

Physique statistique et irréversibilité : autour du Théorème H de Boltzmann. Fondements et Application Numérique

Frédéric Coquel
frederic.coquel@cmap.polytechnique.fr

24 janvier 2014

Ludwig Boltzmann publie en 1872 les éléments fondateurs de sa théorie cinétique des gaz qui modélise l'évolution en temps grand vers un état d'équilibre d'un gaz dilué initialement en déséquilibre thermo-mécanique. A cet effet, il introduit une équation intégro-différentielle gouvernant une fonction densité de distribution des particules composant un gaz modélisé par des sphères dures de masse et de rayon identiques. Ces particules subissent des collisions binaires supposées parfaitement élastiques (et donc réversibles) et voyagent à vitesse constante entre deux collisions successives.

L'équation proposée par Boltzmann peut être utilement comprise comme modélisant le régime limite du comportement d'un nombre \mathcal{N} de sphères dures lorsque \mathcal{N} croît à l'infini, avec un rayon r qui décroît vers zéro en maintenant le produit $\mathcal{N}r^2$ constant de sorte à restituer l'hypothèse d'un gaz dilué.

De manière spectaculaire et dans la limite rapportée, le comportement collectif des sphères dures est démontré être irréversible : il existe une certaine grandeur $H(t)$ construite sur la solution fonction densité de distribution, qui décroît au cours du temps. Le comportement monotone en temps de cette grandeur fait que la fonction de distribution en vitesse va inmanquablement relaxer vers un état d'équilibre caractérisé par la distribution de Maxwell. Évaluée sur cet équilibre, la quantité $H(t)$ coïncide (au signe près) avec l'entropie de Clausius. Ce résultat profond est connu sous le nom de Théorème H de Boltzmann.

Cette propriété de monotonie a immédiatement semblé s'opposer à l'hypothèse sous-jacente de micro-réversibilité des collisions dans l'ensemble des \mathcal{N} particules. Zemerlo formula des critiques très virulentes à l'encontre du Théorème H en arguant d'un théorème de Poincaré, publié en 1890. Ce théorème dit qu'un système dynamique conservatif, dont l'espace des phases est de *volume fini*, va repasser

au cours du temps aussi près que l'on veut de sa condition initiale, et ce pour un nombre infini dénombrable d'instants, tendant vers l'infini. Ce résultat semble alors lever un paradoxe profond avec l'existence d'un état d'équilibre immuable en temps grand, tel que prédit par le modèle mathématique obtenu dans la limite asymptotique $\mathcal{N} \rightarrow +\infty$.

Boltzmann répond au paradoxe de Zermelo en estimant le temps de récurrence moyen de retour à la condition initiale. Il l'estime de l'ordre de $10^{\mathcal{N}}$, une durée largement supérieure à l'âge de l'Univers lorsque le nombre de particules \mathcal{N} équivaut au nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A = 6.10^{23}$. Les récurrences prévues par le théorème de Poincaré sont dans le présent cas statistiquement indécélables et le passage à la limite $\mathcal{N} \rightarrow +\infty$ semble justifié. Kac établira en 1947 un théorème justifiant l'estimation de cette durée moyenne sur un modèle stochastique dû à Ehrenfest en 1907 et permettant de clarifier les paradoxes apparus dans les fondements de la physique statistique. On renvoie le lecteur intéressé aux pages Wikipédia consacrées à ces questions fondamentales ainsi qu'à des illustrations numériques simplissimes mais convaincantes notamment autour du modèle d'Ehrenfest.

L'objectif de ce projet est triple. Il s'agit dans un premier temps d'établir sur la base d'un modèle collisionnel (très) simplifié un analogue du Théorème H de Boltzmann. On esquissera alors les liens entre le modèle cinétique et sa limite hydrodynamique, les célèbres équations d'Euler pour un gaz compressible. Dans un second temps, nous décrirons comment le formalisme cinétique sous-jacent aux équations d'Euler permet de réaliser une approximation numérique de ses solutions, approximation très élégante car à la fois très simple et très robuste. Dans une troisième et dernière partie, nous aborderons les questions d'algorithmique et de simulation numérique. Par souci de simplicité, l'ensemble de ces questions ne sera traité qu'en une seule dimension d'espace.

Si l'énoncé peut paraître relativement long, il se trouve qu'il guide étroitement les manipulations algébriques à accomplir, ces dernières s'en trouvant ainsi grandement simplifiées. En contrepartie, on accordera la plus grande importance à la rédaction, à la pertinence du choix des paramètres numériques et de discrétisation, à la qualité de la présentation des résultats numériques, les graphiques notamment, ainsi qu'à leur interprétation à la lumière des résultats de l'analyse proposée. Ainsi fournir un CDROM des programmes réalisés est certes nécessaire mais insuffisant.

1 Etablissement du Théorème H de Boltzmann dans un cadre simplifié

La théorie cinétique de Boltzmann modélise l'évolution temporelle d'une fonction, notée $f(t, x, v)$, dite densité de distribution en vitesse cinétique v des parti-

cules d'un gaz. Cette fonction est telle qu'à l'instant t , la quantité $d\mathcal{N} = f(t, x, v)dx dv$ représente le nombre de particules présentes dans un volume d'espace dx centré en x et animées d'une vitesse v à dv près. L'équation gouvernant la densité f modélise, en conséquence des collisions élastiques entre les particules, l'évolution en temps grands de f vers une fonction d'équilibre, dite Maxwellienne et notée $M_0(\rho(x, t), T(x, t); v - u(x, t))$, où $\rho(x, t)$, $T(x, t)$ et $u(x, t)$ désignent respectivement la densité du gaz, sa température et sa vitesse moyenne en x à l'instant t . De manière centrale, ces quantités moyennes peuvent être calculées à chaque instant par la connaissance des trois premiers moments $(v^0, v^1, v^2/2)^T$ de la densité f :

$$\begin{pmatrix} \rho(t, x) \\ \rho u(t, x) \\ \rho E(t, x) \end{pmatrix} = \int_{\mathbb{R}} f(t, x, v) \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} dv, \quad (1)$$

où en une dimension d'espace, l'énergie totale ρE est définie par

$$\rho E = \frac{1}{2}\rho u^2 + \frac{1}{\gamma - 1}\rho T, \quad \gamma = 3. \quad (2)$$

Dans toute la suite, nous supposons la densité ρ et la température T strictement positives :

$$\rho(t, x) > 0, \quad T(t, x) > 0, \quad t > 0, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Dans la définition (2) de l'énergie totale, l'exposant adiabatique γ prend la valeur 3 car nous restreignons l'étude à un gaz composé de particules ne possédant qu'un seul degré de liberté en translation. La Maxwellienne est une fonction positive, paire en l'argument $(v - u)$, définie par :

$$M_0(\rho, T; v - u) = \frac{\rho}{\mu\sqrt{T}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2T}\right), \quad (4)$$

où

$$\mu = \int_{\mathbb{R}} \exp\left(-\frac{v^2}{2}\right) dv. \quad (5)$$

1) Vérifier que les trois premiers moments de la fonction Maxwellienne coïncident avec :

$$\rho = \int_{\mathbb{R}} M_0(\rho, T; v - u) dv, \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}} v M_0(\rho, T; v - u) dv, \quad (6)$$

$$\rho E = \int_{\mathbb{R}} \frac{v^2}{2} M_0(\rho, T; v - u) dv,$$

pour les mêmes valeurs de la densité, de la température et de la vitesse que celles impliquées dans la définition des moments de la solution $f(t, x, v)$ données en (1).

On exploitera avec avantage la propriété de parité en $(v - u)$ de la distribution Maxwellienne.

2) Afin de définir l'évolution en temps de la densité $f(t, x, v)$, nous privilégions ici une forme très simplifiée de l'équation de Boltzmann, dite formulation B.G.K pour Bogoliubov, Green et Kirkwood :

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{\lambda} (M_0(\rho, T; v - u) - f(t, x, v)), \\ f(0, x, v) = f_0(x, v) \end{cases} \quad (7)$$

où $\lambda > 0$ désigne un paramètre de relaxation fixant la vitesse de retour à l'équilibre de $f(t, x, v)$ vers la Maxwellienne $M_0(\rho, T; v - u)$.

Afin d'illustrer cette dernière assertion, on supposera dans cette question que la densité, la température et la vitesse ne dépendent ni du temps t , ni de l'espace x : *i.e.* $\rho(t, x) \equiv \rho > 0$, $T(t, x) \equiv T > 0$ et $u(t, x) \equiv u$. On considère alors le problème différentiel ordinaire :

$$\begin{cases} \frac{df}{dt}(t, v) = \frac{1}{\lambda} (M_0(\rho, T; v - u) - f(t, v)), \\ f(0, v) = f_0(v) \end{cases} \quad (8)$$

où la donnée initiale $f_0(v)$ est bien préparée, au sens où ses moments définies en (1) sont respectivement données par les constantes ρ , ρu et $(\rho u^2 + \rho T)/2$ (*cf.* (2)). Vérifier alors le comportement asymptotique suivant :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} f(t, v) = M_0(\rho, T; v - u). \quad (9)$$

où la limite Maxwellienne est d'autant plus vite atteinte en temps que λ est petit.

3) En revenant au cadre générale, prendre les trois premiers moments en vitesse v de l'équation B.G.K. (7) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} f(t, x, v) dv + \frac{\partial}{\partial x} \int_{\mathbb{R}} v \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} f(t, x, v) dv = \\ \frac{1}{\lambda} \int_{\mathbb{R}} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} (M_0(\rho, T; v - u) - f(t, x, v)) dv. \end{aligned} \quad (10)$$

pour établir la validité des trois lois de conservation suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + \rho T)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \int_R \frac{v^3}{2} f(t, x, v) dv = 0. \end{array} \right. \quad (11)$$

Vérifier que lorsque $f(t, x, v)$ a atteint son équilibre Maxwellien (9), nous avons l'identité :

$$\int_R \frac{v^3}{2} M_0(\rho, T; v - u)(x, t) dv = \{(\rho E + \rho T)u\}(t, x). \quad (12)$$

En d'autres termes, lorsque la densité de distribution $f(t, x, v)$ est suffisamment proche de la Maxwellienne, la densité moyenne $\rho(x, t)$ du gaz, sa température $T(x, t)$ et sa vitesse moyenne $u(t, x)$ sont essentiellement solutions des équations d'Euler pour un gaz parfait d'exposant adiabatique $\gamma = 3$. On exploitera la propriété de parité de M_0 en $(v - u)$.

4) On propose de faire le lien avec le second principe de la thermodynamique appliqué à un tel gaz. A cette fin, on introduit l'entropie cinétique

$$H_0(f) = f \log f, \quad (13)$$

définie pour des fonctions de distribution f strictement positives, ce que l'on supposera dorénavant dans toute la partie I de cet énoncé. Vérifier que cette fonction de f est convexe. On notera qu'à l'équilibre Maxwellien, $H_0(M_0)$ est paire en l'argument $(v - u)$.

Montrer la loi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_R H_0(f) dv + \frac{\partial}{\partial x} \int_R v H_0(f) dv \\ = -\frac{1}{\lambda} \int_R (f - M_0)(H'_0(f) - H'_0(M_0)) dv - \frac{1}{\lambda} \int_R H'_0(M_0)(f - M_0) dv \end{aligned} \quad (14)$$

où $H'_0(f)$ désigne la dérivée en f de l'entropie cinétique (13), $H'_0(f) = \log(f) + 1$. En arguant de la propriété de convexité de l'entropie cinétique (13), déduire de l'identité précédente l'inégalité suivante

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_R H_0(f) dv + \frac{\partial}{\partial x} \int_R v H_0(f) dv \leq 0. \quad (15)$$

Cette inégalité exprime une propriété de décroissance en moyenne de l'entropie cinétique le long des lignes de courant. Ce type de résultat est connu sous le nom de "Théorème H de Boltzmann".

5) En supposant de nouveau pour simplifier, la densité et la température constantes en temps et en espace $\rho(t, x) \equiv \rho > 0$, $T(t, x) \equiv T > 0$, et ici la vitesse identiquement nulle, $u(t, x) = 0$, établir en arguant de l'asymptotique en temps (9) :

$$\frac{d}{dt} \int_R H_0(f(t, v)) dv \leq 0 \quad \text{avec} \quad \lim_{t \rightarrow \infty} f(t, v) = M_0(\rho, T; v). \quad (16)$$

Vérifier sous les hypothèses précédentes :

$$S_0(\rho, T) = \int_R H_0(M_0(\rho, T; v)) dv = \frac{\rho}{\gamma - 1} \log \frac{\rho^{(\gamma-1)}}{T} - \eta \rho, \quad \gamma = 3, \quad (17)$$

où l'on précisera la constante réelle η . Il s'agit donc de l'entropie thermodynamique usuellement associée aux Equations d'Euler (11) pour un gaz polytropique d'exposant adiabatique $\gamma = 3$.

On vient donc d'établir que pour toute densité $\rho > 0$ et température $T > 0$, le problème de minimisation suivant

$$\min \left\{ \int_R H_0(f(v)) dv, \quad f(v) \geq 0, \quad \int_R \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} f(v) dv = \begin{pmatrix} \rho \\ 0 \\ \frac{1}{2} \rho T \end{pmatrix} \right\} \quad (18)$$

admet un unique minimiseur, la Maxwellienne $M_0(\rho, T; v)$ (4)–(5), le minimum coïncidant avec l'entropie thermodynamique $S_0(\rho, T)$ exhibée en (17). Ce type de résultat est connu sous le nom de "Principe de Gibbs".

2 Application à l'approximation numérique des équations d'Euler

Considérons le problème de Cauchy pour les équations d'Euler (11), re-écrit sous la forme condensée suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = 0, & x \in R, t > 0, \\ \mathbf{U}(0, x) = \mathbf{U}_0(x), & x \in R. \end{cases} \quad (19)$$

La notation \mathbf{U} désigne le vecteur d'inconnues $(\rho, \rho u, \rho E)^T$, la définition de la fonction flux vectorielle $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ se déduit sans peine de la forme développée des équations (11). La donnée initiale est choisie régulière et prend ses valeurs dans l'espace des états suivants

$$\Omega = \left\{ \mathbf{U} \in R^3; \rho > 0, u \in R, T = 2E - u^2 > 0 \right\}. \quad (20)$$

La solution exacte de (19) doit rester dans cet espace des états pour tout temps $t > 0$, sous peine sinon de ne plus exister après le premier temps d'arrivée sur le bord de Ω . On montre dans cette section comment construire très simplement à partir du formalisme cinétique sous tendant les équations (19) des solutions approchées respectant la contrainte d'appartenance à Ω .

Soit $\Delta x > 0$ un pas d'espace constant et Δt^n un pas de temps à l'instant t^n , défini ultérieurement. Les instants discrets t^n sont définis par la récurrence $t^n = t^{n-1} + \Delta t^{n-1}$, $n \geq 1$ avec la convention $t^0 = 0$. On définit une cellule \mathcal{C}_i , pour $i \in Z$, par l'intervalle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}[$ où nous avons posé $x_{i+1/2} = (i + 1/2)\Delta x$. La solution approchée, notée \mathbf{U}_Δ , est recherchée à chaque instant t^n sous la forme d'une fonction vectorielle à valeurs dans Ω , constante par morceaux dans chaque cellule \mathcal{C}_i :

$$\mathbf{U}_\Delta(t^n, x) = \mathbf{U}_i^n = (\rho_i^n, (\rho u)_i^n, (\rho E)_i^n)^T, \quad x \in \mathcal{C}_i, i \in Z. \quad (21)$$

La donnée initiale discrète est définie par moyenne de \mathbf{U}_0 sur chaque cellule

$$(\rho_\Delta, (\rho u)_\Delta, (\rho E)_\Delta)(0, x) = \mathbf{U}_\Delta(0, x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{U}_0(x) dx, \quad i \in Z. \quad (22)$$

Supposant connue la solution discrète $\mathbf{U}_\Delta(t^n, x)$ à la date t^n , celle-ci est avancée à l'instant suivant t^{n+1} en deux étapes.

Premier pas : On résout exactement l'équation de transport non collisionnelle

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = 0, & x \in R, t \in [t^n, t^n + \Delta t^n[\\ f(t^n, x, v) = f_n(x, v) \equiv M(\rho_\Delta, T_\Delta; v - u_\Delta)(t^n, x), & x \in \mathcal{C}_i, i \in Z. \end{cases} \quad (23)$$

Quand bien même la donnée initiale n'est que continue par morceaux, on admettra que la solution exacte de (23) reste donnée par la formule classique :

$$f(t, x, v) = f_n(x - v(t - t^n), v) \quad t \in]t^n, t^{n+1}], \quad x \in R. \quad (24)$$

Second pas : On prend les moments en vitesse de la solution du problème précédent à l'instant $t^{n+1-} = (t^n + \Delta t^n)^-$, pour définir ponctuellement en la variable

d'espace x , une mise à jour de la densité, de l'impulsion et de l'énergie totale, données par

$$\begin{pmatrix} \rho^{n+1-} \\ (\rho u)^{n+1-} \\ (\rho E)^{n+1-} \end{pmatrix} (x) = \int_R \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} f_n(x - v\Delta t^n, v) dv. \quad (25)$$

Ces mises à jour ne sont pas constantes en espace dans chaque cellule \mathcal{C}_i , ce qui motive l'opération de moyenne en espace suivante, définissant la mise à jour définitive à l'instant t^{n+1} de \mathbf{U}_i^{n+1} dans chaque cellule \mathcal{C}_i :

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_\Delta(t^{n+1}, x) &= (\rho_\Delta, (\rho u)_\Delta, (\rho E)_\Delta)^T(t^{n+1}, x) \\ &= \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (\rho^{n+1-}, (\rho u)^{n+1-}, (\rho E)^{n+1-})^T(y) dy, \quad x \in \mathcal{C}_i. \end{aligned} \quad (26)$$

Conformément à la définition de la donnée initiale $f_n(x, v)$ à l'instant t^n dans le problème cinétique (23), la phase collisionnelle

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{\lambda} \left(M(\rho_\Delta(t^{n+1}, x), T_\Delta(t^{n+1}, x); v - u_\Delta(t^{n+1}, x)) - f(t, x, v) \right), \quad (27)$$

est traitée dans le régime d'une paramètre de relaxation très petit ($\lambda \rightarrow 0^+$) de sorte que la fonction cinétique est projetée à l'instant t^{n+1} sur une Maxwellienne dans chaque cellule \mathcal{C}_i :

$$f(t^{n+1}, x, v) = M(\rho_\Delta, T_\Delta; v - u_\Delta)(t^{n+1}, x), \quad x \in \mathcal{C}_i, \quad i \in Z. \quad (28)$$

Ceci conclurait l'algorithme à la définition près de la Maxwellienne impliquée dans l'étape de retour à l'équilibre Maxwellien (28) et du pas de temps Δt^n utilisé dans la définition de l'instant $t^{n+1} = t^n + \Delta t^n$.

Commençons par discuter du choix de la Maxwellienne. Si l'on privilégiait la Maxwellienne M_0 telle que prescrite par la physique en (4), la propriété de ne pas être à support compact en vitesse cinétique ($M_0(v)$ ne s'annule jamais) rend virtuellement impossible le calcul exact des moments (25) de la solution cinétique (24). En effet, chaque cellule \mathcal{C}_i voit les queues de Gaussiennes de toutes les Maxwelliennes M_0 composant la donnée initiale $f_n(x, v)$ et qui sont en nombre infini. Ces contributions sont, localement dans chaque cellule et dans leur immense majorité, certes très petites mais toutefois non nulles. Cela rend peu praticable l'utilisation de M_0 . Au début des années 1990, Benoît Perthame montre qu'il est possible de construire des Maxwelliennes à support compact en vitesse cinétique et vérifiant un Théorème H de Boltzmann de la forme (18) pour des entropies cinétiques H bien choisies et compatibles avec des entropies mathématiques $S(\rho, T)$

distinctes de (17). Dans notre cas, un choix particulièrement simple que nous privilégions, est donné par :

$$M(\rho, T; v - u) = \frac{\rho}{2\sqrt{(3T)}} \text{Ind}_{\{|v-u| \leq \sqrt{(3T)}\}} \quad (29)$$

où $\text{Ind}_{\{|w| \leq a\}}$ avec $a > 0$ désigne la fonction caractéristique de l'intervalle $[-a, a]$ (elle y prend la valeur 1 et la valeur 0 partout ailleurs).

Venons en enfin à fixer le pas de temps Δt^n . Celui-ci est choisi de sorte à simplifier le plus possible le calcul exact des moments (25) de la solution cinétique (24). On impose à chacune des Maxwelliennes, à support compact en vitesse, de ne pas contribuer à plus de trois cellules consécutives sur la tranche de temps $[t^n, t^n + \Delta t^n[$, soit avec des notations claires et pour la Maxwellienne définie à la date t^n dans la cellule \mathcal{C}_i , de ne contribuer dans la formule (24) qu'aux cellules \mathcal{C}_{i-1} , \mathcal{C}_i et \mathcal{C}_{i+1} . La restriction sur la taille de Δt^n s'en déduit :

$$\frac{\Delta t^n}{\Delta x} \max_{i \in Z} \{|u_i^n| + \sqrt{(3T_i^n)}\} \leq 1. \quad (30)$$

6) On souhaite établir que la technique d'approximation proposée préserve naturellement la positivité de la densité et de la température. En supposant qu'à l'instant t^n , la densité et la température sont positives :

$$\rho_i^n > 0, \quad T_i^n > 0, \quad i \in Z, \quad (31)$$

il s'agit de montrer que cela reste vrai à la date t^{n+1} . A cet effet, commencer par établir que la formule de mise à jour ponctuelle en x (25) de la densité conduit à $\rho^{n+1-}(x) > 0$ pour $x \in R$. En déduire que dans chaque cellule, la définition de la solution discrète (26) conduit à $\rho_i^{n+1} > 0$ pour tout $i \in Z$. Ensuite justifier pourquoi $\{\rho T\}^{n+1-}(x) > 0$ pour $x \in R$, en argumentant sur l'origine cinétique du produit ρT . En écrivant l'identité

$$\begin{aligned} (\rho E)_i^{n+1} &= \frac{1}{2} \frac{\{(\rho u)_i^{n+1}\}^2}{\rho_i^{n+1}} + \frac{1}{2} \rho_i^{n+1} T_i^{n+1} \\ &= \frac{1}{2\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\{(\rho u)^{n+1-}\}^2}{\rho^{n+1-}}(x) + \{\rho T\}^{n+1-}(x) dx \end{aligned} \quad (32)$$

où par construction dans (26)

$$\rho_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \rho^{n+1-}(x) dx, \quad (\rho u)_i^{n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (\rho u)^{n+1-}(x) dx \quad (33)$$

déduire l'inégalité :

$$\rho_i^{n+1} T_i^{n+1} \geq \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\{(\rho u)^{n+1-}\}^2}{\rho^{n+1-}}(x) dx - \frac{\{(\rho u)_i^{n+1}\}^2}{\rho_i^{n+1}}, \quad i \in Z. \quad (34)$$

En invoquant l'inégalité de Jensen relative aux fonctions convexes $\mathcal{U} : \mathbf{U} \in \Omega \rightarrow \mathcal{U}(\mathbf{U}) \in R$, conclure à la positivité du produit $\rho_i^{n+1} T_i^{n+1}$ et donc à la positivité de la température T_i^{n+1} dans chaque cellule \mathcal{C}_i .

On admettra qu'il est possible d'établir que la méthode proposée est consistante en un sens à préciser avec un principe de décroissance de l'entropie.

3 Aspect algorithmique et calcul scientifique

On souhaite donner une formulation algorithmique simple à la méthode proposée. Sous la restriction (30) portant sur le pas de temps Δt^n , on se propose de montrer que la formule de mise à jour (26) de la solution discrète \mathbf{U}_i^{n+1} dans chaque cellule s'écrit de manière équivalente :

$$\mathbf{U}_i^{n+1} = \mathbf{U}_i^n - \frac{\Delta t^n}{\Delta x} \left(\mathbf{G}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n) - \mathbf{G}(\mathbf{U}_{i-1}^n, \mathbf{U}_i^n) \right) \quad (35)$$

pour une fonction flux numérique $\mathbf{G}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n)$ de la forme :

$$\mathbf{G}(\mathbf{U}_i^n, \mathbf{U}_{i+1}^n) = \mathbf{F}^+(\mathbf{U}_i^n) + \mathbf{F}^-(\mathbf{U}_{i+1}^n). \quad (36)$$

7) Etablir que pour le choix (29), les fonctions \mathbf{F}^\pm s'écrivent

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^+(\mathbf{U}_i^n) &= \int_{v \geq 0} \begin{pmatrix} v \\ v^2 \\ \frac{v^3}{2} \end{pmatrix} f_n(x_{i+1/2} - v\Delta t^n, v) dv, \\ \mathbf{F}^-(\mathbf{U}_{i+1}^n) &= \int_{v \leq 0} \begin{pmatrix} v \\ v^2 \\ \frac{v^3}{2} \end{pmatrix} f_n(x_{i+1/2} - v\Delta t^n, v) dv. \end{aligned} \quad (37)$$

Afin de montrer l'équivalence recherchée, on partira des moments de la solution cinétique (24) en s'inspirant de l'obtention des équations d'Euler (11) à partir des moments des solutions de l'équation cinétique telle qu'établie dans la première partie :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_R \left((1, v, \frac{v^2}{2})^T f(t, x, v) \right) dv + \frac{\partial}{\partial x} \int_R \left((v, v^2, \frac{v^3}{2})^T f(t, x, v) \right) dv = 0. \quad (38)$$

Puis, on intégrera ces équations sur le rectangle $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [t^n, t^{n+1}]$ en invoquant la condition initiale dans le premier pas (23), la formule de la solution exacte (24) ainsi que la définition de la mise à jour (26).

En désignant par $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ la fonction flux exacte associée à l'écriture condensée (19), vérifier la propriété de consistance

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}^+(\mathbf{U}) + \mathbf{F}^-(\mathbf{U}), \quad \text{pour tout } \mathbf{U} \in \Omega. \quad (39)$$

8) En introduisant le nombre de Mach $\mathcal{M}(\mathbf{U})$ défini par

$$\mathcal{M}(\mathbf{U}) = \frac{u}{c}, \quad c = \sqrt{3T}, \quad (40)$$

vérifier que la fonction vectorielle \mathbf{F}^+ vaut :

$$\mathbf{F}^+(\mathbf{U}) = 0, \quad \text{si } \mathcal{M}(\mathbf{U}) < -1, \quad \mathbf{F}^+(\mathbf{U}) = \mathbf{F}(\mathbf{U}), \quad \text{si } \mathcal{M}(\mathbf{U}) > +1 \quad (41)$$

et qu'elle trouve pour composantes $(F_\rho^+, F_{\rho u}^+, F_{\rho E}^+)^T$ lorsque $-1 < \mathcal{M}(\mathbf{U}) < +1$:

$$F_\rho^+ = \frac{\rho c}{4}(\mathcal{M} + 1)^2, \quad F_{\rho u}^+ = \frac{\rho c^2}{6}(\mathcal{M} + 1)^3, \quad F_{\rho E}^+ = \frac{\rho c^3}{16}(\mathcal{M} + 1)^4. \quad (42)$$

Donner des formules analogues pour \mathbf{F}^- .

9) Afin d'illustrer numériquement le comportement de la méthode numérique proposée, on s'intéressera à des problèmes posés sur un compact en espace, disons $[-1, 1]$ pour fixer les idées, et sur un compact en temps $[0, T]$, avec $T > 0$ à définir. Les données initiales envisagées ont la forme très spéciale suivante :

$$\mathbf{U}_0(x) = \begin{cases} \mathbf{U}_L, & -1 \leq x < 0, \\ \mathbf{U}_R, & 0 < x \leq 1, \end{cases} \quad (43)$$

où \mathbf{U}_L et \mathbf{U}_R désignent deux états constants choisis dans Ω . En raison de la vitesse finie de propagation dans les équations, la solution exacte reste égale à \mathbf{U}_L au voisinage de $x = -1$ (respectivement à \mathbf{U}_R au voisinage de $x = +1$) pour des temps $t \in [0, T]$ avec T suffisamment petit mais positif. Numériquement, on fera donc le choix d'un temps final $T > 0$ en accord avec cette dernière propriété, de sorte que l'on pourra utiliser des conditions de Neumann homogènes en $x = -1$ et $x = +1$. Programmer dans le langage de votre choix la méthode numérique proposée (35)-(42) et explorer différents choix de paires d'états $(\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R)$ pour différents pas d'espace Δx . On adoptera comme restriction sur le pas de temps, la condition :

$$\frac{\Delta t^n}{\Delta x} \max_{i \in Z} \{|u_i^n| + \sqrt{(3T_i^n)}\} = \frac{1}{2}. \quad (44)$$