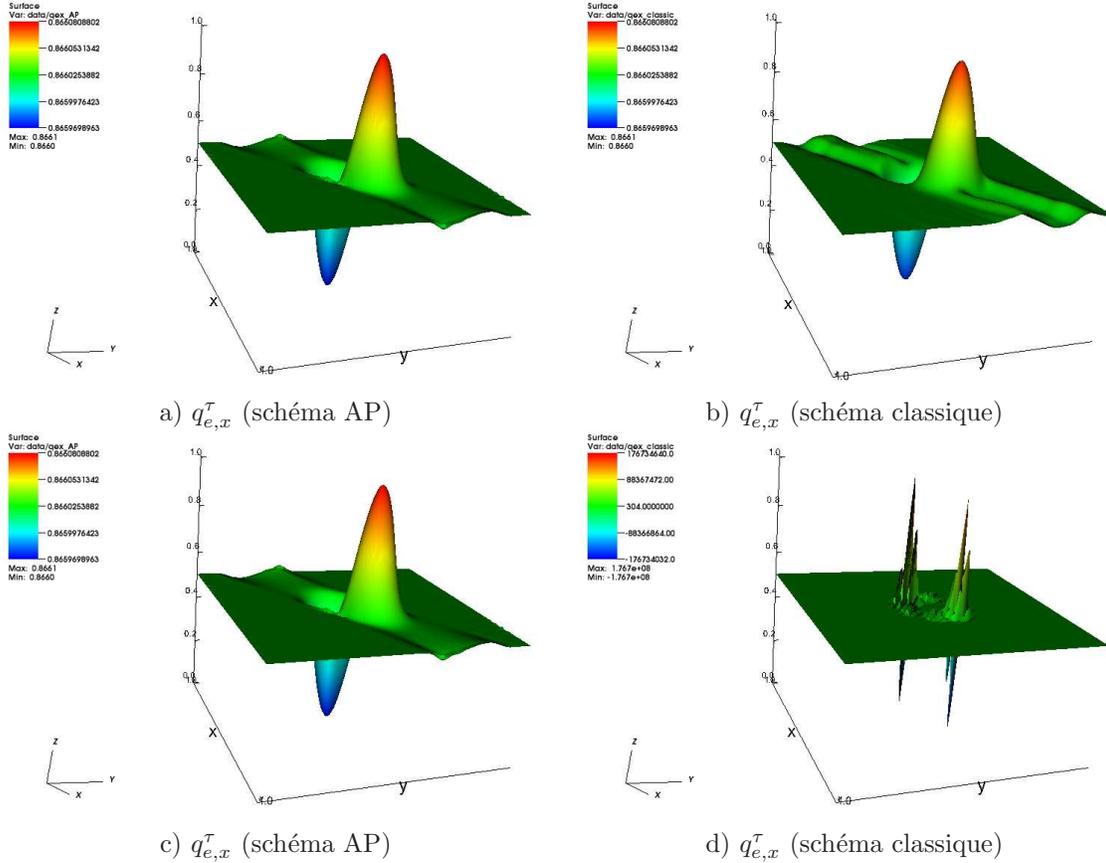


FIG. 8.9 –  $q_e^\tau$  calculée au temps  $t = 6 \times 10^{-6}$  : avec le schéma AP (gauche) dans le cas résolu (a) et non résolu (b) ainsi qu'avec le schéma classique dans le cas résolu (b) et non résolu (d).

### 8.4.3 Impact du paramètre de perturbation $C$ .

Dans ce qui suit on étudie l'impact de  $C$  sur le schéma AP pour le système d'Euler-Lorentz perturbé (8.4.52). Ce paramètre est relié aux constantes  $C_i$  et  $C_e$  par les relations 8.4.57. Puisque  $C_i$  et  $C_e$  ont été introduits dans (8.4.48) comme une perturbation des équations de conservation de masse, ces constantes sont supposées être aussi proches de 0 que possible. Il est cependant équivalent de supposer  $C$  proche de 0. Ainsi le problème de diffusion (8.4.56) est mal conditionné puisque  $\lambda_2 = \frac{T_e C}{\Delta t^2 (T_e - 1)}$  et dégénère en un problème mal posé sur  $\phi$  lorsque  $C \rightarrow 0$ . Ainsi, on étudie les conséquences du choix de  $C$  sur la stabilité du schéma AP.

Le schéma AP est testé avec les conditions initiales suivantes

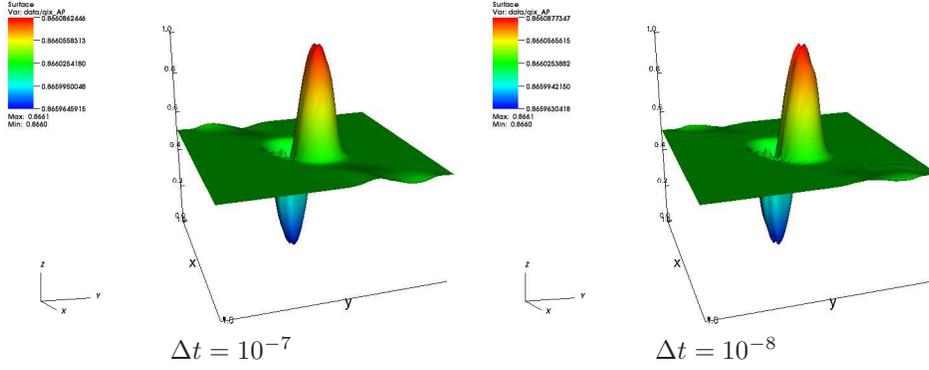


FIG. 8.10 –  $q_{i,x}^T$  au temps  $t = 6 \times 10^{-6}$  avec  $C = 10^{-2}$  et  $\Delta t = 10^{-7}, 10^{-8}$ .

- On considère un maillage uniforme  $100 \times 100$  sur  $\Omega = [1, 2] \times [1, 2]$ ,
- Le champ magnétique est uniforme et défini par  $\mathbf{B} = (\sin \alpha, -\cos \alpha, 0)$  avec  $\alpha = \frac{2\pi}{3}$ ,
- Le potentiel électrique initial est  $\phi^{\tau,0} = \phi_0$  avec  $\phi_0 = 0$ ,
- Les impulsions initiales pour les ions et les électrons sont définies par  $\mathbf{q}_i^{\tau,0} = \mathbf{q}_e^{\tau,0} = \mathbf{B}$ ,
- La densité initiale  $n^{\tau,0}(x, y) = n_0 + \tau \max(0, 1 - \eta(x - x_0)^2 - \eta(y - y_0)^2)$ , avec  $n_0 = 1$ ,  $\eta = 80$  et  $(x_0, y_0) = (\frac{3}{2}, \frac{3}{2})$ ,
- On prend  $T_e = 3$ ,  $\epsilon = 1$  et  $\tau = 10^{-8}$ .

La figure 8.10 représente la composante en  $x$  de l'impulsion des ions  $\mathbf{q}_i^T$  obtenue avec le schéma AP (8.4.52) au temps  $t = 6 \times 10^{-6}$  avec  $C = 10^{-2}$  et un pas de temps de  $\Delta t$  égal à  $10^{-7}$  et  $10^{-8}$ . On remarque que le schéma AP est stable pour  $\Delta t \leq 10^{-7}$ . Lorsque  $C = 10^{-4}$ , la Figure 8.11 qui représente  $q_{i,x}^T$  au temps  $t = 2 \times 10^{-6}$  avec  $\Delta t = 10^{-7}, 10^{-8}$  montre des effets de bord si  $\Delta t = 10^{-7}$  tandis qu'aucun artefact numérique n'apparaît lorsque  $\Delta t = 10^{-8}$ . Les résultats fournis par les cas tests précédents montrent un résultat de stabilité pour le schéma AP qui dépend de  $C$ . Ainsi, le schéma AP développé dans ce travail pour le système d'Euler-Lorentz bifluide (8.4.52) est AP lorsque  $C > 0$  est fixé et que  $\tau \rightarrow 0$ . Cependant, il n'est pas AP lorsque  $C \rightarrow 0$  et  $\tau > 0$  est fixé.

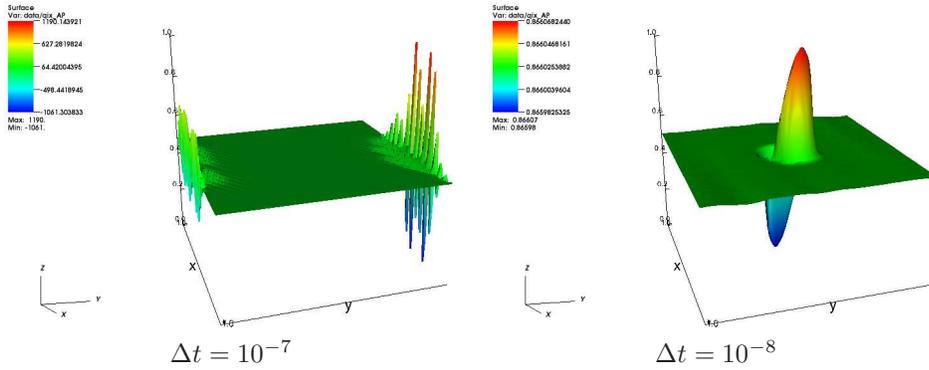


FIG. 8.11 –  $q_{i,x}^T$  à  $t = 2 \times 10^{-6}$  avec  $C = 10^{-4}$  et  $\Delta t = 10^{-7}, 10^{-8}$ .

# Chapitre 9

## Milieux poreux.

### 9.1 Le modèle mathématique

Cette section est consacrée à l'étude d'un problème de Cauchy pour un modèle diphasique de deux phases compressibles. Nous décrivons les résultats obtenus dans ([34]). Les équations représentant le déplacement de deux fluides immiscibles compressibles sont décrites par les équations de conservation de la masse de chaque espèce

$$\partial_t(\phi\rho_i s_i)(t, x) + \operatorname{div}(\rho_i \mathbf{V}_i)(t, x) + \rho_i s_i f_P(t, x) = \rho_i s_i^I f_I(t, x), \quad i = 1, 2, \quad (9.1.1)$$

où  $\phi$  désigne la porosité du milieu.  $\rho_i$  et  $s_i$  sont respectivement la densité et la saturation du  $i^{\text{eme}}$  fluide. La vitesse  $\mathbf{V}_i$  de chaque phase est donnée par la loi de Darcy

$$\mathbf{V}_i(t, x) = -\mathbf{K}(x) \frac{k_i(s_i(t, x))}{\mu_i} \nabla p_i(t, x), \quad i = 1, 2,$$

où  $\mathbf{K}$  est le tenseur de perméabilité du milieu poreux,  $k_i$  la perméabilité relative de la  $i^{\text{eme}}$  phase,  $\mu_i$  la viscosité de la phase  $i$  et  $p_i$  sa pression. L'effet de la gravité est négligé. Les fonctions  $f_I$  et  $f_P$  sont respectivement les termes d'injection et de production. Par définition des saturations

$$s_1(t, x) + s_2(t, x) = 1. \quad (9.1.2)$$

On considère la pression capillaire  $p_{1,2}$  définie par

$$p_{1,2}(s_1(t, x)) = p_1(t, x) - p_2(t, x). \quad (9.1.3)$$

On note que la fonction  $s \mapsto p_{1,2}(s)$  est croissante ( $\frac{dp_{1,2}}{ds}(s) \geq 0 \forall s \in [0, 1]$ ).

Les relations (9.1.2) et (9.1.3) permettent de fermer le système 9.1.1. Cependant ce système étant trop complexe, nous allons le décrire avec seulement deux inconnues, la première saturation et la pression globale. Pour cela, on considère la mobilité de la phase  $i$ ,  $M_i(s_i)$ , la mobilité totale  $M(s_1)$  et la vitesse totale par les expressions

$$M_i(s_i) = \frac{k_i(s_i)}{\mu_i}, \quad M(s_1) = M_1(s_1) + M_2(1 - s_1), \quad V = V_1 + V_2. \quad (9.1.4)$$

Comme dans ([100, 101, 57]), la vitesse totale s'écrit en fonction de  $p_2$  et  $p_{12}$  selon

$$\mathbf{V}(t, x) = -\mathbf{K}(x)M(s_1)(\nabla p_2(t, x) + \frac{M_1(s_1)}{M(s_1)}\nabla p_{12}(s_1)).$$

En définissant une fonction  $\tilde{p}(s_1)$  telle que  $\frac{d\tilde{p}}{ds}(s_1) = \frac{M_1(s_1)}{M(s_1)}\frac{dp_{1,2}}{ds}(s_1)$ , la pression globale  $p$  s'écrit  $p = p_2 + \tilde{p}$ . Comme dans [57],  $V$  satisfait la relation  $\mathbf{V}(t, x) = -\mathbf{K}(t, x)M(s_1)\nabla p(t, x)$ . Ainsi l'expression de chaque vitesse de phase est donnée par

$$\mathbf{V}_i = -\mathbf{K} M_i(s_i)\nabla p - \mathbf{K}\alpha(s_1)\nabla s_i, \quad (9.1.5)$$

où

$$\alpha(s_1) = \frac{M_1(s_1)M_2(s_1)}{M(s_1)} \frac{dp_{1,2}}{ds}(s_1) \geq 0.$$

La densité dépend de la pression des fluides respectifs et la porosité dépend de la variable d'espace et de la pression. On utilise alors une approximation classique pour notre modèle ([57]) en tirant partie du fait que la pression capillaire est faible et que les densités varient peu comparée aux pressions des deux gaz  $p_1$  et  $p_2$ . Cela permet alors de supposer que la densité et la porosité dépendent seulement de la pression globale  $p$ . Ainsi, on a  $\rho_i = \rho_i(p)$  et  $\phi = \phi(x, p)$  et en tenant compte de (9.1.5), le système (9.1.1, 9.1.5) se réécrit

$$\begin{aligned} \partial_t(\phi\rho_i s_i)(t, x) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\rho_i M_i(s_i)\nabla p)(t, x) - \operatorname{div}(\mathbf{K}\rho_i \alpha(s_1)\nabla s_i) + \rho_i s_i f_P(t, x) \\ = \rho_i s_i^I f_I(t, x), \quad i = 1, 2, \end{aligned} \quad (9.1.6)$$

avec la condition (9.1.2).

Soit  $T > 0$  donné et  $\Omega$  une partie de  $\mathbb{R}^d$  ( $d \geq 1$ ). On considère  $Q_T = ]0, T[ \times \Omega$  et  $\Sigma_T = ]0, T[ \times \partial\Omega$ .

Le bord du domaine  $\partial\Omega$  s'écrit  $\partial\Omega = \Gamma_1 \cup \Gamma_{imp}$  avec  $\operatorname{mes}(\Gamma_1) > 0$ .  $\Gamma_1$  représente la paroi d'injection de la seconde phase et  $\Gamma_{imp}$  son complémentaire. La pression globale et la saturation satisfont alors les conditions de bord suivantes :

$$s(t, x) = 0, \quad p(t, x) = 0 \text{ sur } \Gamma_1, \quad \mathbf{K}\nabla p \cdot n = \mathbf{K}\alpha(s_1) \cdot n = 0 \text{ sur } \Gamma_{imp}, \quad (9.1.7)$$

où  $n$  est la normale extérieure au bord  $\Gamma_{imp}$ . La pression est gardée constante sur la région d'injection. Les conditions initiales pour la pression et la saturation sont

$$p(0, x) = p^0(x) \text{ dans } \Omega, \quad s_1(0, x) = s_1^0(x) \text{ dans } \Omega. \quad (9.1.8)$$

## 9.2 Description des résultats

Dans ([101]), les auteurs ont démontrés un théorème d'existence pour (9.1.6, 9.1.7, 9.1.8) lorsque la porosité  $\phi$  était indépendant de la pression globale. L'apport de ce travail a donc été de généraliser ([101]) lorsque  $\phi$  dépend de la pression globale. Notons que la dépendance de la porosité en la pression globale a été prise en compte dans ([66]) mais pour deux phases incompressibles.

On effectue les hypothèses suivantes :

(H1) Le tenseur  $\mathbf{K} \in (W^{1,\infty}(\Omega))^{d \times d}$  et il existe deux constantes positives  $k_0$  et  $k_\infty$  telles que  $\|\mathbf{K}\|_{(L^\infty(\Omega))^{d \times d}} \leq k_\infty$  et  $\langle \mathbf{K}(x)\xi, \xi \rangle \geq k_0|\xi|^2 \forall \xi \in \mathbb{R}^d, p, x \in \Omega$ .

(H2) Les fonctions  $M_1$  et  $M_2 \in \mathcal{C}^0([0, T]; \mathbb{R}_+)$ , vérifient  $M_1(s_1 = 0) = 0$  et  $M_2(s_2 = 0) = 0$ . De plus, il existe  $m_0 > 0$  t.q.,  $\forall s_1 \in [0, 1]$ ,  $M_1(s_1) + M_1(1 - s_1) \geq m_0$ .

(H3)  $(f_P, f_I) \in (L^2(\Omega))^2$ ,  $f_P, f_I \geq 0$  a.e.  $(t, x) \in Q_T$ ,  $s_i^I \geq 0$  ( $i = 1, 2$ ) et  $s_1^I + s_2^I = 1$  p.p. dans  $(t, x) \in Q_T$ .

(H4) Les densités  $\rho_i$  ( $i = 1, 2$ ) et la porosité  $\phi \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R})$ , sont croissantes par rapport à la variable  $x$  et il existe  $\rho_m > 0$ ,  $\rho_M > 0$ ,  $\phi_m > 0$ ,  $\phi_M > 0$  telles que  $\rho_m \leq \rho_i(p) \leq \rho_M$  pour tout  $p$  et  $\phi_m \leq \phi(x, p) \leq \phi_M$  pour tout  $p$  et  $x \in \Omega$ . De plus,  $\partial_p(\phi\rho_1)$  et  $\nabla(\phi\rho_1)$  sont bornés.

(H5) La fonction  $\alpha \in \mathcal{C}^0([0, 1]; \mathbb{R}_+)$  et il existe  $\eta > 0$  tel que  $\alpha(x) \geq \eta$ .

(H6) Les fonctions  $k(p) = \int_0^p \nabla\phi(x, q)dq$ ,  $k_2(p) = \int_0^p \phi(x, q)dq$  et  $k_3(p) = \int_0^p \Delta(x, q)dq$  sont bornées.

$f_I$  et  $f_P$  sont respectivement les termes d'injection et de production. Notons que l'hypothèse (H6) n'est pas demandée dans ([100, 101]) car dans ces travaux la porosité  $\phi$  ne dépend pas de  $p$ .

On définit ensuite  $\beta(s) = \int_0^s \alpha(z)dz$  et l'espace de Sobolev  $H_{\Gamma_1}^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega); u = 0 \text{ on } \Gamma_1\}$ , muni de la norme  $\|u\|_{H_{\Gamma_1}^1(\Omega)} = \|\nabla u\|_{(L^2(\Omega)^d)}$ .

**Théorème 9.2.1.** *Supposons que (H1) – (H6) soit vérifié. Soient  $s_i^0, p^0$  définis p.p. sur  $\Omega$ . Alors il existe  $(s_1, p)$  vérifiant*

$$0 \leq s_i(t, x) \leq 1 \text{ p.p. dans } Q_T, \quad s_i \in L^2(0, T; H_{\Gamma_1}^1), \quad \phi(p)\rho_i(p)s_i \in \mathcal{C}^0(0, T; L^2(\Omega)), \quad i = 1, 2,$$

les conditions de bord (9.1.7), les conditions initiales (9.1.8) et la formulation faible

$$\begin{aligned} & \forall \varphi \in L^2(0, T; H_{\Gamma_1}^1), \quad \langle \partial_t(\phi \rho_i s_i), \varphi \rangle + \int_{Q_T} \rho_i(p) M_i(s_i) \mathbf{K} \nabla_x p \cdot \nabla \varphi \, dx dt \\ & + \int_{Q_T} \mathbf{K} \rho_i(p) \alpha(s_1) \nabla s_i \cdot \nabla \varphi \, dx dt + \int_{Q_T} \rho_i(p) s_i f_P \varphi \, dx dt = \int_{Q_T} \rho_i(p) s_i f_I \varphi \, dx dt, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (9.2.9)$$

Lorsqu'une phase est compressible, le théorème 9.2.1 est toujours vérifié et constitue une généralisation des résultats de ([100]) dans le cas d'une phase compressible et d'une phase incompressible. Cela est principalement dû à  $\partial_p \phi > 0$ .



Quatrième partie

Perspectives



### Ghost-effect pour l'équation de Boltzmann bifluide

Collaboratrice : R. Marra.

- Dans ([36, 33]), j'ai justifié le "ghost effect" pour un gaz à deux composantes dans un cadre stationnaire. Le point de départ est l'équation de Boltzmann instationnaire pour un scaling diffusif. L'approche présentée dans ce mémoire, qui consiste à décomposer le reste en une partie en petite vitesse et une partie en grande vitesse est mise en défaut. C'est pour cela qu'il sera nécessaire d'utiliser l'inégalité spectrale démontrée dans [6].
- Un second type de "ghost effect" a été mis en évidence ([4]). Dans cette situation le gaz  $B$  non condensable, est du même ordre que le nombre de Knudsen mais possède une masse d'ordre 1. On montre alors qu'à la limite, les données macroscopiques du gaz condensable sont solution d'un système d'Euler stationnaire dont les solutions sont constantes. Ainsi, il est montré physiquement que le gaz non-condensable vient se loger contre une des deux parois du domaine qui correspond à celle vers laquelle se dirige la vitesse macroscopique du gaz condensable. Ainsi, afin de satisfaire les conditions de bord au niveau cinétique, le terme d'ordre 0 du développement asymptotique doit être corrigé. La couche limite est alors obtenue en résolvant un problème de Milne non linéaire ([159]). Il reste ensuite à contrôler le reste du développement asymptotique.

### Modèles BGK pour les mélanges

Collaborateurs : V.Pavan, J.Schneider.

- En premier lieu une implémentation numérique du modèle BGK pour les mélanges présenté dans ce mémoire est prévue afin de pouvoir le comparer aux modèles existant ([103, 1]).
- Par ailleurs, du point de vue des applications, il est important de généraliser le modèle BGK pour les mélanges présenté dans ce mémoire à un cadre polyatomique. Le but est à terme de pouvoir insérer nos modèles dans les codes du CEA destinés à simuler les problèmes de rentrée de corps dans l'atmosphère.
- Une autre direction de recherche envisagée concerne la dérivation d'un modèle BGK qui permette d'ajuster les coefficients de Soret et Dufour. On envisage également de d'établir un modèle ES-BGK afin d'obtenir un bon nombre de Prandtl.
- Du point de vue des modèles chimiques, il reste à établir la limite fluide pour le scaling des réactions rapides pour le modèle BGK chimique présenté dans ce mémoire.

### Modèles aux moments $M_n$

Collaborateur : B.Dubroca

- Dans les travaux présentés dans ce mémoire ([134, 135]), les ions plus lourds que les électrons ont été supposés immobiles. Cela signifie que le modèle est valide sur de petits intervalles de temps. Il s'agit donc de généraliser l'approche à des ions mobiles. La stratégie que nous allons adopter est de ce placer dans le référentiel des ions, ce qui va générer de nouveaux termes dûs aux changements de référentiel.
- Par ailleurs, on envisage de coupler les modèles  $M_n$  que l'on a développés avec les équations de Maxwell.

Du point de vue applicatif les modèles aux moments et les méthodes numériques que nous avons développés s'adressent dans un premier temps aux problèmes issus de la fusion par confinement inertiel. Mais aussi, ces modèles peuvent s'appliquer aux plasmas de bord de fusion qui sont fortement collisionnels.

### Schémas AP pour l'équation de Wigner-BGK

Collaborateur : N.Crouseille, F.Méhats.

- Le but de cette collaboration qui est en cours actuellement, est de développer un schéma "asymptotic preserving" pour l'équation de Wigner pour un scaling diffusif et hydrodynamique. Pour les test numériques pour le modèle asymptotique, les comparaisons se feront avec le modèle QDD pour le scaling diffusif et avec le modèle Navier-Stokes quantique ([40]) pour le scaling hydrodynamique. Concernant la comparaison avec le modèle QDD pour le régime asymptotique, notons que nous pourrons utiliser le schéma numérique développé dans ([99]).

### Méthodes numériques pour les équations cinétiques basées sur les grilles locales

Collaborateur : L.Mieussens

Ce travail va s'effectuer dans le cadre du post-doc de Louis Forestier-Coste que je coencadre avec

L.Mieussens.

- Il va s'agir dans un premier temps de mieux comprendre les problèmes d'oscillations qui apparaissent pour le problème du transport libre.
- Egalement, va faudra généraliser la méthode présentée dans le chapitre 6 à une situation bidimensionnelle en espace et de développer de nouveaux cas tests.

### **Modèles fluides pour les plasmas**

Collaborateurs : P. Degond, F. Deluzet, A. Mouton.

- Dans le cadre des modèles de type Euler-Lorentz, un premier axe concerne la généralisation au système d'Euler complet avec une équation en énergie. La méthode de Gummel permet de gérer les lois de pression non linéaires.
- Il est également nécessaire de mieux comprendre la discrétisation des conditions de bord de type Neumann obliques qui n'ont pas été correctement traitées dans les travaux présentés de ce mémoire.
- En outre, l'extension du modèle monofluide à un modèle d'Euler-Lorentz bifluide a été réalisée via une petite perturbation sur les équations de conservation de la masse. Nous souhaiterions donc nous affranchir de cette perturbation ou bien en proposer une discrétisation qui soit AP.

# Bibliographie

- [1] P.Andries, K.Aoki, B.Perthame *A consistent BGK-type model for gas mixtures*. J.Stat.Phys., 106, No 5/6, 2002, 993-1018. [29](#), [34](#), [97](#)
- [2] P.Andries, P.LeTallec, J.P.Perlat, B.Perthame *Entropy condition for the ES BGK model of Boltzmann equation for mono and polyatomic gases*. Eur. J. Mech. (B fluids) 19, 813-830 (2000). [25](#), [26](#), [27](#), [28](#), [29](#)
- [3] Aoki K., Bardos C., Takata S. *Knudsen layer for a gas mixture.*, J. Stat. Phys, 112, 3/4, 2003. [15](#), [16](#), [17](#), [31](#)
- [4] K. Aoki, S. Takata, S. Kosuge *Vapor flows caused by evaporation and condensation on two parallel plane surfaces : Effect of the presence of a noncondensable gas* Phys. Fluids, vol 10, no 6, (1998), 1519-1533. [97](#)
- [5] L.Arkerdyd, R.Esposito, R.Marra, A.Nouri *Stability of the laminar solution of the Boltzmann equation for the Benard problem.*, Bull. Inst. Math. Academia Sinica, 3, 51-97, 2008. [13](#)
- [6] L.Arkerdyd, R.Esposito, R.Marra, A.Nouri *Stability for Rayleigh-Benard convective solutions of the Boltzmann equation.* , Arch. Ration. Mech. Anal. 198, no. 1, 125-187, 2010. [13](#), [17](#), [97](#)
- [7] Arkerdyd L., Esposito R., Marra R., Nouri A. *Ghost effect by curvature in planar Couette flow* , Kin. Rel. Mod., 4, 109-138, 2011. [13](#)
- [8] L.Arkerdyd, A.Nouri *The stationary Boltzmann Equation in the Slab with Given Weighted Mass for Hard and Soft Forces*. Ann. Scuola. Norm. Sup. Pisa, 1998, 27, 533-536. [11](#)
- [9] L.Arkerdyd, A.Nouri  *$L^1$  solutions to the stationary Boltzmann equation in a slab*. Annales de la Faculte des sciences de Toulouse 2000, 9, 375-413. [11](#)
- [10] L.Arkerdyd, A.Nouri *The stationary nonlinear Boltzmann equation in a Couette setting with multiple, isolated  $L^q$ -solutions and hydrodynamic limits*, J. Stat. Phys. vol.118, 5-6, 849-881, 2005. [13](#), [17](#)
- [11] L.Arkerdyd, A.Nouri *On a Taylor-Couette type bifurcation for the stationary nonlinear Boltzmann equation*, J. Stat. Phys., Vol.124, Nos.2-4, 401-443, 2006. [13](#), [17](#)
- [12] C. Baranger, J. Claudel, N. Herouar, L. Mieussens *Construction of a locally refined discrete velocity grid for deterministic rarefied flow simulations*, en preparation. [54](#)
- [13] C.Bardos, R.E.Caffisch, B.Nicolaenko *The Milne and Kramer problems for the Boltzmann Equation of a hard sphere gas* Comm. Pure Appl. Math. 39, 323-352, 1986. [16](#)
- [14] C. Bardos, F. Golse, D. Levermore *Fluid Dynamic Limits of Kinetic Equations I. Formal derivations* J. Statist. Phys. 63 323-344 (1991) [13](#)
- [15] C.Bardos, F. Golse, D. Levermore *Fluid dynamic limits of kinetic equations. II : Convergence proofs for the Boltzmann equation* Commun. Pure Appl. Math. 46, No.5, 667-753 (1993) [13](#)
- [16] L. Barletti, C. Cintolesi *Derivation of isothermal quantum fluid equations with Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics* J. Stat. Phys., vol 148, n 2, (2012), 353-386. [67](#)
- [17] M. Bennoune, M. Lemou, L. Mieussens, *Uniformly stable numerical schemes for the Boltzmann equation preserving compressible Navier-Stokes asymptotics*, J. Comput. Phys. 227(8) 3781-3803 (2008) [71](#)
- [18] C. Berthon, R. Turpault *Asymptotic preserving schemes*, Num. Method Partial Diff. Equations, 27, No. 6, pp. 1396-1422 (2011). [71](#)

- [19] C. Berthon, P. Charrier, B. Dubroca *An HLLC scheme to solve the M1 model of radiative transfer in two space dimensions* J. Sci. Comput., 31. no. 3, pp. 347-389 (2007) [71](#)
- [20] P.L.Bhatnagar, E.P.Gross, M.Krook. *A model for collision processes in gases*. Phy.Rev., 94-511, (1954). [27](#), [28](#)
- [21] M.Bisi, L.Desvillettes *From Reactive Boltzmann Equations to Reaction-Diffusion Systems*, J. Stat. Phys, vol.124, no 2-4, (2006), 881-912
- [22] M.Bisi, L.Desvillettes *Some remarks about the scaling of systems of reactive Boltzmann equations*, Kin. Rel. Mod., vol 1, , (2008), 515-520. [33](#)
- [23] M.Bisi, M.Groppi, G.Spiga *Grad's closure in the kinetic theory of a chemically reacting gas* Cont. Mech. Thermodyn. 14, 2, 207-222, (2002).
- [24] M. Bisi, M. Groppi, G. Spiga *Kinetic Bhatnagar-Gross-Krook model for fast reactive mixtures and its hydrodynamic limit*, Physical review E, (2010). [34](#)
- [25] M.Bisi, G.Spiga *On a kinetic BGK model for slow chemical reactions*. Kin. Rel. Mod., vol 4, no 1, 2011. [34](#), [35](#)
- [26] A.V. Bobylev, J.A. Carrillo, I.M Gamba *On some properties of kinetic and hydrodynamic equations for inelastic interactions*, J. Stat. Phys., 98, 743-773, 2000. [65](#)
- [27] A.H. Boozer, *Establishment of magnetic coordinates for a given magnetic field*, (1982), Phys. Fluids, volume 25, no 3, 520-521. [71](#)
- [28] 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. [27](#), [65](#)
- [29] J.F.Bourgat, L.Desvillettes, P.Le Tallec, B.Perthame *Microreversible Collisions for Polyatomic Gases and Boltzmann's Theorem*, Eur. J. Mech., B/ Fluids, vol. 13, n 2, (1994), 237-254. [27](#), [33](#)
- [30] S.Brull *The Boltzmann equation for a two component gas in the slab*. Math. Meth. Appl. Sci. 31, 2008, 153-178. [9](#), [11](#)
- [31] S. Brull *Discrete coagulation-fragmentation system with transport and diffusion* Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. (6) 17, n 3, (2008), 439-460.. [19](#)
- [32] S.Brull, *The Boltzmann equation for a two component gas in the slab for soft forces*, Math. Meth. Appl. Sci., 31, (2008), 1653-1666. [9](#), [11](#)
- [33] S.Brull, *Problem of evaporation-condensation for a two component gas in the slab*. Kin. Rel. Mod., Vol 1, No 2, 2008, 185-221. [13](#), [14](#), [15](#), [16](#), [17](#), [18](#), [97](#)
- [34] S.Brull *Two compressible immiscible fluids in porous media : The case where the porosity depends on the pressure*. Adv. Diff. equ. (2008), Vol 13, No 7-8, 781-800. [91](#)
- [35] S.Brull *The Boltzmann equation for a two component gas in the slab for different molecular masses*. Adv. Diff. equ. 2010, vol 15, no 11-12. [9](#), [11](#)
- [36] S.Brull, *Ghost effect for vapor-vapor mixtures*. Kin. Rel. Mod., 2012, Vol.5, no.1. [13](#), [14](#), [15](#), [16](#), [17](#), [18](#), [97](#)
- [37] S.Brull, P.Degond, F.Deluzet, A.Mouton *An asymptotic preserving scheme for a bifluid Euler-Lorentz system*. Kin. Rel. Mod. (2011) Vol.4, no.4. [III](#), [37](#), [71](#), [86](#), [87](#), [89](#)
- [38] S.Brull, P.Degond, F.Deluzet *Degenerate anisotropic elliptic problems and magnetized plasmas simulations*. Comm. Comput. Phys., 11 2012, 147-178. [II](#), [71](#), [72](#), [76](#), [77](#), [78](#), [87](#)
- [39] S.Brull, F.Deluzet, A.Mouton *Numerical resolution of an anisotropic non-linear diffusion problem*. [II](#), [71](#), [78](#), [79](#), [81](#), [83](#), [85](#)
- [40] S.Brull, F.Méhats *Derivation of viscous correction terms for the isothermal quantum Euler model*. ZAMM, 2010, vol 90, Issue 3, 219-230. [65](#), [67](#), [68](#), [97](#)
- [41] S.Brull, L.Mieussens *A new numerical method for kinetic equations based on local grids* En finalisation. [53](#)
- [42] S.Brull-L.Pareschi : *Dissipative hydrodynamic models for the diffusion of impurities in a gas*. Appl. Math. Lett. 19 (2006), no.6, 516-521. [27](#), [65](#)

- [43] S.Brull, V.Pavan, J.Schneider *Derivation of BGK models for mixtures*. Eur. J. Mech. (B-Fluids). **I**, 25, 26, 29, 31, 34
- [44] S.Brull, J.Schneider *A new approach of the Ellipsoidal Statistical Model*. Cont.Mech.Thermodyn. 20 (2008), no.2, 63-74. **I**, 25, 26
- [45] S.Brull, J.Schneider. *On the Ellipsoidal Statistical Model for polyatomic gases*. Cont. Mech. Thermodyn. 20 (2009), n 8, 489-508. **I**, 25, 26, 27
- [46] S.Brull, J.Schneider *Derivation of a relaxation model for reacting gas mixtures*. Soumis. 25, 26
- [47] C.Buet, S.Cordier, Conservative and Entropy Decaying Numerical Scheme for the isotropic Fokker-Planck-Landau Equation, J. Comp. Phys., Vol. 145, 228-245, 1998. 39
- [48] C. Buet, S. Cordier, *Numerical analysis of conservative and entropy schemes for the Fokker-Planck-Landau equation*. SIAM J. Numer. Anal. 36, No. 3 (1999) 953-973. 37
- [49] C. Buet, S. Cordier, P. Degond, M. Lemou, *Fast algorithms for numerical, Conservative, and entropy approximations of the Fokker-Planck-Landau equation*. J. Comp. Phys., 133 (1997) 310-322. 37
- [50] C. Buet, S. Dellacherie, *On the Chang and Cooper scheme applied to a linear Fokker-Planck equation*. Comm. Math. Sci., 8 (2010) 1079-1090. 42
- [51] C. Buet, S. Dellacherie, R. Sentis, *Résolution numérique d'une équation de Fokker-Planck ionique avec température électronique*. C.R. Acad. Sci. Paris Serie I Math., 327 (1998) 93-98. 42
- [52] R.E. Caflisch *The fluid dynamic limit of the nonlinear Boltzmann equation*, Commun.on.Pure and Applied Math. 33, 651-666, 1980. 16
- [53] Canizo, J. A., Desvillettes, L. ; Fellner, K. 'Regularity and mass conservation for discrete coagulation-fragmentation equations with diffusion.' Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire 27 (2010), no. 2, 20
- [54] J.A. Carrillo, T. Goudon, P. Lafitte, *Simulation of fluid and particles flows : Asymptotic-Preserving schemes for bubbling and flowing regimes*, J. Comp. Phys. 223-1, 2007, 208-234. 71
- [55] C.Cercignani *The Boltzmann equation and its applications*, Springer, Berlin, 1998.
- [56] S. Chapman, T.G. Cowling *The mathematical theory of non uniform gases*, third ed. Cambridge university press, Cambridge 1970.
- [57] G.Chavent, J.Jaffre. *Mathematical models and finite elements for reservoir simulation. Single phase, multiphase and multicomponent flows through porous media* Studies in Mathematics and its Applications ; 17, North-Holland Publishing Comp., 1986. 91, 92
- [58] H. Choi, J.G. Liu *The reconstruction of upwind fluxes for conservation laws, its behaviour in dynamics and steady state calculations*, J. Comp. Phys. 144, (1998), 237-256. 57, 58
- [59] JF.Collet, F.Poupaud *Asymptotic behaviour of solutions to the diffusive fragmentation-coagulation system*. Physica D vol.114 (1998), 123-146. 20
- [60] JF.Collet, F.Poupaud *Existence of solutions to coagulation-fragmentation systems with diffusion*. Transp. Theory. Stat. Phys. 25 (1996) 503-513. 20
- [61] P.Crispel, P.Degond, M.H.Vignal, *Quasi-neutral fluid models for current-carrying plasmas*, J. Comp. Phys. 223-1 2007, 208-234. 37
- [62] P.Crispel, P.Degond, M.H.Vignal, *An asymptotic preserving scheme for the two-fluid Euler-Poisson model in the quasi-neutral limit*, J. Comp. Phys. 205-2 (2005), 408-438. 37
- [63] P.Crispel, P.Degond, M.H.Vignal, *A plasma expansion model based on the full Euler-Poisson system*, Math. Mod. Meth. Appl. Sci. 17-7 (2007), 1129-1158. 37
- [64] N. Crouseilles, F. Filbet, *Numerical approximation of collisional plasmas by high order methods*. J. Comp. Phys., 201, (2004), 546-572. 37
- [65] N.Crouseilles, M.Lemou, *An Asymptotic-Preserving scheme based on a micro-macro decomposition for collisional Vlasov equations : diffusion and high-field scaling limits*, à paraître dans Kinet. Relat. Models. 71

- [66] F.Z. Daim, R. Eymard, D.Hillhorst. *Existence of a solution for a two phase flow in porous media : the case that the porosity depends on the pressure.* Journal of Mathematical Analysis and Applications, 326(1) :332-351, 2007. [92](#)
- [67] P.Degond, *Asymptotic-Preserving Schemes for Fluid Models of Plasmas*, à paraître dans 'Panoramas et Syntheses' de la SMF. [76](#), [77](#), [87](#)
- [68] P.Degond, F.Deluzet, C.Negulescu, *An Asymptotic Preserving scheme for strongly anisotropic elliptic problems* Multiscale Model. Simul., vol 8, no.2, (2010), 645-666 [76](#)
- [69] P.Degond, F.Deluzet, A.Loizinski, J.Narski, C.Negulescu, *Duality-based Asymptotic-Preserving method for highly anisotropic diffusion equations* Commun. Math. Sci. (2012), Vol. 10(1), 1-31 [71](#), [76](#)
- [70] P. Degond, A. Loizinski, J. Narski, C. Negulescu, 'An Asymptotic-Preserving method for highly anisotropic elliptic equations based on a micro-macro decomposition', J. Comput. Phys. (2012), Vol. 231(7), 2724-2740 [71](#), [76](#)
- [71] P.Degond, F.Deluzet, A.Sangam, M.H.Vignal *An Asymptotic-Preserving scheme for the Euler equations in a strong magnetic field*, J. Comp. Phys., (2009), 3540-3558. [72](#), [76](#), [77](#), [87](#)
- [72] P.Degond, S.Gallego, F.Méhats, *On Quantum Hydrodynamic and Quantum Energy Transport Models*, Commun. Math. Sci. 5, 2007, no.4, 887-908. [68](#)
- [73] P.Degond, S.Gallego, F.Méhats, *Isothermal quantum hydrodynamics : derivation, asymptotic analysis and simulation*, SIAM Multiscale Model. Simul. 6 2007, no.1, 246-272. [67](#), [68](#), [69](#)
- [74] P.Degond, F.Méhats, C.Ringhofer, *Quantum energy-transport and drift-diffusion models*, J. Stat. Phys. 118 (2005), no., 3-4, 625-665. [67](#)
- [75] P.Degond, C.Ringhofer, *Quantum Moment Hydrodynamics and the Entropy Principle*, J. Stat. Phys. 112 2003, no.,3-4, 587-628. [67](#)
- [76] P.Degond, M. Tang, *All speed scheme for the low Mach number limit of the isentropic Euler equation*, Com. Comput. Phys. 10, 2011, 1-31. [88](#)
- [77] A. De Masi, R. Esposito, J.L. Lebowitz *Incompressible Navier-Stokes and Euler limits of the Boltzmann equation* Comm. Pure Appl. Math. (1989) [13](#)
- [78] L.Desvilletes. *Sur un Modèle de type Borgnakke-Larsen Conduisant à des lois d'Energie Non-linéaires en Température pour les Gaz Parfaits Polyatomiques*, Ann. Fac. Sci. Toulouse, Série 6, vol. 6, n.2, 257-262, 1997. [27](#), [33](#)
- [79] L.Desvilletes, R.Monaco, F.Salvarani *A Kinetic Model Allowing to Obtain the Energy Law of Polytypic Gases in the Presence of Chemical Reactions* Eur. J. Mech. B Fluids, vol.24, 2005, 219-236. [33](#)
- [80] S.R.De Groot, P.Mazur *Nonequilibrium Thermodynamics*, North-Holland, Amsterdam (1962). [31](#)
- [81] S.Dellacherie, *Sur un schéma numérique semi-discret appliqué à un opérateur de Fokker-Planck isotrope*. C. R. Acad. Sci. Paris Série I Math., 328 (1999) 1219-1224. [42](#)
- [82] S.Dellacherie, *Numerical resolution of an ion-electron collision operator in axisymmetrical geometry*. Transp. Theory and Stat. Phys., 31 (2002) 397-429. [42](#)
- [83] S.Dellacherie, C.Buet, R.Sentis, *Numerical solution of an ionic Fokker-Planck equation with electronic temperature*. SIAM J. Numer. Anal., 39 (2001) 1219-1253. [42](#)
- [84] S.Dellacherie, *Contribution à l'analyse et à la simulation numérique des équations cinétiques décrivant un plasma chaud*. PhD thesis, University Denis Diderot Paris VII, 1998. [39](#)
- [85] L. Desvillettes, K. Fellner *Large time asymptotics for a continuous coagulation-fragmentation model with degenerate size-dependent diffusion* SIAM J. Math. Anal. 41 (2009/10), no. 6, 2315-2334. [19](#)
- [86] R.DiPerna, P.L.Lions, *On the Cauchy problem for the Boltzmann equation : Global existence and weak stability* Ann. Math. 130, (1989), 321-366. [11](#)
- [87] R.Duclos, B.Dubroca, F.Filbet, V.Tikhonchuk, *High order resolution of of the Maxwell-Fokker-Planck-Landau model intended for ICF application* J. Comp. Phys., 228 (2009) 5072-5100. [37](#), [43](#), [46](#)

- [88] B.Dubroca, J.L.Feugeas, *Entropic moment closure hierarchy for the radiative transfert equation*. C. R. Acad. Sci. Paris Ser. I, 329 (1999) 915-920. [37](#)
- [89] R.Duclous, *Modélisation et Simulation Numérique multi-échelle du transport cinétique électronique*. PhD thesis, University Bordeaux 1, 2009. [37](#), [43](#), [46](#)
- [90] R.Duclous, B.Dubroca, F.Filbet, V.Tikhonchuk, *High order resolution of of the Maxwell-Fokker-Planck-Landau model intended for ICF application*. J. Comp. Phys., 228 (2009) 5072-5100. [37](#), [43](#), [46](#)
- [91] A.Ern, V.Giovangigli *The kinetic chemical equilibrium regime* Physica A 260 (1998) 49-72. [27](#), [33](#)
- [92] M. Escobedo, S. Mischler, B. Perthame *Gelation in coagulation and fragmentation models*, Comm. Math. Phys. 231, 157-188, (2002) [19](#)
- [93] R.Esposito, J.L.Lebowitz, R.Marra *Hydrodynamic limit of the stationary Boltzmann Equation in a slab*, Comm. Math. Phys., 160, 49-80, 1994. [3](#), [15](#), [16](#), [17](#), [18](#)
- [94] R.Esposito, J.L.Lebowitz, R.Marra *The Navier-Stokes limit of stationary solutions of the nonlinear Boltzmann equation*, J. Stat. Phys. 78, 383-412, 1995. [3](#), [15](#), [16](#), [17](#), [18](#)
- [95] R.Esposito, J.L.Lebowitz, R.Marra *on the derivation of hydrodynamics from the Boltzmann equation* Phys. Fluids 11, 8, (1999), 2354-2366.
- [96] F.Filbet, S.Jin *A class of asymptotic preserving schemes for kinetic equations and related problems with stiff sources*, J. Comp. Physics, vol. 229, no 20 (2010). [71](#)
- [97] F.Filbet, S.Jin *An Asymptotic Preserving Scheme for the ES-BGK model pof the Boltzmann equation*, J. Sci. Computing, vol. 46, Number 2 (2011), 204-224. [71](#)
- [98] M. Frank, B. Dubroca, A. Klar, *Partial moment entropy approximation to radiative transfer*. J. Comp. Phys., 218 (2006) 1-18. [37](#)
- [99] S. Gallego, F. Méhats *Entropic discretization of a quantum drift-diffusion model*, SIAM J. Numer. Anal. 43 (2005), no. 5, 1828-1849. [97](#)
- [100] C.Galusinski, M.Saad. *A non linear degenerate system modelling water-gas flows in porous media.*, DCDS-B, 9, 281-308, 2008. [91](#), [92](#), [93](#)
- [101] C.Galusinski, M.Saad. *Two compressible immiscible fluids in porous media*. J. Diff. Equ., 244, (2008), 1741-1783. [91](#), [92](#)
- [102] C. Gardner *The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices*, SIAM J. Appl. Math., n 2, (1994), 409-427 [67](#)
- [103] V.Garzo, A.Santos, J.J.Brey *A kinetic model for a multicomponent gas*, Phys. Fluids A 1 N 2 (1989), 380-383. [10](#), [29](#), [97](#)
- [104] V.Giovangigli *Multicomponent flow modeling* [27](#), [33](#)
- [105] F.Golse, L. Saint-Raymond *The Navier-Stokes limit of the Boltzmann equation for bounded collision kernels* Invent. Math. 155 (2004), no. 1, 81161. [13](#)
- [106] H.Grad, *On Kinetic Theory of the Rarefied Gases*. Comm. Pure and Appl. Math., Vol.II (1949) 331-407. [37](#), [43](#)
- [107] V. Grandgirard, Y. Sarazin, X. Garbet, G. Dif-Pradalier, Ph. Ghendrih, N. Crouseilles, G. Latu, E. Sonnendrücker, N. Besse, P. Bertrand 'Computing ITG turbulence with a full-f semi-Lagrangian code', Comm. Nonlinear Science and Numerical Simulation, vol 13, No1, p81 - 87, (2008) [71](#)
- [108] M.Groppi, S.Rjasanow, G.Spiga, *A kinetic relaxation approach to fast reactive mixtures : shock wave structure*, J.Stat.Mech.-Theory.Exp., vol. 09 [34](#)
- [109] M.Groppi, G.Spiga *Kinetic approach to chemical reactions and inelastic transitions in a rarefied gas* , J. Mathematical chemistry 26 (1999) 197-219. [33](#)
- [110] M.Groppi, G.Spiga, *A Bhatnagar-Gross-Krook approach for chemically reacting mixtures*, Phys. Fluids (2004), 16, no 12, 4273-4284. [34](#)
- [111] H.K. Gummel, A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations, *IEEE Trans. Electron Devices* 11-10 (1964), 455-465. [81](#)

- [112] Hamel.B.B. *Kinetic model for binary gas mixtures*, Phys. Fluids 8 (3) (1965), 418-425. [29](#)
- [113] Hamel.B.B. *Two-fluid hydrodynamic equations for a neutral, disparate-mass, binary mixture*, Phys. Fluids 9 (12) (1966), 11-22. [29](#)
- [114] Harten, P.D.Lax, B.Van Leer, *On Upstream Differencing and Godunov-Type Schemes for Hyperbolic Conservation Laws*, Siam Review, 25 (1983) 35-61. [43](#)
- [115] C.Hauck, R.McClarren, *Positive  $P_N$  closures* SIAM J. Sci. Comp., 32 (2010) 2603-2626. [37](#)
- [116] D. Hilbert *Mathematical problems* Bull Amer Math Soc, 8(10), 437-479, 1902. [65](#)
- [117] 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) Academie Press, New York, 1966 193-215. [25](#)
- [118] S. Jin, *Efficient Asymptotic-Preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations*, J. Sci. Comput. 21-2, 451-454, 1999. [71](#)
- [119] M.Junk, *Maximum entropy for reduced moment problems* Math. Mod. Meth. Appl. Sci., Vol. 10 (2000) 1001-1025. [25](#)
- [120] A.Jüngel. *Global weak solutions to compressible Navier-Stokes equations for quantum fluids*. SIAM J. Math. Anal. 42 (2010), 1025-1045. [69](#)
- [121] A. Jüngel J.P. Milisic. *Full compressible Navier-Stokes equations for quantum fluids : derivation and numerical solution* Kinetic Related Models 4 (2011), 785-807. [69](#)
- [122] D.S. Kershaw, *Flux limiting nature's own way - A new method for numerical solution of the transport equation*, Tech. Rep. UCRL-78378, Lawrence Livermore National Laboratory, 1976. [39](#)
- [123] R.J.Kingham, A.R.Bell, *An implicit Vlasov-Fokker-Planck code to model non-local electron transport in 2-D with magnetic fields*. J. Comp. Phys., 194 (2004) 1-34. [46](#)
- [124] I.Kusker *A model for rotational energy exchange in polyatomic gases* Physica A 158, 1989 784-800. [27](#)
- [125] S.Kosuge *Model Boltzmann equation for gas mixtures : Construction and numerical comparison*, Eur. J. Mech. B Fluids, 2009, 170-184. [29](#)
- [126] P. Laurencot, S. Mischler *Global existence for the discrete diffusive coagulation-fragmentation equations in  $L^1$* . Rev. Mat. Iberoamericana 18 (2002) 221-235. [20](#)
- [127] P. Laurencot, S. Mischler *The continuous coagulation-fragmentation equations with diffusion*. Arch. Rat. Mech. Anal. 162, (2002) 45-99. [19](#)
- [128] M. Lemou, L. Mieussens, *New asymptotic preserving scheme based on micro-macro formulation for linear kinetic equations in the diffusion limit*, SIAM J. Sci. Comput. 31(1), 334-368 (2008) [71](#)
- [129] B. Lods, G.Toscani *The dissipative linear Boltzmann equation for hard spheres*, J. Stat. Phys., 117, 3-4, 635-664, 2004. [65](#), [66](#)
- [130] R. Leveque, *Finite volume methods for hyperbolic problems*, Cambridge texts in Applied mathematics, 2002. [88](#)
- [131] C.D. Levermore *Moment closure hierarchies for kinetic theories*, J. Stat. Phys. 83 1996 1021-1065. [25](#), [37](#), [67](#)
- [132] G.N.Minerbo, *Maximum entropy Eddington Factors*. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 20, 541 (1978). [37](#)
- [133] F. McCormack *Construction of linearized kinetic models for gaseous mixtures and molecular gases*, Phys. Fluids 16, 2095-2105, (1973).
- [134] J. Mallet, S. Brull, B. Dubroca. *Angular moment model for the classical and relativistic Maxwell-Fokker-Planck equation of electrons* [38](#), [40](#), [50](#), [97](#)
- [135] J.Mallet, S.Brull, B.Dubroca *General moments system for plasma physics based on minimum entropy principle* [38](#), [97](#)
- [136] F. Méhats, O. Pinaud *An inverse problem in quantum statistical physics*, J. Stat. Phys., (2010), **140**, no3, 565-602. [67](#)

- [137] F. Méhats, O. Pinaud *A problem of moment realizability in quantum statistical physics* Kin. Relat. Models, (2011), **4**, 1143-1158. [67](#)
- [138] L. Mieussens *Discrete Velocity Model and Implicit Scheme for the BGK Equation of Rarefied Gas Dynamics*, Math. Mod. Meth. Appl. Sci., (2000), **8**, 10, 1121-1149. [53](#)
- [139] S.Mischler *Kinetic equations with Maxwell boundary condition*, Annales scientifiques de l'ENS 43, fascicule 5 (2010), 719-760. [11](#)
- [140] T.F.Morse *Kinetic model equations for a gas mixture*, Phys. Fluids 7, (1964), 2012-2013.
- [141] V.Panferov, *On the interior boundary-value problem for the stationary Povzner equation with hard and soft interactions*, Ann. Sc. Norm. Super. Pisa. Cl. Sci. (5) 3, no.4, (2004), 771-825. [11](#)
- [142] D.I.Pullin *Kinetic models for polyatomic molecules with phenomenological energy exchange* Phys. Fluids, (1978) 21, 209-216 [27](#)
- [143] F.Rogier, J.Schneider *A direct method for solving the Boltzmann equation*, Transp. Th. Stat. Phys., 1994, 23, 1-3, 313-338. [53](#)
- [144] A.Rossani, G.Spiga *A note on the kinetic theory of chemically reacting gases*, Physica A, 272, (1999), 563-573. [33](#), [34](#)
- [145] V.V. Rusanov *The calculation of the interaction of non-stationary shock waves and obstacles*, J. Comp. Math. Phys. **1** (1961), 267-279. [88](#)
- [146] L.Mieussens, H.Struchtrup *Numerical comparison of BGK-models with proper Prandtl number*, Phys. Fluids 16(8), 2797-2813 (2004). [27](#)
- [147] L.Sirovich *Kinetic modeling of gas mixtures*, Phys. Fluids 5 No 8 (1962), 908-918. [29](#)
- [148] J.Schneider *Entropic approximation in kinetic Theory*, M2AN, vol.38 no3, 541-561, (2004). [25](#)
- [149] Y.Sentoku, A.J. Kemp, *Numerical method for particle simulations at extreme densities and temperatures : weighted particles, relativistic collisions and reduced currents*, J. Comp. Phys. 227, 6846-6861, 2008. [37](#)
- [150] S.Sone *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*, Birkhäuser Boston, 2002. [13](#)
- [151] S.Sone, K.Aoki, T.Do, *Kinetic theory analysis of gas flows condensing on a plane condensed phase : Case of a mixture of a vapor and noncondensable gas*, Trans. th. stat. phys., 21 (4-6), (1992), 297-328. [10](#)
- [152] Y.Sone, K.Aoki, S.Takata, H.Sugimoto, A.Bobylev *Inappropriateness of the heat-conduction equation for description of a temperature field of a stationary gas in the continuum limit : examination by asymptotic and numerical computation of the Boltzmann equation*, Phys. Fluids, 8, 2, 628-638, 1996. Erratum : Phys. Fluids 8, 841 1996. [15](#)
- [153] G.Spiga, G.Toscani *The dissipative linear Boltzmann equation*, Appl. Math. Letters, 17, 3, 255-301, 2004. [65](#), [66](#)
- [154] H.Struchtrup *The BGK model with velocity dependent collision frequency* Cont. Mech. Thermodyn. 9, 23-31 (1997). [27](#)
- [155] S.Takata *Kinetic theory analysis of the two-surface problem of vapor-vapor mixture in the continuum limit*, Phys. Fluids, 16, 7, 2004. [14](#)
- [156] S.Takata, K.Aoki *Two-surface-problems of a multicomponent mixture of vapors and noncondensable gases in the continuum limit in the light of kinetic theory*, Phys. Fluids, 11, 9, 2743-2756, 1999. [14](#)
- [157] S.Takata, K.Aoki *The ghost effect in the continuum limit for a vapor-gas mixture around condensed phases : Asymptotic analysis of the Boltzmann equation* Transport Theory and Statistical Physic, 30, 205-237, 2001  
Erratum : Transport Theory and Statistical Physic, 31, 289, 2001. [14](#)
- [158] G.Toscani *Remarks on entropy and equilibrium states* Appl. Math. Lett. 12 (7) (199) 19-25. [65](#)
- [159] S.Ukai, T.Yang, H.S.Yu, *Nonlinear stability of boundary layers of the Boltzmann equation. I. The case Mj1*. Comm. Math. Phys. 244 (2004), no.1, 99109. [97](#)
- [160] Yu.A.Berezin, V.N.Khudick, M.S.Pekker, *Conservative finite-difference schemes for the Fokker-Planck equation not violating the law of an increasing entropy*, Vol. 69, 163-174,1987. [39](#)