



HAL
open science

Coupling Boltzmann and Navier-Stokes

Jean-François Bourgat, Patrick Le Tallec, François Mallinger, Benoît Perthame, Youchoun Qiu

► **To cite this version:**

Jean-François Bourgat, Patrick Le Tallec, François Mallinger, Benoît Perthame, Youchoun Qiu. Coupling Boltzmann and Navier-Stokes. [Research Report] RR-2281, INRIA. 1994. inria-00074390

HAL Id: inria-00074390

<https://inria.hal.science/inria-00074390v1>

Submitted on 24 May 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE EN INFORMATIQUE ET AUTOMATIQUE

Couplage Boltzmann Navier- Stokes

J.F. Bourgat, P. Le Tallec , F. Mallinger, B. Perthame , Y. Qiu

N° 2281

mai 1994

PROGRAMME 6

Calcul scientifique,
modélisation
et logiciel numérique



*R*apport
de recherche

1994



Couplage Boltzmann Navier-Stokes

J.F. Bourgat *, P. Le Tallec ** *, F. Mallinger *, B. Perthame*** *, Y. Qiu

Programme 6 — Calcul scientifique, modélisation et logiciel numérique
Projet MENUSIN

Rapport de recherche n° 2281 — mai 1994 — 90 pages

Résumé : Le but de ce travail est de calculer les écoulements hypersoniques autour d'un objet en phase de rentrée atmosphérique. Ce travail a été financé par le projet Européen Hermès (financement ESA, contrat ALG91/10, ATP DPH n° 6464/91, phase Hermès R/Q) et a été réalisé avec le suivi technique de Dassault Aviation. La méthode proposée couple les équations de Boltzmann utilisées près du corps et les équations de Navier-Stokes, utilisées en domaine lointain. Ce couplage s'effectue sans recouvrement et est imposé par le biais de conditions aux limites de demi-flux imposées écrites sur l'interface Boltzmann/Navier-Stokes. Ces conditions de flux sont obtenues à l'aide d'une interprétation cinétique des équations de Navier-Stokes. La version développée numériquement utilise un algorithme de marche en temps, résoud les équations de Navier-Stokes par un schéma SUPG mis à notre disposition par Dassault Aviation et résoud les équations de Boltzmann par une méthode de Monte-Carlo. Diverses simulations numériques sont ensuite présentées, utilisant essentiellement une stratégie de découpage non adaptative.

Mots-clé : hypersonique, couches limites raréfiées, couplage Boltzmann/Navier-Stokes, demi-flux cinétiques, SUPG, Monte-Carlo, partition sans recouvrement.

(Abstract: pto)

*. INRIA, Domaine de Voluceau, B.P. 105, F 78153 Le Chesnay Cedex

** Université de Paris IX,

*** Université de Paris VI,

Coupling Boltzmann and Navier-Stokes

Abstract: The objective of the present work is the computation of hypersonic flows around reentry vehicles at high altitude. This work was supported by the European project Hermès (ESA funding under contract ALG91/10, ATP DPH n° 6464/91, phase Hermès R/Q) and was performed under the technical supervision of Dassault Aviation. The proposed method couples Boltzmann equations, used next to the body, and Navier-Stokes equations used in the far field. This coupling is imposed without domain overlapping by imposing adequate interface boundary conditions on incoming half-fluxes. These boundary conditions are based on a kinetic interpretation of the Navier-Stokes equations. The numerical implementation of this technique uses a time marching algorithm, a SUPG Navier-Stokes solver developed by Dassault Aviation and solves the Boltzmann equations by a Monte Carlo technique. Different numerical results are finally presented, mainly using a nonadaptative partitioning technique.

Key-words: hypersonics, rarefied boundary layers, Boltzmann/Navier-Stokes coupling, kinetic half-fluxes, SUPG, Monte Carlo, nonoverlapping partitioning.

Table des matières

1	Introduction	4
2	Présentation des solveurs	5
2.1	Le solveur Navier-Stokes	5
2.1.1	Les équations de Navier-Stokes	5
2.1.2	Symétrisation du système	7
2.1.3	Formulation variationnelle discrète	8
2.1.4	Résolution	12
2.2	Le solveur Boltzmann	14
2.2.1	L'équation de Boltzmann	14
2.2.2	La méthode de Monte-Carlo	15
2.2.3	Le modèle de collision VHS	15
2.2.4	Les conditions aux limites	17
3	Les équations de Navier-Stokes cinétiques	19
3.1	Le modèle BGK	19
3.2	Ecriture cinétique des équations de Navier-Stokes	20
3.3	Calcul de P et Q	22
3.4	Remarques	25
3.5	Généralisation aux équations de Boltzmann	27
4	Le couplage Boltzmann / Navier-Stokes	28
4.1	Description de la géométrie	28
4.2	La décomposition cinétique des flux Navier-Stokes	29
4.3	Description du couplage	32
4.4	Implémentation des conditions aux limites de couplage	34
4.5	Algorithme global de couplage	36
4.6	Résultats numériques	38
4.6.1	Paramètres de l'écoulement	38
4.6.2	Solution Boltzmann de référence	39
4.6.3	Premier résultat de couplage Boltzmann/Navier-Stokes	40
4.6.4	Deuxième résultat de couplage Boltzmann/Navier-Stokes	41
5	Conclusion	42

6	Annexe	45
6.1	Calcul des demi-flux Navier-Stokes	45
6.2	Notation	46
6.3	Les changements de variables	48
6.4	Calcul de la composante $F_1(U)^{+,n}$	49
6.5	Calcul des composantes $F_2(U)^{+,n}$ et $F_3(U)^{+,n}$	53
6.6	Calcul de la composante $F_4(U)^{+,n}$	59

1 Introduction

Le but de ce travail, réalisé dans le cadre du programme Recherche/Qualification du projet Européen Hermes, consiste à calculer des écoulements hypersoniques autour d'un objet en phase de réentrée dans l'atmosphère, c'est-à-dire à très haute altitude. Le problème que l'on rencontre alors réside dans le choix du modèle à utiliser. Le nombre de Knudsen Kn (rapport du libre parcours moyen sur une longueur caractéristique) est un paramètre qui permet de déterminer ce choix. Pour $Kn \in [0.01, 10.]$, le gaz est très raréfié et le modèle de Boltzmann convient le mieux. Par contre lorsque Kn est plus petit le gaz est dense et il est nécessaire d'utiliser un modèle fluide. En effet un algorithme Boltzmann serait beaucoup trop coûteux. Le problème qui nous concerne correspond à une situation intermédiaire pour laquelle il est nécessaire de prendre en compte simultanément les deux situations précédentes. Une idée pour le faire consiste à réaliser un couplage c'est-à-dire à utiliser le modèle Boltzmann près du corps et le modèle Navier-Stokes loin du corps.

Dans un premier temps nous présenterons les deux solveurs utilisés dans tous les tests numériques. Le solveur Navier-Stokes est basé sur une méthode d'éléments finis de type SUPG. Ce code a été développé par M. Mallet et F. Shakib et une version 2-D a été fournie à l'INRIA par Dassault Aviation. Le code Boltzmann repose sur une méthode récente, mise au point par une équipe de chercheurs de l'université de Kaiserslautern, 'the finite pointset method' [8]. Une version du code, provenant de l'université de Kaiserslautern, a été développée à l'INRIA par J.F. Bourgat [3] et Y. Qiu afin de prendre en compte des gaz polyatomiques ainsi que des conditions de bord hétérogènes.

Nous présenterons ensuite le modèle BGK (Bhatnagar-Gross-Krook), issu de la théorie cinétique des gaz, qui permet d'obtenir simplement une interprétation cinétique des équations de Navier-Stokes. Ce modèle a été étudié par B. Perthame. Ces travaux ont permis de mettre au point un code Euler basé sur une discrétisation de type volumes finis avec un splitting cinétique des flux, voir [12]. C'est cette dernière idée qui est à la base du couplage. En utilisant ce code Y. Qiu a obtenu les premiers résultats numériques pour le couplage Euler-Boltzmann, montrant ainsi la faisabilité et la validité de la méthode.

Enfin nous présenterons la technique de couplage des équations de Boltzmann et de Navier-Stokes. Le couplage est réalisé par le biais de conditions aux limites, de demi-flux imposés, la construction des demi-flux se faisant à partir de leur inter-

préparation cinétique. Nous insisterons, en particulier, sur l'implémentation de ces conditions aux limites.

Des résultats numériques, présentés à la fin de cette première partie, permettront de constater l'efficacité de cette méthode.

2 Présentation des solveurs

Le concept SUPG (Streamline Upwind / Petrov-Galerkin) a été introduit par Hugues et Brooks [1] [2]. Initialement, la méthode SUPG a été appliquée à l'équation scalaire d'advection-diffusion. Un développement de cette méthode a été proposé par Mallet [11] pour la résolution des équations d'Euler et de Navier-Stokes pour un fluide compressible en dimension deux et trois. En particulier, il a introduit un changement de variables entropiques et a généralisé la notion d'opérateur "streamline" à un système multidimensionnel. Dans la suite, nous utiliserons la formulation éléments finis espace-temps due à F. Shakib [15].

2.1 Le solveur Navier-Stokes

2.1.1 Les équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes compressibles, en dimension 2, sont données par le système suivant

$$\frac{\partial}{\partial t} U + \frac{\partial}{\partial x_i} F_i^c - \frac{\partial}{\partial x_i} F_i^d = 0, \quad (1)$$

sous les notations

$$U = \rho \begin{pmatrix} 1 \\ u_1 \\ u_2 \\ E \end{pmatrix}, \quad \text{variables conservatives,}$$

$$F_i^c = \rho u_i \begin{pmatrix} 1 \\ u_1 \\ u_2 \\ E \end{pmatrix} + p \begin{pmatrix} 0 \\ \delta_{1i} \\ \delta_{2i} \\ u_i \end{pmatrix}, \quad \text{flux convectif,}$$

$$F_i^d = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1i} \\ \tau_{2i} \\ \tau_{ij} u_j \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -q_i \end{pmatrix}, \quad \text{flux diffusif,}$$

avec

$$\begin{aligned} \rho & \quad \text{densité,} \\ (u_1, u_2)^T & \quad \text{vecteur vitesse,} \\ E = \frac{1}{2} |u|^2 + e & \quad \text{énergie totale,} \\ e & \quad \text{énergie interne macroscopique,} \\ p & \quad \text{pression statique,} \\ \tau_{ij} & \quad \text{tenseur des contraintes visqueuses,} \\ & \quad \tau_{ij} = \lambda u_{k,k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j \right), \\ & \quad \lambda, \mu \text{ coefficients de viscosité,} \\ q = (q_1, q_2)^T & \quad \text{flux de chaleur massique,} \\ & \quad q_i = -\kappa \frac{\partial}{\partial x_i} T, \\ & \quad T \text{ température,} \\ & \quad \kappa \text{ coefficient de conductibilité thermique.} \end{aligned}$$

Pour clore le système, on introduit les équations d'état suivantes

$$p = (\gamma - 1) \rho e,$$

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v},$$

C_p chaleur spécifique à pression constante,

C_v chaleur spécifique à volume constant,

$$e = C_v T.$$

2.1.2 Symétrisation du système

Il est pratique de réécrire le système (1) sous la forme quasi-linéaire

$$\frac{\partial}{\partial t} U + A_i U_{,i} - (K_{ij} U_{,j})_{,i} = 0, \quad (2)$$

où

$$- A_i = F_{i,U}^c,$$

$$- K = [K_{ij}] \text{ matrice de diffusion, avec } K_{ij} U_{,j} = F_i^d,$$

On définit alors la fonction d'entropie H par

$$H = H(U) = -\rho s,$$

où

$$s = \ln(p \rho^{-\gamma}),$$

désigne l'entropie spécifique adimensionnée.

La fonction H est strictement convexe par rapport à U et permet par conséquent de définir le changement de variable suivant

$$U \longrightarrow V,$$

avec

$$V = \frac{\partial}{\partial U} H = \frac{1}{\rho e} \begin{pmatrix} -\rho E + \rho e(\gamma + 1 - s) \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ -\rho \end{pmatrix}.$$

Avec ce changement de variables, le système (2) peut encore s'écrire

$$\tilde{A}_0 V_{,t} + \tilde{A}_i V_{,i} - (\tilde{K}_{ij} V_{,j})_{,i} = 0, \quad (3)$$

où

$$\begin{aligned}
- \tilde{A}_0 &= \frac{\partial}{\partial V} U, \\
- \tilde{A}_i &= A_i \tilde{A}_0, \\
- \tilde{K}_{ij} &= K_{ij} \tilde{A}_0.
\end{aligned}$$

On retiendra les deux propriétés essentielles vérifiées par le nouveau système (3):

(i) Propriétés de positivité et de symétrie déduites de l'expression de H :

- \tilde{A}_0 est symétrique définie positive,
- \tilde{A}_i est symétrique,
- $\tilde{K} = [\tilde{K}_{ij}]$ est symétrique définie semi-positive.

Noter que les propriétés de symétrie facilitent le préconditionnement des systèmes à résoudre.

(ii) En effectuant le produit scalaire L^2 de (3) par V , on obtient l'inégalité suivante

$$(\rho s)_{,t} + (\rho s u_i)_{,i} + \frac{1}{C_v} \left(\frac{q_i}{T} \right)_i \geq 0, \quad (4)$$

(puisque \tilde{K} est définie positive).

La relation (4) est l'inégalité de Clausius-Duhem qui gouverne la production d'entropie.

2.1.3 Formulation variationnelle discrète

Soit $0 = t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_N = T$ une partition de l'intervalle $]0, T[$, et $I_n =]t_n, t_{n+1}[$ le $n^{ième}$ intervalle. On définit alors une tranche espace-temps par

$$Q_n = \Omega \times I_n,$$

de bord

$$P_n = \Gamma \times I_n.$$

Considérons alors la $n^{ième}$ tranche espace-temps Q_n (fig. 1).

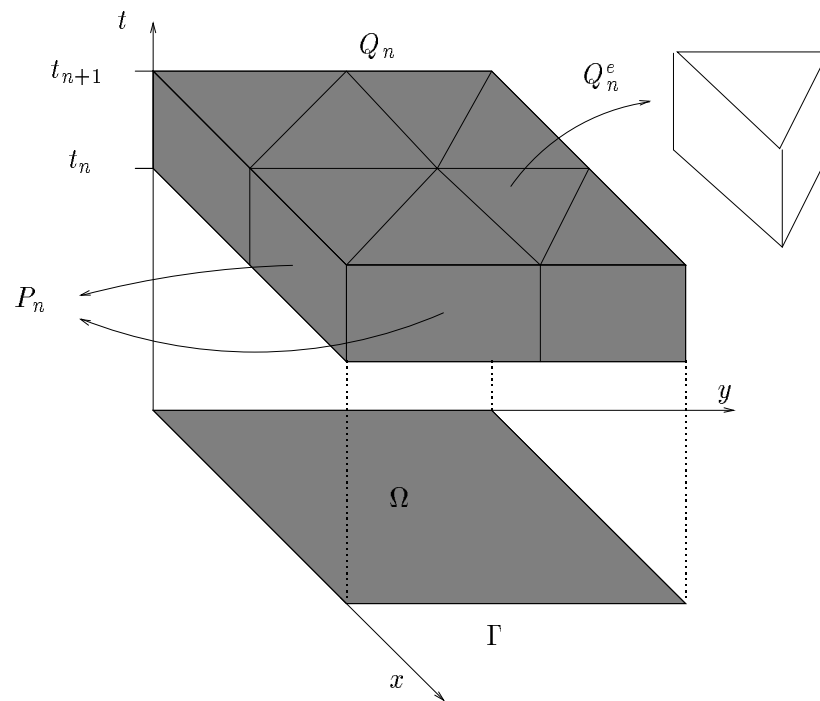


FIG. 1 - une tranche espace-temps

Le domaine spatial est subdivisé en $(n_{el})_n$ éléments, Ω_n^e , $e = 1, \dots, (n_{el})_n$. Ainsi, pour la n^{ime} tranche, le domaine espace-temps est partagé en éléments

$$Q_n^e = \Omega_n^e \times I_n.$$

On définit alors l'ensemble des fonctions tests S_n^h par

$$S_n^h = \{v^h/v^h \in (C^0(Q_n))^m, v^h_{/Q_n^e} \in (P_k(Q_n^e))^m, q(v^h) = g(t) \text{ sur } P_n\},$$

et l'ensemble Υ_n^h des fonctions poids par

$$\Upsilon_n^h = \{w^h/w^h \in (C^0(Q_n))^m, w^h_{/Q_n^e} \in (P_k(Q_n^e))^m, q'(w^h) = 0 \text{ sur } P_n\}.$$

Dans la définition précédente l'entier m est le nombre local de degrés de liberté et P_k l'ensemble des polynômes d'interpolation d'ordre k . La fonction g représente les valeurs imposées sur les bords en terme de variables non-conservatives (ρ, u, T, p) . La fonction $q : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^i$, $1 \leq i \leq m$, est la fonction non linéaire de passage des variables entropiques aux variables non-conservatives. De plus, nous avons besoin des équations de contrainte sur les fonctions poids, lesquelles sont données par $q'(W) = 0$, où $q' : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^i$, $1 \leq i \leq m$.

Les fonctions poids sont supposées continues dans chaque tranche espace-temps mais discontinues en t_i ; $i = 1, \dots, N - 1$. On pose

$$W(t_n^\mp) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^\mp} W(t_n + \epsilon),$$

et on définit le saut en temps de W par

$$[W(t_n)] = W(t_n^+) - W(t_n^-).$$

Il est bien connu que dans certaines situations la méthode de Galerkin classique engendre des oscillations sur la solution numérique. Afin de stabiliser la méthode on utilise une formulation de type SUPG. Cette méthode consiste à perturber convenablement les fonctions poids. Ainsi W^h est remplacé par $W^h + P^h$ avec; $P^h = P_{LS}^h + P_{DC}^h$, où P_{LS}^h est le terme stabilisateur et P_{DC}^h un terme permettant de bien décrire le choc.

La formulation variationnelle est alors donnée par

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \text{Dans chaque tranche espace-temps } Q_n, n = 0, \dots, N-1, \\
 \text{trouver } V^h \in S_n^h \text{ tel que, quelque soit } W^h \in \Upsilon_n^h, \text{ on ait} \\
 \\
 \int_{Q_n} \left(-W_{,t}^h \cdot U(V^h) - W_{,i}^h \cdot F_i^c(V^h) + W_{,i}^h \cdot \tilde{K}_{ij} V_{,j}^h \right) dQ \\
 \hspace{20em} \text{(premier terme Galerkin)} \\
 \\
 + \int_{\Omega} \left(W^h(t_{n+1}^-) \cdot U(V^h(t_{n+1}^-)) - W^h(t_n^+) \cdot U(V^h(t_n^-)) \right) d\Omega \\
 \hspace{20em} \text{(terme de saut)} \\
 \\
 + \sum_{e=1}^{(n_e)_n} \int_{Q_n^e} \left(L(W^h) \cdot \tau L(V^h) \right) dQ \\
 \hspace{20em} \text{(terme stabilisateur } \\
 \hspace{20em} \text{de type moindre carrés)} \\
 \\
 + \sum_{e=1}^{(n_e)_n} \int_{Q_n^e} DC(W^h, V^h) dQ \\
 \hspace{20em} \text{(terme de capture de choc)} \\
 \\
 = \int_{P_n} W^h \cdot \left(-F_i^c(V^h) + F_i^d(V^h) \right) \cdot n_i dP \\
 \hspace{20em} \text{(terme de bord de Galerkin),}
 \end{array} \right.$$

où L est l'opérateur donné par

$$L = \tilde{A}_i \frac{\partial}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tilde{K}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \right)$$

et τ est une matrice $m \times m$. Les définitions de la matrice τ et du terme de capture de choc DC sont développées dans [11] et [15]. Les première, deuxième et dernière intégrales résultent de la formulation Galerkin discontinue en temps. A la deuxième intégrale, provenant de l'intégration par partie en temps de

$$\int_{Q_n} W^h \cdot \frac{\partial}{\partial t} U(V^h) dQ,$$

on ajoute la condition de saut

$$0 = \int_{\Omega} W^h(t_n^+) \cdot [U(V^h(t_n))] d\Omega.$$

Cette condition de saut constitue le mécanisme par lequel l'information se propage d'une tranche espace temps à une autre. On retiendra encore que le terme de droite de cette égalité devra être modifié pour l'implémentation du couplage.

2.1.4 Résolution

Nous n'utiliserons, pour les tests numériques, que des approximations constantes en temps. Les fonctions tests et poids peuvent alors s'écrire

$$V^h(x, t) = \sum_{A=1}^{(n_{pn})(n)} N_A^{(n)}(x) v_{A;(n+1)}, \quad x \in \Omega; t \in I_n, \quad (5)$$

$$W^h(x, t) = \sum_{A=1}^{(n_{pn})(n)} N_A^{(n)}(x) w_{A;(n+1)}, \quad x \in \Omega; t \in I_n, \quad (6)$$

où

- $(n_{pn})(n)$ est le nombre de noeuds pour la n^{ieme} tranche espace-temps,
- $v_{A;(n+1)}$ est le vecteur constitué des m inconnues au noeud A ,
- $w_{A;(n+1)}$ sont les valeurs aux noeuds de la fonction poids correspondant à $v_{A;(n+1)}$,
- $N_A^{(n)}(x)$ est la fonction de base, en espace, pour le noeud A de la n^{ieme} tranche espace-temps.

En remplaçant (5) et (6) dans la formulation variationnelle précédente on est conduit à résoudre un système algébrique non linéaire de la forme

$$w \cdot G(v; v_{(n)}) = 0,$$

où

$$v = (v_1^T, v_2^T, \dots, v_{n_{pn}}^T)^T,$$

est le vecteur inconnu, et

$$v_{(n)} = (v_{(1,n)}^T, v_{(2,n)}^T, \dots, v_{(n_{pn}(n-1),n)}^T)^T,$$

le vecteur condition initial. En supposant qu'il n'y a pas de condition forte (pour l'analyse des conditions aux limites voir [15], ch. 5), le système à résoudre se ramène à

$$G(v; v_{(n)}) = 0.$$

En pratique ce système n'est pas résolu de manière exacte. Nous utilisons un algorithme de prédiction multi-correction du premier ordre.

On cherche v^{i+1} , approximation de $v_{(n+1)}$, telle que

$$v^i \text{ connu} \quad (v^0 = v_{(n)}),$$

et

$$G(v^{i+1}; v_{(n)}) \simeq G(v^i; v_{(n)}) + \frac{\partial}{\partial v} G(v^i; v_{(n)}) (v^{i+1} - v^i) = 0.$$

Alors, en posant

$$R^i = -G(v^i; v_{(n)}),$$

$$M^i = \frac{\partial}{\partial v} G(v^i; v_{(n)}),$$

$$\Delta v^i = v^{i+1} - v^i,$$

on est conduit à résoudre le système linéaire

$$M^i \Delta v^i = R^i.$$

Les détails de l'algorithme utilisé, pour un pas de temps, sont présentés ci-dessous

– Etant donné :

i_{max} , nombre de corrections,

i_{freq} , fréquence d'assemblage de la matrice du système,

- Prédiction :
 - $v^0 = v_{(n)}$
 - Calculer Δt (pas de temps local)
- Multi-Correction :
 - Pour i de 0 à $i_{max} - 1$
 - Assembler $R^i(v^i; v_{(n)})$
 - Si $mod(n \times i_{max} + i, i_{freq}) = 0$ assembler $M = M(v^i)$
 - Résoudre $M \Delta v^i = R^i (*)$
 - $v^{i+1} = v^i + \Delta v^i$
 - Fin de la boucle Multi-Correction
- $v_{(n+1)} = v^{i+1}$.

Le système (*) est résolu par un algorithme de GMRES linéaire.

2.2 Le solveur Boltzmann

2.2.1 L'équation de Boltzmann

La théorie cinétique décrit le gaz par l'intermédiaire d'une fonction de distribution $f(x, v, e_m, t)$ représentant la densité, à l'instant t , des particules ayant la position x , la vitesse v et l'énergie interne microscopique e_m . Dans le cas d'un gaz très raréfié, les particules n'interagissent pas entre elles et f est solution de l'équation de transport libre

$$\frac{\partial}{\partial t} f + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} f = 0.$$

Par contre dans le cas d'un gaz plus dense les particules sont soumises à des collisions. Dans ce cas f est solution de

$$\frac{\partial}{\partial t} f + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} f = Q(f, f).$$

Le terme de collision Q est quadratique et s'écrit, dans le cas d'un gaz monoatomique ($e_m = 0$), de la manière suivante

$$Q(f, f)(x, v, t) = \int_{v_1 \in \mathbb{R}^3} \int_{\omega \in S^2} (f'_1 f' - f f_1) q(v - v_1, \omega) dv_1 d\omega,$$

où

$$\begin{aligned} f_1 &= f(x, v_1, t), \\ f' &= f(x, v', t), \\ f'_1 &= f(x, v'_1, t), \end{aligned}$$

où (v, v_1) et (v', v'_1) désignent les vitesses des particules avant et après une collision de paramètre ω et S^2 la sphère unité. On renvoie à [4] pour une description de Q dans le cas d'un gaz polyatomique. Le terme $q(v - v_1, \omega)$ représente la section efficace de collision. On décrira plus loin en détails la forme de q pour le modèle VHS.

2.2.2 La méthode de Monte-Carlo

La distribution f est représentée par un ensemble de particules ayant chacune une position x_i , une vitesse v_i et une énergie interne microscopique e_m propres. La méthode repose tout d'abord sur une décomposition de l'opérateur de transport et de l'opérateur de collision. Ainsi le processus qui détermine l'état du système au temps $n + 1$, connaissant l'état du système au temps n , se décompose en deux étapes; une étape de **transport libre** et une étape de **collision**. Pendant l'étape de transport libre, de durée Δt , chaque particule se déplace suivant la loi $x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t v_i^n$. Pour l'étape de collision, le domaine est décomposé en cellules suffisamment petites pour que le gaz soit homogène en espace. Alors deux particules d'une même cellule peuvent entrer en collision: la technique de collision est décrite dans le paragraphe suivant.

2.2.3 Le modèle de collision VHS

Pour le modèle **VHS** (Variable Hard Sphere), la section efficace de collision q est proportionnelle à une puissance de la vitesse relative des deux particules avant le choc et est donnée par:

$$q(v - v_1, \omega) = \gamma \cos(\theta) |v - v_1|^{1-2\alpha},$$

$$\theta = \text{angle}(v - v_1, \omega).$$

Si on pose $\omega = \frac{1}{2} + \alpha$, ce modèle conduit à la limite fluide, par le développement de Chapman-Enskog, à une viscosité de la forme $\mu = K T^\omega$. On verra plus tard que cette expression de la viscosité est analogue à celle obtenue avec le modèle BGK. Maintenant, pour deux particules (v_i, w_i) d'une même cellule C_i , une collision a lieu selon la probabilité

$$q_i = \Delta t^* \frac{N_c - 1}{N_{c\infty}} \frac{1}{\sqrt{2} \Gamma(2 - \alpha)} |v_i^* - w_i^*|^{1-2\alpha},$$

où

* représente des grandeurs adimensionnées,

$$L^* = \frac{L}{MFP_\infty},$$

$$t^* = \frac{\sqrt{2} RT_\infty}{MFP_\infty} t,$$

$$v^* = \frac{v}{\sqrt{2} RT_\infty},$$

N_c est le nombre de particules de la cellule considérée,

$N_{c\infty}$ est le nombre de particules que contiendrait la même cellule à l'infini.

MFP_∞ est le libre parcours moyen d'une particule dans l'écoulement infini non perturbé.

Remarque :

Dans le modèle VHS, le libre parcours moyen est lié à la viscosité par la loi

$$MFP = (7 - 2\omega)(5 - 2\omega) \frac{2\mu_\infty}{15\rho_\infty\sqrt{2\pi}RT_\infty},$$

et la définition du Reynolds est

$$(Re/m) = \frac{2(7 - 2\omega)(5 - 2\omega)}{15\sqrt{2}\pi} \frac{\sqrt{\gamma}}{MFP_\infty} M_\infty.$$

2.2.4 Les conditions aux limites

D'un point de vue mathématique, on veut simuler la condition aux limites

$$f_{CL} = Maxwell(\rho, u, T)(v),$$

pour les particules rentrantes (ie $v \cdot n \leq 0$). Pour ce faire, on génère une couche de cellules frontières. Pour chacune de ces cellules C_i on se donne $(\rho, u, T)_{(C_i, \infty)}$ et on génère un nombre de particules qui est l'entier le plus proche de ρN_∞ . La position de chaque particule est donnée par une loi de distribution uniforme, la vitesse et l'énergie interne sont données par la maxwellienne généralisée de paramètres $(\rho, u, T)_{(C_i, \infty)}$. Ainsi on choisit

$$v_x = (-T \ln(a_3))^{\frac{1}{2}} \cos(2\pi a_1),$$

$$v_y = (-T \ln(a_3))^{\frac{1}{2}} \sin(2\pi a_1),$$

$$v_z = (-T \ln(a_4))^{\frac{1}{2}} \cos(2\pi a_2),$$

$$e_m = \frac{N d l i}{4} (-T \ln(a_5)),$$

où $(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5)$ sont cinq nombres tirés selon une loi uniforme entre 0 et 1, et $N d l i$ le nombre de degrés de liberté internes.

Réflexion sur le corps

On peut considérer trois types de réflexion d'une particule rentrant en collision avec l'obstacle.

- (i) Réflexion spéculaire (fig. 2): Les particules rebondissent élastiquement sur l'obstacle.

$$v' = v'_s = v + 2(v \cdot n)n$$

(La réflexion spéculaire correspond à la condition de glissement).

- (ii) Réflexion avec accommodation (fig. 3): Dans ce cas les particules sont thermalisées à la paroi et sont réémises à la vitesse $v' = v'_a$ donnée par une maxwellienne de paramètre T_W , où T_W est la température à la paroi du corps. (La réflexion avec accommodation correspond à une condition d'adhérence).

- (iii) Le modèle de Maxwell: Ce modèle est une combinaison linéaire des deux modèles précédents qui s'écrit

$$v' = (1 - \alpha)v'_s + \alpha v'_a, \quad \text{où } \alpha \in [0, 1].$$

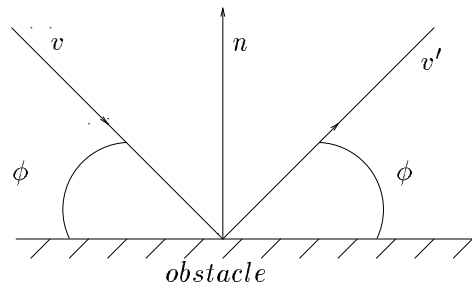


FIG. 2 - réflexion spéculaire

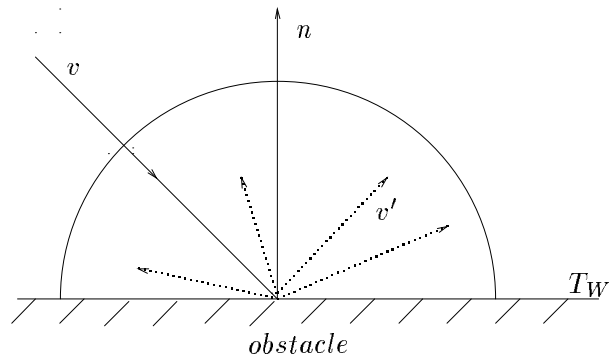


FIG. 3 - réflexion avec accommodation

3 Les équations de Navier-Stokes cinétiques

3.1 Le modèle BGK

Comme nous l'avons vu, l'équation de Boltzmann s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} f + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} f = \frac{1}{\varepsilon} J(f, f).$$

où ε est le libre parcours, apparaissant par adimensionnement. La complexité de l'opérateur de collision a conduit beaucoup de chercheurs à utiliser un modèle plus simple qui conserve les propriétés de base de l'équation de Boltzmann. C'est le cas du modèle BGK, pour lequel l'opérateur de collision $J(f, f)$ est remplacé par

$$J(f, f) = \frac{\rho}{R^\alpha T^\alpha} (M(f) - f),$$

où α est une constante et $M(f)$ est la maxwellienne associée à f . Plus précisément le modèle que nous utiliserons est le suivant

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} f + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} f = \frac{\rho}{\varepsilon R^\alpha T^\alpha} (M(f) - f), \\ \frac{\partial}{\partial t} g + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} g = \frac{\rho}{\varepsilon R^\alpha T^\alpha} (\lambda R T M(f) - g), \end{cases} \quad (7)$$

où

$$f = f(x, v, t),$$

$$g = g(x, v, t), \text{ pour } (x, v) \in \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \text{ et } t \geq 0,$$

$$\lambda = \frac{3(1-\gamma) + 2}{2(\gamma-1)}, \text{ pour } 1 \leq \gamma \leq \frac{3+2}{3},$$

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

On peut considérer que la fonction f représente la fonction de distribution des particules portant de l'énergie cinétique et que g représente la fonction de distribution des particules portant de l'énergie interne. L'introduction de la fonction g permet donc de prendre en compte l'énergie interne microscopique de rotation dans le cas

d'un gaz diatomique. Dans le cas d'un gaz monoatomique il suffit de considérer la première équation de ce système.

Enfin ρ , u et T sont les valeurs moyennes définies par

$$\begin{pmatrix} \rho(x, t) \\ \rho(x, t) u(x, t) \\ \rho(x, t) \left(\frac{1}{2} |u(x, t)|^2 + \frac{R}{(\gamma - 1)} T(x, t) \right) \end{pmatrix} = \int_{v \in \mathbb{R}^3} [\beta_1(v) f(x, v, t) + \beta_2(v) g(x, v, t)] dv,$$

où

$$\beta_1(v) = \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{|v|^2}{2} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \beta_2(v) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

3.2 Ecriture cinétique des équations de Navier-Stokes

On montre dans ce paragraphe comment obtenir les équations de Navier-Stokes, portant sur les variables macroscopiques (ρ, u, T) , à partir du modèle BGK, portant sur les grandeurs microscopiques f et g . Cette interprétation cinétique des équations de Navier-Stokes permet ensuite de les coupler à un modèle Boltzmann.

Par développement limité en ϵ , on tire du système (7)

$$f = f_{NS} + O(\epsilon^2),$$

$$g = g_{NS} + O(\epsilon^2),$$

où

$$\begin{aligned} f_{NS} &= M - \frac{\epsilon R^\alpha T^\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M \right), \\ g_{NS} &= \lambda R T M - \frac{\epsilon R^{1+\alpha} T^\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\lambda T M) + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\lambda T M) \right). \end{aligned}$$

Par intégration de (7), on en déduit

$$\int_{v \in \mathbb{R}^3} \left[\beta_1(v) \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x, v, t) + \beta_2(v) \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} \right) g(x, v, t) \right] dv = 0.$$

Ce qui s'écrit

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\begin{array}{l} \rho(x, t) \\ \rho(x, t) u(x, t) \\ \rho(x, t) \left(\frac{1}{2} |u(x, t)|^2 + \frac{R}{(\gamma-1)} T(x, t) \right) \end{array} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left(\int_{v \in \mathbb{R}^3} v [\beta_1(v) f_{NS}(x, v, t) + \beta_2(v) g_{NS}(x, v, t)] dv \right) = O(\epsilon^2). \end{aligned}$$

Les équations de Navier-Stokes sont obtenues en négligeant le terme de droite. Il en résulte que les flux sont donnés par l'expression cinétique suivante

$$F(\rho, u, T)(x, t) = \int_{v \in \mathbb{R}^3} v [\beta_1(v) f_{NS}(x, v, t) + \beta_2(v) g_{NS}(x, v, t)] dv.$$

Un calcul simple mais long permet d'aboutir au système suivant

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div}(\rho u) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \operatorname{div}(\rho u \otimes u + P) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(\frac{1}{2} |u(x, t)|^2 + \frac{R}{(\gamma-1)} T(x, t) \right) \right] + \\ \quad + \operatorname{div} \left[\rho \left(\frac{1}{2} |u(x, t)|^2 + \frac{R}{(\gamma-1)} T(x, t) \right) u + P u + Q \right] = 0, \end{array} \right.$$

où $u \otimes u = [u_i u_j]_{i,j}$, $P = [P_{ij}]_{i,j}$ sont des tenseurs et $Q = (q_i)_i$ est un vecteur. Les termes P et Q sont donnés par les expressions suivantes

$$\begin{aligned} P &= \int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f_{NS} dv, \\ Q &= \int_{v \in \mathbb{R}^3} \left(\frac{|v - u|^2}{2} f_{NS} + g_{NS} \right) (v - u) dv. \end{aligned}$$

Pour se ramener à une formulation plus classique des équations de Navier- Stokes et pour mettre en évidence les coefficients de viscosité et de conductibilité thermique, on calcule ci-dessous les intégrales P et Q .

3.3 Calcul de P et Q

Par définition, il vient

$$\begin{aligned} P &= \int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f_{NS} dv \\ &= \int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) M dv \\ &\quad - \frac{\epsilon R^\alpha T^\alpha}{\rho} \int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) \left[\frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M \right] dv. \end{aligned}$$

Un calcul très facile donne pour le premier terme du membre de droite

$$\int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) M dv = p I_3,$$

où $p = \rho RT$ représente la pression et I_3 la matrice identité de dimension 3.

Pour le second terme, on remarque d'abord que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M &= \frac{M}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} \rho \right) + \frac{M}{RT} (v - u) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial t} u + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} u \right) \\ &\quad + \frac{M}{2T} \left(\frac{1}{RT} |v - u|^2 - 3 \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} T + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} T \right), \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M &= \frac{M}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho + (v - u) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \rho \right) + \frac{M}{\rho} u \cdot \frac{\partial}{\partial x} \rho \\ &\quad + \frac{M}{RT} (v - u) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial t} u + (v - u) \cdot \frac{\partial}{\partial x} u \right) + \frac{M}{RT} (v - u) \cdot \left(u \cdot \frac{\partial}{\partial x} u \right) \\ &\quad + \frac{M}{2T} \left(\frac{1}{RT} |v - u|^2 - 3 \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} T + (v - u) \cdot \frac{\partial}{\partial x} T \right) \\ &\quad + \frac{M}{2T} \left(\frac{1}{RT} |v - u|^2 - 3 \right) u \cdot \frac{\partial}{\partial x} T. \end{aligned}$$

Mais, à l'ordre un en ϵ , les équations de BGK se réduisent aux équations d'Euler et donnent

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \rho + u \cdot \frac{\partial}{\partial x} \rho &= -\rho \operatorname{div}(u), \\ \frac{\partial}{\partial t} u_i + u \cdot \frac{\partial}{\partial x} u_i &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} p, \\ \frac{\partial}{\partial t} T + u \cdot \frac{\partial}{\partial x} T &= (1 - \gamma) T \operatorname{div}(u). \end{cases}$$

Donc en remplaçant dans l'équation précédente, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M &= \frac{M}{\rho} \left((v - u) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \rho - \rho \operatorname{div}(u) \right) \\ &+ \frac{M}{RT} (v - u) \cdot \left[(v - u) \cdot \frac{\partial}{\partial x} u - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} p \right] \\ &+ \frac{M}{2T} \left(\frac{1}{RT} |v - u|^2 - 3 \right) \left((v - u) \cdot \frac{\partial}{\partial x} T + (1 - \gamma) T \operatorname{div}(u) \right). \end{aligned} \tag{8}$$

On en déduit que

$$\begin{aligned} &\int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) \left(\frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M \right) dv \\ &= \int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) \left[- \left(\frac{3}{2} (1 - \gamma) + 1 \right) \operatorname{div}(u) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2RT} |v - u|^2 (1 - \gamma) \operatorname{div}(u) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{RT} (v - u) \cdot \left((v - u) \cdot \frac{\partial}{\partial x} u \right) \right] M dv. \end{aligned}$$

En effectuant le changement de variables: $v - u = \sqrt{RT} \omega$, on obtient

$$\begin{aligned}
& \int_{v \in \mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) \left(\frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M \right) dv \\
&= - \left(\frac{3}{2}(1 - \gamma) + 1 \right) \frac{\rho RT}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \operatorname{div}(u) \int \omega \otimes \omega \exp\left(-\frac{|\omega|^2}{2}\right) d\omega \\
&+ \frac{(1 - \gamma)}{2} \frac{\rho RT}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \operatorname{div}(u) \int \omega \otimes \omega |\omega|^2 \exp\left(-\frac{|\omega|^2}{2}\right) d\omega \\
&+ \frac{\rho RT}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \omega \otimes \omega (\omega \otimes \omega) : \frac{\partial}{\partial x} u \exp\left(-\frac{|\omega|^2}{2}\right) d\omega \\
&= (1 - \gamma) \rho RT \operatorname{div}(u) I_3 + \rho RT \sigma,
\end{aligned}$$

où $\frac{\sigma}{2} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j \right]_{ij}$ est le tenseur des taux de déformations.

Finalement, on trouve

$$P = p I_3 - \epsilon R^{1+\alpha} T^{1+\alpha} [(1 - \gamma) \operatorname{div}(u) I_3 + \sigma].$$

Pour retrouver les coefficients de Lamé (λ, μ) , on pose

$$\mu = \epsilon R^{1+\alpha} T^{1+\alpha} \quad \text{coefficient de viscosité,}$$

$$\lambda = -(\gamma - 1) \mu.$$

Alors il vient

$$P = p I_3 - [\lambda \operatorname{div}(u) I_3 + \mu \sigma].$$

Par des calculs analogues, on montre que

$$\begin{aligned}
 Q &= \int_{v \in \mathbb{R}^3} \left(\frac{|v-u|^2}{2} f_{NS} + g_{NS} \right) (v-u) dv \\
 &= -\epsilon R^{1+\alpha} T^{1+\alpha} R \left(\lambda + \frac{3}{2} + 1 \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} T \right) \\
 &= -\frac{\gamma}{(\gamma-1)} R \mu \left(\frac{\partial}{\partial x} T \right) \\
 &= -\kappa \left(\frac{\partial}{\partial x} T \right),
 \end{aligned}$$

où $\kappa = \frac{\gamma}{(\gamma-1)} R \mu$ est le coefficient de conductibilité thermique.

3.4 Remarques

(i) Le nombre de Prandtl

Le nombre de Prandtl est toujours égal à 1. En effet, par définition, on a

$$\kappa = \frac{\gamma}{(\gamma-1)} R \frac{\mu}{P_r}.$$

Des recherches sont actuellement en cours pour transformer le modèle afin de pouvoir considérer des nombres de Prandtl différents de un, ou pour obtenir directement un développement de Chapman-Enskog à partir d'un modèle Boltzmann avec énergie interne (Borgnakke-Larsen).

(ii) Le cas Euler

Dans le cas des équations d'Euler on montre qu'il est possible de considérer des fonctions de distribution en vitesse plus générales comme l'illustre le résultat suivant dû à Perthame [12]:

Soit χ une fonction de distribution positive, définie sur \mathbb{R}^3 , telle que

$$\chi(-\omega) = \chi(\omega),$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \chi(\omega) d\omega = 1,$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} \omega_i \omega_j \chi(\omega) d\omega = \delta_{ij}.$$

Soit $f_{\rho,u,T}$ la fonction de distribution associée à χ , définie par

$$f_{\rho,u,T}(x, v, t) = \frac{\rho}{(RT)^{\frac{3}{2}}} \chi\left(\frac{v-u}{\sqrt{RT}}\right).$$

Soit f la solution de

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} f + v \frac{\partial}{\partial x} f = 0, \\ f(x, v, 0) = f_{\rho_0, u_0, T_0}(x, v). \end{cases}$$

Alors, sur l'intervalle $[0, \Delta t]$, ρ , ρu , E définis par

$$\begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix} = \int_{\mathbb{R}^3} \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2} |v|^2 + \lambda T \end{pmatrix} f dv,$$

sont solutions des équations d'Euler, à l'ordre un en temps près.

Bien entendu χ peut être une maxwellienne

$$\chi(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|\omega|^2}{2}\right),$$

mais aussi une indicatrice. On peut choisir par exemple

$$\chi(\omega) = \begin{cases} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^3 & \text{si } \sup |\omega_i| \leq \sqrt{3} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

3.5 Généralisation aux équations de Boltzmann

Compte tenu des résultats du paragraphe (3-3), nous donnons une expression générale de l'approximation de la fonction de distribution f_{NS} , introduisant les coefficients de viscosité μ et de conductibilité thermique κ .

Utilisant l'égalité (8), simplifiée grâce à l'équation d'état $p = \rho RT$, l'expression de f_{NS} peut s'écrire

$$\begin{aligned} f_{NS} = M & - \frac{\varepsilon (RT)^\alpha}{\rho} M \left[\frac{(v-u) \otimes (v-u)}{RT} : \frac{\partial u}{\partial x} \right. \\ & + \frac{(1-\gamma)}{2} \frac{(v-u)^2}{RT} \operatorname{div}(u) - \left(\frac{3(1-\gamma)}{2} + 1 \right) \operatorname{div}(u) \\ & \left. + \frac{1}{2T} \left(\frac{|v-u|^2}{RT} - 5 \right) (v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right]. \end{aligned}$$

En introduisant les coefficients μ et κ , ainsi que la constante λ , l'expression précédente devient

$$\begin{aligned} f_{NS} = M & - M \left[\frac{\mu}{pRT} \left((v-u) \otimes (v-u) : \frac{\partial u}{\partial x} \right. \right. \\ & + \frac{(1-\gamma)}{2} (v-u)^2 \operatorname{div}(u) + \lambda(1-\gamma) RT \operatorname{div}(u) \left. \right) \\ & \left. + \frac{(\gamma-1)}{2\gamma} \frac{\kappa}{pRT} \left(\frac{(v-u)^2}{RT} - 5 \right) (v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right]. \end{aligned}$$

Finalement, on obtient

$$\begin{aligned} f_{NS} = M & \left[1 - \frac{\mu}{pRT} \left((v-u) \otimes (v-u) + \frac{(1-\gamma)}{2} (v-u)^2 I_3 \right. \right. \\ & \left. \left. + \lambda(1-\gamma) RT I_3 \right) : \frac{\partial u}{\partial x} \right. \\ & \left. - \frac{(\gamma-1)}{2\gamma} \frac{\kappa}{pRT} \left(\frac{|v-u|^2}{RT} - 5 \right) (v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right]. \end{aligned}$$

Remarque:

Considérons le cas d'un gaz monoatomique en dimension 3 (i.e. $\gamma = \frac{5}{3}$). Alors f_{NS} peut s'écrire

$$f_{NS} = M \left[\begin{array}{l} 1 - \frac{\mu}{pRT} \left((v-u) \otimes (v-u) - \frac{1}{3} (v-u)^2 I_3 \right) : \frac{\partial u}{\partial x} \\ - \frac{\kappa}{5pRT} \left(\frac{(v-u)^2}{RT} - 5 \right) (v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \end{array} \right].$$

Ce développement de f_{NS} est exactement le développement de Chapman-Enskog, obtenu par développement asymptotique de l'équation de Boltzmann. Cette identification se fait modulo l'écriture symbolique de la viscosité et de la conductibilité thermique. Avec cette identification, la technique de couplage que nous présentons reste valide quelque soit l'interprétation cinétique donnée aux équations de Navier-Stokes.

4 Le couplage Boltzmann / Navier-Stokes

Nous présentons dans cette partie la technique de couplage par demi-flux. Nous commencerons par définir la géométrie du problème considéré. Nous introduirons ensuite les éléments de théorie cinétique rappelés dans le paragraphe précédent pour écrire la décomposition cinétique des flux, afin de préciser les conditions aux limites du couplage. Nous décrirons de façon détaillée comment ces nouvelles conditions sont implémentées dans le code global. Enfin nous présenterons l'algorithme global de couplage.

4.1 Description de la géométrie

Nous considérons un écoulement gazeux (gaz raréfié), autour d'un obstacle de frontière Γ_W , dans un domaine global Ω (voir fig:4). Le domaine global est décomposé en deux sous-domaines Ω_{NS} et Ω_B tels que

$$\begin{aligned} \bar{\Omega} &= \bar{\Omega}_{NS} \cup \bar{\Omega}_B, \\ \bar{\Omega}_{NS} \cap \bar{\Omega}_B &\neq \emptyset, \\ \bar{\Omega}_{NS} \setminus \overset{\circ}{\Omega}_{NS} &= \Gamma_{ext} \cup \Gamma_{int}, \end{aligned}$$

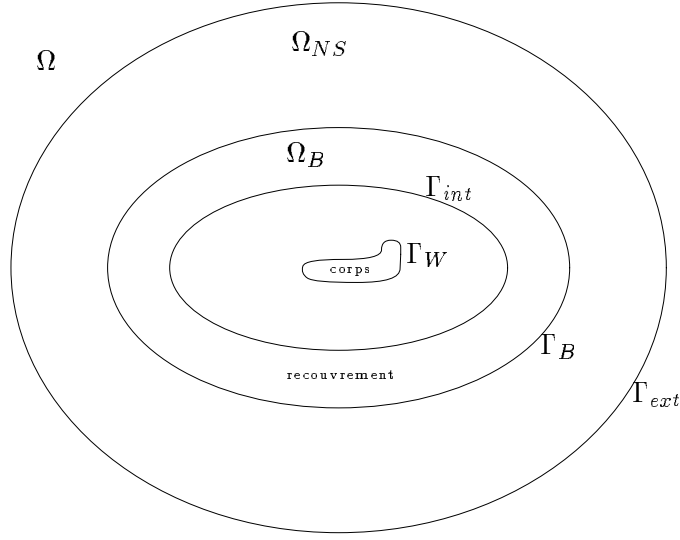


FIG. 4 - géométrie

$$\bar{\Omega}_B \setminus \overset{\circ}{\Omega}_B = \Gamma_W \cup \Gamma_B.$$

Le domaine local Ω_B , de frontière interne Γ_W et de frontière externe $\Gamma_B \subset \bar{\Omega}_{NS}$, contient le corps. Dans ce domaine, on résoud l'équation de Boltzmann. Le domaine Ω_{NS} est utilisé pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Sa frontière externe Γ_{ext} est la frontière externe du domaine global. Sa frontière interne $\Gamma_{int} \subset \bar{\Omega}_B$ englobe le corps. Dans les tests numériques nous pouvons envisager deux situations

1. sans recouvrement,

$$\Gamma_{int} = \Gamma_B,$$

2. avec recouvrement,

$$\Gamma_B \subset \overset{\circ}{\Omega}_{NS} \text{ et } \Gamma_{int} \subset \overset{\circ}{\Omega}_B.$$

De plus, nous considérons des domaines fixés a priori. Une stratégie de définition adaptative des domaines Boltzmann et Navier-Stokes est en cours de développement.

4.2 La décomposition cinétique des flux Navier-Stokes

Nous présentons maintenant la décomposition cinétique des flux. Cette technique permettra de définir la condition de compatibilité de Boltzmann vers Navier-Stokes.

Rappelons que l'écriture cinétique des flux dans Navier-Stokes est donnée par

$$F_{(\rho,u,T)} = \int_{v \in \mathbb{R}^N} v \left[\left(\begin{array}{c} 1 \\ v \\ \frac{|v|^2}{2} \end{array} \right) f_{NS}(x, v, t) + \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right) g_{NS}(x, v, t) \right] dv.$$

Les fonctions de distribution f_{NS} et g_{NS} sont définies au paragraphe (3-2) pour le cas d'un modèle BGK et sont à remplacer par un développement de Chapman-Enskog complet dans le cas du modèle de Boltzmann. Dans cette formule, v représente la vitesse d'une particule. Par conséquent, si n désigne la normale unitaire extérieure au domaine Navier-Stokes, les particules qui entrent dans le domaine Navier-Stokes vérifient $v \cdot n \leq 0$ tandis que les particules qui sortent de ce domaine vérifient $v \cdot n \geq 0$. Ainsi la décomposition cinétique des flux à travers Γ_{int} est simplement donnée par

$$\begin{aligned} F(U)_{/\Gamma_{int}} \cdot n = & \int_{v \cdot n \geq 0} v \cdot n \left[\left(\begin{array}{c} 1 \\ v \\ \frac{|v|^2}{2} \end{array} \right) f_{NS}(x, v, t) + \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right) g_{NS}(x, v, t) \right] dv \\ & + \int_{v \cdot n \leq 0} v \cdot n \left[\left(\begin{array}{c} 1 \\ v \\ \frac{|v|^2}{2} \end{array} \right) f_{NS}(x, v, t) + \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right) g_{NS}(x, v, t) \right] dv, \end{aligned}$$

que l'on peut simplifier en

$$F(U) \cdot n_{/\Gamma_{int}} = F(U)^+ \cdot n + F(U)^- \cdot n,$$

où

$F(U)^+ \cdot n$ représente le flux sortant de Ω_{NS}
à travers Γ_{int} ,

$F(U)^- \cdot n$ représente le flux rentrant dans Ω_{NS}
à travers Γ_{int} .

(Les signes + et - seront toujours utilisés par rapport au domaine Navier-Stokes).

Pour la suite il sera nécessaire de calculer de calculer explicitement les demi-flux

sortant

$$F(U)^+ \cdot n = \int_{v \cdot n \geq 0} v \cdot n \left[\begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{|v|^2}{2} \end{pmatrix} f_{NS}(x, v, t) + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} g_{NS}(x, v, t) \right] dv, \quad (9)$$

alors que les flux $F(u)^- \cdot n$ seront imposés par ailleurs. Pour les équations d'Euler on réalise seulement une décomposition des flux de convection. Dans ce cas nous savons que les distributions f_{NS} et g_{NS} se réduisent à

$$f_{NS}(x, v, t) = \frac{\rho}{(RT)^{\frac{N}{2}}} \chi\left(\frac{v-u}{\sqrt{RT}}\right),$$

$$g_{NS} = \lambda RT f_{NS}.$$

Nous avons utilisé pour les tests numériques deux fonctions χ différentes. Dans un premier temps, la fonction indicatrice

$$\chi(\omega) = \frac{1}{12} 1_{|\omega_1| \leq \sqrt{3}} 1_{|\omega_2| \leq \sqrt{3}},$$

puis la maxwellienne

$$\chi(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}}} \exp\left(-\frac{|\omega|^2}{2}\right).$$

Les résultats sont sensiblement les mêmes pour ces deux choix de la fonction χ . On notera simplement que dans le cas d'une indicatrice les calculs de (9) sont un peu plus simples.

Pour les équations de Navier-Stokes il faut en plus décomposer les flux de diffusion. Conformément aux résultats du paragraphe précédent, on choisit alors

$$f_{NS} = M - \frac{\varepsilon R^\alpha T^\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} M + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} M \right),$$

$$g_{NS} = \lambda RT M - \frac{\varepsilon R^{1+\alpha} T^\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\lambda T M) + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\lambda T M) \right).$$

Les calculs sont présentés en annexe.

4.3 Description du couplage

Les conditions de compatibilité sont basées sur l'interprétation cinétique précédente. Pour chaque domaine, on impose la distribution cinétique des particules entrantes. Pour le domaine Navier-Stokes, cette distribution est égale à la distribution des particules quittant le domaine Boltzmann. Pour le domaine Boltzmann, la distribution des particules entrantes est égale à la distribution des particules sortant du domaine Navier-Stokes. Ainsi, dans le domaine Ω_B , on résout l'équation de Boltzmann

$$\frac{\partial}{\partial t}f + v \frac{\partial}{\partial x}f = Q(f, f),$$

avec les conditions aux limites suivantes :

- Sur le corps Γ_W , on impose le modèle de Maxwell de paramètre $T_{/\Gamma_W} = T_W$,
- Sur la frontière Γ_B , on impose une distribution de particules entrantes égale à une maxwellienne de paramètres $(\rho, u, T)_{NS}$. Les valeurs de $(\rho, u, T)_{NS}$ sont données par l'écoulement Navier-Stokes.

Dans le domaine Ω_{NS} on résout l'équation de Navier-Stokes

$$\frac{\partial}{\partial t}U + \text{div}(F(U)) = 0,$$

où

$$F(U) = (F_i^c - F_i^d)_i,$$

avec les conditions aux limites suivantes :

- Sur la frontière extérieure Γ_{ext} , on impose les conditions aux limites usuelles c'est-à-dire, en général, les valeurs à l'infini uniformes.
- Sur la frontière intérieure Γ_{int} , l'information provenant de l'écoulement Boltzmann est donnée par la densité de particules f_B quittant le domaine Boltzmann. Mais celle-ci ne peut être directement prise en compte par le code Navier-Stokes. Nous utilisons donc ici l'idée originale qui consiste à décomposer les flux.

Nous savons que le flux Navier-Stokes à travers Γ_{int} s'écrit

$$F(U) \cdot n_{/\Gamma_{int}} = F(U)^+ \cdot n + F(U)^- \cdot n.$$

Dans cette expression $F(U)^+ \cdot n$ est calculé (paragraphe 4-2) et $F(U)^- \cdot n$ est imposé égale à $F(Bolt)^- \cdot n$, demi-flux calculé dans le code Boltzmann. Plus précisément $F(Bolt)^- \cdot n$ est donné par

$$F(Bolt)^- \cdot n = \int_{\epsilon_m} \int_{v \cdot n \leq 0} v \cdot n \left(\frac{1}{\frac{|v|^2 + \epsilon_m}{2}} \right) f_B(x, v, \epsilon_m, t) dv d\epsilon_m.$$

En résumé, on impose à chacun des deux modèles les conditions aux limites suivantes:

- Pour Boltzmann :
 - Modèle de Maxwell(T_W) sur Γ_W ,
 - Maxwell(ρ, u, T) $_{NS}$ sur Γ_B , pour les particules rentrantes,
- Pour Navier-Stokes :
 - $U_{/\Gamma_{ext}} = U_\infty$,
 - $F(U)^- \cdot n_{/\Gamma_{int}} = F(Bolt)^- \cdot n_{/\Gamma_{int}}$.

Remarque:

Les premiers travaux sur le couplage, réalisés par P. Le Tallec et D. Tidiri [13], concernaient une géométrie avec recouvrement total (ie $\Gamma_{int} = \Gamma_W$). Par la suite, P. Le Tallec, Y. Qiu, J.F. Bourgat et B. Perthame [7] ont mis au point le couplage par demi-flux pour les équations d'Euler compressibles. Dans ces résultats numériques, Y. Qiu utilisait des indicatrices dans l'expression des fonctions de distribution cinétique.

4.4 Implémentation des conditions aux limites de couplage

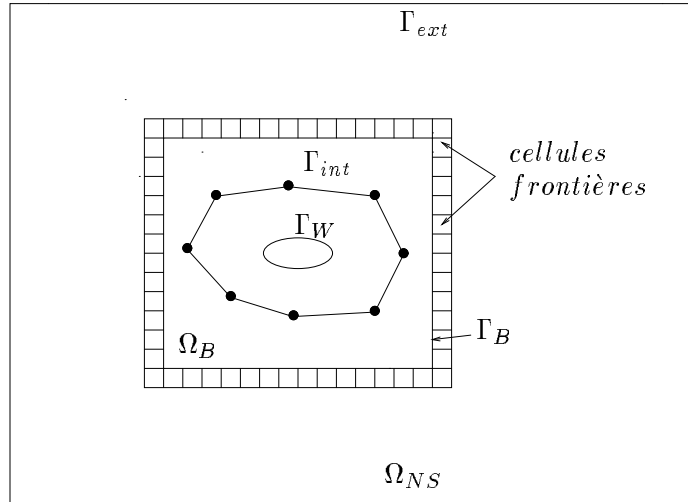


FIG. 5 - Géométrie

Conditions aux limites pour le code Boltzmann

Pour le code Boltzmann, on génère une couche de cellules frontières. Dans chaque cellule, on génère une distribution uniforme de particules dont les vitesses et les énergies sont calculées avec une maxwellienne de paramètres $(\rho, u, T)_{NS}$ donnés par le code Navier-Stokes. Ces paramètres sont attribués à l'isobarycentre de chaque cellule. Pour les calculer il suffit de connaître l'élément du maillage Navier-Stokes qui contient l'isobarycentre de la cellule considérée. On obtient alors les paramètres désirés en interpolant les valeurs au barycentre à partir des valeurs de (ρ, u, T) aux sommets du triangle.

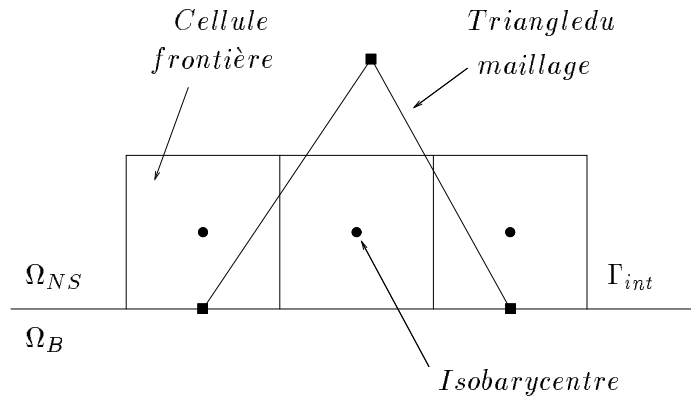


FIG. 6 - Conditions aux limites pour le code Boltzmann

Conditions aux limites pour le code Navier-Stokes

Pour le code Navier-Stokes il est nécessaire de connaître les demi-flux sortant du domaine Boltzmann. Ces derniers sont calculés par le code Boltzmann. Pour ce faire, la frontière Γ_{int} est subdivisée en segments. Pendant l'étape de transport libre on comptabilise, pour chaque segment, le nombre de particules qui le traversent de Ω_B vers Ω_{NS} . Alors le flux sortant du domaine Ω_B , $F(Bolt)^- \cdot n$, pour le segment considéré, est obtenu en moyennant la masse, la vitesse et l'énergie de toutes les particules l'ayant traversé.

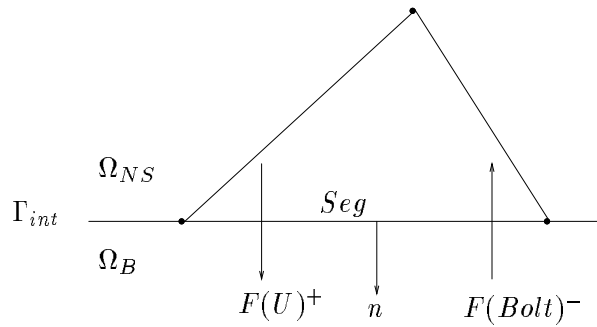


FIG. 7 - Conditions aux limites pour le code Navier-Stokes

Si Seg est une partie de Γ_{int} , de longueur l , alors le flux qui traverse Seg par unité de temps, vers Ω_{NS} s'écrit

$$\begin{aligned} F(Bolt)^- \cdot n &= \frac{1}{\Delta t \Delta l} \int_{[t, \Delta t]} dt \int_{Seg} dx \int_{v \cdot n \leq 0, e_m} f_B \left(\frac{1}{\frac{|v|^2}{2} + e_m} v \right) v \cdot n dv de_m, \\ &= \frac{m}{\Delta t \Delta l} \sum_{i \text{ traversant } Seg} \left(\frac{1}{\frac{|v|^2}{2} + e_m} v \right), \end{aligned} \tag{10}$$

où e_m est l'énergie interne microscopique d'une particule. Pour dissiper le bruit numérique, on moyenne les flux sur plusieurs pas de temps.

Pour le code Navier-Stokes, on rappelle que dans la formulation Galerkin apparaît l'intégrale de bord

$$\int_{P_n} W^h \cdot \left(-F_i^c(V^h) + F_i^d(V^h) \right) \cdot n_i dP.$$

Sur tous les éléments ayant un côté commun avec Γ_{int} , on remplace la formule classique du flux total par l'expression cinétique donnée par (9) et (10).

4.5 Algorithme global de couplage

L'algorithme utilisé pour résoudre le problème couplé est un algorithme de marche en temps introduit par P. Le Tallec et D. Tidriri. Il se formule de la manière suivante

1. INITIALISATION

- (a) initialiser le problème Navier-Stokes par $(\rho, u, T)_\infty$ dans le domaine Ω_{NS} ;
- (b) initialiser le problème Boltzmann par $(\rho, u, T)_\infty$ dans le domaine Ω_B ;

2. ITERATIONS EN TEMPS

- (a) Boltzmann:
 - i. calculer les conditions aux limites sur Γ_B ;
 - ii. résoudre N_B itérations en temps dans le domaine Ω_B ;

- iii. calculer le demi-flux sortant $F(\text{Bolt})^-$ sur Γ_{int} ;
- (b) Navier-Stokes:
 - i. résoudre N_{NS} itérations en temps dans le domaine Ω_{NS} ;
- (c) test de convergence:
 - Si le test de convergence n'est pas vérifié retourner à l'étape (a) sinon arrêter le processus.

Remarques

1. Initialisation

Nous utilisons pour les tests numériques une technique d'adaptation de maillage. La méthode utilisée a été développée à l'INRIA par M.G. Vallet [16]. Pratiquement on résout un problème de Navier-Stokes global sur un maillage initial grossier, avec des conditions initiales uniformes. A l'extérieur du code de couplage on réalise une adaptation du maillage initial à partir de la dernière solution Navier-Stokes obtenue. Bien entendu cette adaptation ne concerne que le domaine Navier-Stokes. En plus d'un maillage adapté nous avons également une nouvelle solution sur ce maillage, obtenue par interpolation de la précédente. Nous pouvons alors effectuer un nouveau calcul de couplage avec de nouvelles conditions initiales. Pour le domaine Navier-Stokes nous initialisons avec la solution Navier-Stokes interpolée et pour le domaine Boltzmann toujours avec une solution uniforme.

2. Test d'arrêt

En pratique l'algorithme précédent est stoppé dès que les conditions aux limites sur Γ_B sont stationnaires; c'est-à-dire lorsque les paramètres $(\rho, u, T)_{NS}$, qui déterminent la maxwellienne sur Γ_B , le sont. On se contente même de contrôler uniquement les variations de la densité. Le résidu est calculé par la formule suivante,

$$\text{Résidu} = \frac{\sum_{x_i \in \Gamma_B} |\rho_i^{n+1} - \rho_i^n|}{\sum_{x_i \in \Gamma_B} \rho_i^0}.$$

Il est difficile d'atteindre une précision numérique inférieure à 10^{-3} car la méthode de Monte-Carlo engendre beaucoup de bruit. Enfin on notera que si la solution Boltzmann est stationnaire il en est de même de la solution Navier-Stokes puisque les demi-flux entrant dans le domaine Ω_{NS} sont également stationnaires.

4.6 Résultats numériques

Nous considérons un écoulement externe, d'un gaz monoatomique, autour d'une ellipse. Le premier résultat présenté est un calcul Boltzmann sur un domaine global. Cette solution, considérée comme une solution de référence, nous permettra de valider les résultats de couplage. Nous présentons deux résultats de couplage Boltzmann / Navier-Stokes. Le premier est un calcul réalisé pour des domaines fixés à priori. Nous avons considéré un domaine Navier-Stokes dont la frontière intérieure est loin du corps. Pour le deuxième calcul, les domaines sont déterminés de manière automatique. Pour cela nous avons implémenté un critère permettant de déterminer la validité de la solution Navier-Stokes en tout point du domaine global. Lors d'une étape d'initialisation de l'algorithme de couplage nous calculons une solution Navier-Stokes sur le domaine global, avec les conditions classiques d'adhérence, solution à laquelle nous appliquons le critère. Ces techniques seront présentées dans un prochain rapport ainsi que les modifications apportées au code Boltzmann pour prendre en compte des domaines plus généraux que les domaines rectangulaires.

4.6.1 Paramètres de l'écoulement

Nous choisissons, les paramètres suivants, communs à tous les calculs

$$\begin{aligned}M_\infty &= 20. \\T_\infty &= 167.3 \text{ K} \\u_\infty &= 5672. \text{ m/s} \\\rho_\infty &= 1. \\T_W &= 1000. \text{ K} \\Re_m &= 5000. \\\gamma &= \frac{5}{3} \\\text{Pr} &= \frac{2}{3}\end{aligned}$$

La compatibilité des calculs Boltzmann et Navier-Stokes est assurée, d'une part, par les conditions aux limites infinies et la température sur le corps, et d'autre part, par la viscosité pour le modèle macroscopique et le type de

collision pour le modèle microscopique. En effet la viscosité suit une loi de Sutherland et le modèle des collisions est le modèle des sphères dures.

Nous précisons maintenant les données communes à tous les calculs Boltzmann

$$MFP_{\infty} = 0.0066 \text{ m}$$

Accommodation totale

Nombre de particules dans une cellule infini 25

Nombre de particules pour subdivision d'une cellule 100

Enfin nous précisons les grandeurs géométriques des domaines Boltzmann et Navier-Stokes avant adaptation.

– Domaine Boltzmann global

Taille du domaine en x = 1.72 m

Taille du domaine en y = 1.328 m

Longueur de l'ellipse = 1. m

– Domaine Navier-Stokes

Taille du domaine en x = 2.25 m

Taille du domaine en y = 2. m

4.6.2 Solution Boltzmann de référence

La validation des résultats de couplage se fera par comparaison des grandeurs suivantes, calculées à la paroi

– coefficient de frottement C_f

$$C_f = \frac{(\sigma \cdot n) \cdot \tau}{0.5 \rho_{\infty} u_{\infty}^2},$$

– coefficient de force normale C_{Fn}

$$C_{Fn} = \frac{(\sigma \cdot n) \cdot n}{0.5 \rho_{\infty} u_{\infty}^2},$$

– coefficient de chaleur C_h

$$C_h = \frac{(q \cdot n)}{0.5 \rho_\infty u_\infty^3},$$

où n et τ sont le vecteur normal et le vecteur tangent à l'ellipse. Notons que les valeurs négatives qui apparaîtront sur les courbes représentant le coefficient de force normale et la vitesse tangentielle résultent de l'orientation du vecteur tangent prise systématiquement dans le sens rétrograde.

Les paramètres de l'écoulement sont ceux donnés au paragraphe 7.5.1 . Le domaine de calcul est celui du domaine Boltzmann global. Le maillage est constitué de 100 fois 100 cellules. Nous avons fait 1200 pas de temps et calculée les grandeurs moyennes sur les 600 derniers pas de temps. Le temps de calcul est de 2h30mn. Les figures (8) et (9) représentent les iso-valeurs de la température et de la densité. Les figures (10), (11), (12), et (13) représentent les coefficients C_f , C_h , C_{Fn} et la vitesse tangentielle à la paroi. Enfin la figure (14) montre la convergence en terme de nombre de particules.

4.6.3 Premier résultat de couplage Boltzmann/Navier-Stokes

Pour ce calcul nous considérons toutes les cellules intérieures au domaine Boltzmann global comme des cellules Boltzmann. Le maillage Navier-Stokes résultant de ce choix du domaine Boltzmann est représenté figure (15). Il résulte d'une adaptation anisotrope, selon la température, avec comme maillage et solution de fond, ceux du calcul Navier-Stokes initial. Il est constitué de 2150 noeuds pour 3938 triangles.

Le résidu global oscille autour de la valeur 5.10^{-3} à partir de la quatrième itération globale de couplage (figure (16)). Une précision de l'ordre de 5.10^{-3} semble tout-à-fait raisonnable compte tenu du bruit engendré par le code Boltzmann. On peut donc estimer que pour ce type de calcul 3 à 4 itérations globales sont suffisantes.

Pour chaque itération Boltzmann, exceptée la première, nous avons fixé le nombre d'itération de l'algorithme à 400 pas de temps et calculée les moyennes sur les 200 derniers pas de temps. Pour le premier calcul Boltzmann le nombre d'itération est fixé à 500. En effet, la première itération est initialisée par une maxwellienne de paramètres les valeurs à l'infini. Un nombre insuffisant

d'itérations décalerait trop le choc Boltzmann par rapport au choc Navier-Stokes rendant ainsi fragile le premier calcul Navier-Stokes.

Pour chaque itération globale Navier-Stokes nous avons fixé le nombre d'itération de l'algorithme à 800, pour un calcul explicite avec un nombre de CFL de 0.1 et une stratégie de pas de temps local.

Le temps de calcul d'une itération Boltzmann globale est de 3H contre 1H pour le code Navier-Stokes.

Les iso-valeurs de la température (17) et de la densité (18) sont celles obtenues à la neuvième itération de l'algorithme de couplage. Les figures (19), (20) représentent différentes coupes de la température et les figures (21), (22) de la densité. Celles-ci sont à comparer sur les graphiques à celles obtenues pour la solution Boltzmann de référence. Enfin les figures (23), (24), (25), et (26) représentent les coefficients C_f , C_h , C_{Fn} et la vitesse tangentielle à la paroi. Notons que les trois premiers coefficients coïncident parfaitement avec ceux obtenus pour la solution de référence.

4.6.4 Deuxième résultat de couplage Boltzmann/Navier-Stokes

Le code a calculé dix itérations globales de couplage. Le premier calcul Boltzmann est initialisé par une maxwellienne de paramètres la solution Navier-Stokes initiale. Pour ce premier calcul le nombre d'itérations de l'algorithme Boltzmann est fixé à 500 et les moyennes sont calculées sur 200 pas de temps. Pour les itérations suivantes les moyennes sont toujours calculées sur 200 pas de temps pour un nombre total d'itérations fixé à 400. Le temps de calcul d'une itération globale Boltzmann est de 1H35.

Pour le calcul Navier-Stokes le maillage discrétisant le domaine Navier-Stokes est obtenu par une adaptation isotrope selon la température, avec comme maillage et solution de fond ceux d'une solution Navier-Stokes calculée préalablement. Il est constitué de 1758 noeuds pour 3233 triangles (27). Le nombre d'itérations pour l'algorithme Navier-stokes est fixé, pour chaque itération globale, à 500, pour un calcul explicite avec un nombre de CFL de 0.1. Le temps de calcul d'une itération globale est de 30mn.

Le résidu global est stable à partir de la troisième itération (voir figure (28)). Les figures (29) et (30) représentent les iso-valeurs de la température et de densité. Les figures (31), (32), (33) et (34) représentent des coupes transversales de la température et de la densité. Elles sont comparées par superposition à

celles de la solution Boltzmann de référence. Les figures (35), (36), (37) et (38) représentent les coefficients de frottement, de chaleur, de force normale et la vitesse tangentielle à la paroi. Nous remarquons que ces résultats restent toujours comparables à ceux de la solution Boltzmann de référence malgré une légère différence toujours en intrados-aval.

5 Conclusion

La technique de couplage Boltzmann/Navier-Stokes par demi-flux semble naturelle dans son principe et dans son implémentation comme solution possible des écoulements externes hypersoniques semi-raréfiés. Cette méthode peut s'appliquer indépendamment de l'approximation des équations de Navier-Stokes choisie. Pour les résultats numériques, nous avons effectué les calculs avec un code Navier-Stokes de type éléments finis. En particulier, nous avons pu prendre en compte les effets visqueux dans le domaine global. On observe aussi que l'algorithme de couplage semble converger indépendamment des conditions aux limites imposées sur le corps, de la discrétisation du domaine Ω_B et de la position de la frontière Γ_B .

Le couplage permet d'étudier des écoulements hypersoniques pour des petits nombres de Knudsen et ceci pour un coût de calcul raisonnable, puisque le modèle cinétique n'est utilisé que près du corps. Notons enfin que les calculs ont été réalisés pour un gaz monoatomique. Néanmoins il est aisé de prendre en compte des gaz polyatomiques, au moins dans le cas monotempérature.

Comme nous l'avons annoncé, nous implémentons des critères permettant de déterminer de manière automatique les domaines Boltzmann et Navier-Stokes. De manière générale, l'idée consiste à évaluer la validité d'une solution numérique des équations de Navier-Stokes. Nous obtenons déjà des résultats satisfaisants pour des gaz monoatomiques. De plus nous étudions l'élaboration d'un algorithme global automatique et adaptatif, permettant de gérer à la fois la détermination des domaines et la technique de couplage par demi-flux. Actuellement nous tentons de généraliser les critères au cas des gaz polyatomiques. Enfin nous travaillons à la justification théorique de la convergence de l'algorithme de couplage, au moins pour des modèles simplifiés.

Références

- [1] A.N. BROOKS and T.J.R. HUGUES, "Streamline upwind / Petrov-Galerkin methods for advection dominated flows", *Proceedings Third International Conference on Finite Element in Fluid Flows*, Canada, 1980.
- [2] A.N. BROOKS and T.J.R. HUGUES, "Streamline upwind / Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 32, (1982) .
- [3] J.F. BOURGAT, "Notice d'utilisation du logiciel BOL2D", , INRIA Rocquencourt, aout 1992.
- [4] J. BOURGAT, L. DESVILLETES, P. LE TALLEC, B. PERTHAME, "Microreversible collisions for polyatomic gases and Boltzmann's theorem", à paraître.
- [5] J.F. BOURGAT, P. LE TALLEC, F. MALLINGER, D. TIDRIRI, Y. QIU, "Numerical coupling of Boltzmann and Navier-Stokes", *in proceedings of the sixth IUTAM conference on rarefied flows for reentry problems*, Marseille, France, September 1992.
- [6] J.F. BOURGAT, P. LE TALLEC, B. PERTHAME, Y. QIU, "Coupling Boltzmann and Euler equations without overlapping", *in proceedings of the sixth international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, Como, Italy, June 1992, AMS, Providence, 1992.
- [7] J.F. BOURGAT, P. LE TALLEC, D. TIDRIRI, Y. QIU, "Numerical coupling of nonconservative or kinetik models with the conservative compressible Navier-Stokes equations", *Rapport de recherche INRIA no 1426*, mai 1991.
- [8] F. GROENGIESSER, H. NEUNZERT, J. STRUCKMEIER, "Computational methods for the Boltzmann equation", Université de Kaiserslautern.
- [9] P. LE TALLEC, F. MALLINGER, "Couplage Boltzmann-Navier-Stokes", *Rapport HERMES Aerodynamics*, INRIA, Rocquencourt, 1992.
- [10] P. LE TALLEC, F. MALLINGER, "Couplage Boltzmann-Navier-Stokes Adaptatif", *Rapport HERMES Aerodynamics*, INRIA, Rocquencourt, 1993.

-
- [11] M. MALLET, "A finite element method for computational fluid dynamics", *Ph.D. Thesis*, Stanford University, 1985 .
 - [12] B. PERTHAME, "Second-order Boltzmann schemes for compressible Euler Equations in one and two space dimensions", *SIAM J.N.A.* . 29, 1992.
 - [13] D. TIDRIRI, "Couplage d'approximations et de modèles de types différents dans le calcul d'écoulements externes", *Thèse de doctorat*, Université Paris 9, Mai 1992.
 - [14] Y. QIU, "Zonal coupling Boltzmann / Euler", *Rapport HERMES Aerodynamics*, INRIA, Rocquencourt, 1992.
 - [15] F. SHAKIB, "Finite element analysis of the compressible Euler and Navier-Stokes equations", *Ph.D. Thesis*, Stanford University, 1988 .
 - [16] M.G. VALLET, "Génération de maillages éléments finis anisotropes et adaptatifs", *Thèse de doctorat*, Université Paris 6, Septembre 1992.

6 Annexe

6.1 Calcul des demi-flux Navier-Stokes

Rappelons l'expression des demi-flux

$$F(U)^+ \cdot n = \int_{v \cdot n \geq 0} v \cdot n \left[\begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} f_{NS} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} g_{NS} \right] dv,$$

où n est le vecteur unitaire normal extérieur à la surface considérée. La fonction de distribution f_{NS} peut s'écrire en dimension 2 en vitesse et en espace

$$f_{NS} = M \left[1 - \frac{\mu}{pRT} \left((v-u) \otimes (v-u) + \frac{(1-\gamma)}{2} (v-u)^2 I_3 + \lambda(1-\gamma)RT I_3 \right) : \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\kappa}{2pRT} \left(\frac{(v-u)^2}{RT} - 4 \right) (v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right],$$

où M est la maxwellienne locale donnée par

$$M = \frac{\rho}{2\pi RT} \exp \left(-\frac{(v-u)^2}{2RT} \right).$$

De la même manière, à partir des équations de BGK, nous pouvons réécrire l'expression de g_{NS} comme le montrent les calculs suivants

$$\begin{aligned} g_{NS} &= \lambda RT M - \frac{\varepsilon R^{1+\alpha} T^\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\lambda T M) + v \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\lambda T M) \right) \\ &= \lambda RT M - \frac{\varepsilon R^{1+\alpha} T^\alpha}{\rho} \left[\lambda T \left(\frac{\partial M}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial M}{\partial x} \right) + \lambda M \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) \right] \\ &= \lambda RT f_{NS} - \frac{\varepsilon \lambda R^{1+\alpha} T^\alpha}{\rho} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) M \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \lambda RT f_{NS} - \frac{\lambda\mu}{\rho T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) M \\
&= \lambda RT f_{NS} - \frac{\lambda\mu}{\rho T} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + (v - u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) M.
\end{aligned}$$

Nous savons qu'à l'ordre 0 en ε les équations de conservation donnent

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \frac{\partial T}{\partial x} = (1 - \gamma) T \operatorname{div} u$$

Il en résulte l'expression finale de g_{NS}

$$g_{NS} = \lambda RT f_{NS} - \frac{\lambda\mu}{\rho T} \left((v - u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + (1 - \gamma) T \operatorname{div} u \right) M.$$

6.2 Notation

Dans la suite nous utiliserons la notation suivante

$$a_{mn} = \int_{\mathbb{R}} \int_{z_1 \geq \alpha} z_1^m z_2^n e^{-z^2/2} dz.$$

Du théorème de Fubini on déduit l'écriture suivante de a_{mn}

$$a_{mn} = \left(\int_{\alpha}^{+\infty} z_1^m e^{-z_1^2/2} dz_1 \right) \times \left(\int_{-\infty}^{+\infty} z_2^n e^{-z_2^2/2} dz_2 \right),$$

et par conséquent que

$$a_{mn} = 0,$$

dès que n est impair et différent de 0.

De plus, par intégration par parties successives, on déduit que

$$I_n = \int_{-\infty}^{+\infty} z_2^n e^{-z_2^2/2} dz_2 = (n-1)(n-3) \dots 3 I_2,$$

pour n pair et $n \geq 4$ avec $I_0 = I_2 = \sqrt{\pi}$.

De même on déduit que

$$J_m = \int_{\alpha}^{+\infty} z_1^m e^{-z_1^2/2} dz_1 = P_m(\alpha) e^{-\alpha^2/2} + C_m \beta,$$

où

$$\beta = \int_{\alpha}^{+\infty} e^{-z_1^2/2} dz_1,$$

$$\begin{cases} P_m(\alpha) = \alpha^{m-1} + (m-1)P_{m-2}; & m \geq 2, \\ P_0(\alpha) = 0, \\ P_1(\alpha) = 1, \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_m = (m-1)C_{m-2}, \\ C_0 = 1, \\ C_1 = 0, \end{cases}$$

soit

$$\begin{cases} C_m = 0 & \text{pour } m \text{ impair} \\ C_m = (m-1)(m-3)(m-5)\dots 3 \times 1 \end{cases}$$

On en déduit que tous les coefficients peuvent s'exprimer en fonction de

$$a_{00} = \sqrt{2\pi} \beta,$$

$$a_{10} = \sqrt{2\pi} e^{-\alpha^2/2}.$$

En particulier, les premiers coefficients sont donnés par

$$\begin{aligned} a_{02} &= a_{00}, \\ a_{04} &= 3a_{00}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{12} &= a_{10}, \\ a_{14} &= 3a_{10}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{20} &= a_{22} = \alpha a_{10} + a_{00}, \\ a_{24} &= 3(\alpha a_{10} + a_{00}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{30} &= a_{32} = (\alpha^2 + 2) a_{10}, \\ a_{40} &= a_{42} = (\alpha^3 + 3\alpha) a_{10} + 3 a_{00}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{50} &= (\alpha^4 + 4\alpha^3 + 8) a_{10}, \\ a_{60} &= (\alpha^5 + 5\alpha^3 + 15\alpha) a_{10} + 15 a_{00}. \end{aligned}$$

6.3 Les changements de variables

Afin de se ramener à des intégrales faciles à calculer, de la forme de celles du paragraphe précédent, nous effectuerons deux changements de variables successifs. Ils sont illustrés par le calcul suivant

$$I = \int_{v.n \geq 0} v.n e^{-\frac{(v-u)^2}{2RT}} dv.$$

En posant d'abord

$$\omega = \frac{v-u}{\sqrt{RT}},$$

l'intégrale I s'écrit

$$I = RT \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u) .n e^{-\omega^2/2} d\omega.$$

Afin d'obtenir un domaine d'intégration sous forme d'un produit cartésien séparant les variables d'intégration, on calcule cette intégrale dans le repère normal. Ainsi nous effectuons le changement de variables suivant

$$\begin{aligned} w_1 &= n_1 z_1 - n_2 z_2, \\ w_2 &= n_2 z_1 + n_1 z_2, \end{aligned}$$

que nous pouvons écrire sous forme condensée

$$w = R_{ot}z,$$

avec

$$R_{ot} = \begin{pmatrix} n_1 & -n_2 \\ n_2 & n_1 \end{pmatrix}.$$

L'intégrale I s'écrit, après ce changement de variables

$$I = RT \int_{\sqrt{RT}z_1+u.n \geq 0} (\sqrt{RT}z_1 + u.n) e^{-z^2/2} dz.$$

En posant $\alpha = -\frac{u.n}{\sqrt{RT}}$, on obtient

$$\begin{aligned} I &= RT \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1 + u.n) e^{-z^2/2} dz \\ &= RT (\sqrt{RT} a_{10} + u.n a_{00}). \end{aligned}$$

Dans la suite nous décomposons le flux en trois parties comme suit

$$F(U)^+.n = F^c.n + F^v.n + F^{ch}.n,$$

où $F^c.n$ est le flux convectif, $F^v.n$ est le flux visqueux et F^{ch} le flux de chaleur.

6.4 Calcul de la composante $F_1(U)^+.n$

Flux convectif $F_1^c.n$

$$\begin{aligned} F_1^c.n &= \int_{v.n \geq 0} v.n M(v) dv \\ &= \frac{\rho}{2\pi RT} \int_{v.n \geq 0} v.n e^{-\frac{(v-u)^2}{2RT}} dv \\ &= \frac{\rho}{2\pi} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n) e^{-z^2/2} dz \\ &= \frac{\rho}{2\pi} (\sqrt{RT} a_{10} + u.n a_{00}). \end{aligned}$$

Flux visqueux $F_1^v.n$

$$\begin{aligned} F_1^v.n &= - \frac{\mu}{pRT} \int_{v.n \geq 0} v.n \left[(v-u) \otimes (v-u) + \frac{(1-\gamma)}{2} (v-u)^2 I_3 \right. \\ &\quad \left. + \lambda(1-\gamma) RT I_3 \right] : \frac{\partial u}{\partial x} M(v) dv \\ &= - \frac{\rho \mu}{2\pi p(RT)^2} \int_{v.n \geq 0} v.n \left[(v-u) \otimes (v-u) + \frac{(1-\gamma)}{2} (v-u)^2 I_3 \right. \\ &\quad \left. + \lambda(1-\gamma) RT I_3 \right] : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\frac{(v-u)^2}{2RT}} dv \\ &= - \frac{\rho \mu}{2\pi p} \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega+u).n \left[\omega \otimes \omega + \frac{(1-\gamma)}{2} \omega^2 I_3 \right. \\ &\quad \left. + \lambda(1-\gamma) I_3 \right] : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega. \end{aligned}$$

Calculons séparément chaque terme de cette somme

$$\begin{aligned}
& \bullet \int_{\sqrt{RT}\omega+u, n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \omega \otimes \omega : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1 + u \cdot n) \left(R_{ot} z \otimes z R_{ot}^{-1} \right) : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \left[\sqrt{RT} (n_i^2 a_{30} + n_{(3-i)}^2 a_{12}) + u \cdot n (n_i^2 a_{20} + n_{(3-i)}^2 a_{02}) \right] \\
&+ \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \left[\sqrt{RT} n_1 n_2 (a_{30} - a_{12}) + u \cdot n n_1 n_2 (a_{20} - a_{02}) \right]. \\
&= \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \left(\sqrt{RT} (n_i^2 + 1) a_{10} + u \cdot n a_{00} \right) \\
&+ \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) \sqrt{RT} n_1 n_2 a_{10}. \\
& \bullet \int_{(RT\omega+u), n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \omega^2 I_3 : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1 + u \cdot n) z^2 I_3 : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1 + u \cdot n) z^2 \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) e^{-z^2/2} dz \\
&= \left[\sqrt{RT} (a_{30} + a_{12}) + u \cdot n (a_{20} + a_{02}) \right] \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) \\
&= \left[3\sqrt{RT} a_{10} + 2 u \cdot n a_{00} \right] \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right).
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n I_3 : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
& = \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1 + u.n) \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right) e^{-z^2/2} dz \\
& = \left[\sqrt{RT} a_{10} + u.n a_{00} \right] \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \right).
\end{aligned}$$

Ainsi $F_1^v.n$ devient, après simplification

$$\begin{aligned}
F_1^v.n & = -\frac{\mu}{2\pi\sqrt{RT}} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_i} (n_i^2 + \frac{1}{2}(1-\gamma)) a_{10} + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) n_1 n_2 a_{10} \right] \\
& = -\frac{\mu}{2\pi\sqrt{RT}} \left[\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} n_1^2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} n_2^2 \right) + \frac{1}{2}(1-\gamma) \operatorname{div} u + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) n_1 n_2 \right] a_{10}.
\end{aligned}$$

Calcul de $F_1^{ch}.n$

$$\begin{aligned}
F_1^{ch}.n & = -\frac{(\gamma-1)}{2\gamma} \frac{\kappa}{pRT} \int_{v.n \geq 0} v.n \left[\frac{(v-u)^2}{RT} - 4 \right] (v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} M dv \\
& = -\frac{(\gamma-1)}{2\gamma} \frac{\kappa}{p\sqrt{RT}} \frac{\rho}{2\pi} \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\omega^2 - 4) \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega.
\end{aligned}$$

On calcule séparément chaque terme de la somme

$$\bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n \omega^2 \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u \cdot n) z^2 R_{ot}(z) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot R_{ot} \left(\begin{array}{c} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u \cdot n) z^2 z_1 e^{-z^2/2} dz \\ \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u \cdot n) z^2 z_2 e^{-z^2/2} dz \end{array} \right) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot R_{ot} \left(\begin{array}{c} \sqrt{RT}(a_{40} + a_{22}) + u \cdot n (a_{30} + a_{12}) \\ 0 \end{array} \right) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot R_{ot} \left(\begin{array}{c} -u \cdot n a_{10} + 4\sqrt{RT} a_{00} \\ 0 \end{array} \right). \\
&\bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot R_{ot} \left(\begin{array}{c} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u \cdot n) z_1 e^{-z^2/2} dz \\ \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u \cdot n) z_2 e^{-z^2/2} dz \end{array} \right) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot R_{ot} \left(\begin{array}{c} \sqrt{RT} a_{20} + u_1 a_{10} \\ 0 \end{array} \right) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot R_{ot} \left(\begin{array}{c} \sqrt{RT} a_{00} \\ 0 \end{array} \right).
\end{aligned}$$

Ainsi $F_1^{ch} \cdot n$ s'écrit, après simplification,

$$F_1^{ch} \cdot n = \frac{(\gamma - 1)}{4\pi\gamma} \frac{\kappa}{(RT)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{\partial T}{\partial x_1} n_1 + \frac{\partial T}{\partial x_2} n_2 \right) u \cdot n a_{10}.$$

Finalement la 1ere composante du flux s'écrit

$$\begin{aligned}
F_1(U)^+.n &= \frac{\rho}{2\pi} (\sqrt{RT} a_{10} + u.n a_{00}) \\
&- \frac{\mu}{2\pi\sqrt{RT}} \left[\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} n_1^2 + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} n_2^2 \right) + \frac{(1-\gamma)}{2} \operatorname{div} u + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) n_1 n_2 \right] a_{10} \\
&+ \frac{(\gamma-1)}{4\pi\gamma} \frac{\kappa}{(RT)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{\partial T}{\partial x_1} n_1 + \frac{\partial T}{\partial x_2} n_2 \right) u.n a_{10}.
\end{aligned}$$

6.5 Calcul des composantes $F_2(U)^+.n$ et $F_3(U)^+.n$

Calcul de $F_2^c.n$ et $F_3^c.n$

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} F_2^c.n \\ F_3^c.n \end{pmatrix} &= \int_{v.n \geq 0} v.n v M(v) dv \\
&= \frac{\rho}{2\pi RT} \int_{v.n \geq 0} v.n v e^{-(v-u)^2/2RT} dv \\
&= \frac{\rho}{2\pi} \int_{\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega+u).n \begin{pmatrix} \sqrt{RT}\omega_1+u_1 \\ \sqrt{RT}\omega_2+u_2 \end{pmatrix} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \frac{\rho}{2\pi} R_{ot} \begin{pmatrix} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n)^2 e^{-z^2/2} dz \\ \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n)(\sqrt{RT} z_2 + u.\tau) e^{-z^2/2} dz \end{pmatrix} \\
&= \frac{\rho}{2\pi} R_{ot} \begin{pmatrix} RT a_{20} + 2\sqrt{RT}u.n a_{10} + u.n^2 a_{00} \\ \sqrt{RT} a_{10} + u.n u.\tau a_{00} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\rho}{2\pi} R_{ot} \begin{pmatrix} \sqrt{RT} u.n a_{10} + (RT + u.n^2) a_{00} \\ \sqrt{RT} u.\tau a_{10} + u.n u.\tau a_{00} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Calcul de $F_2^v \cdot n$ et $F_3^v \cdot n$

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} F_2^v \cdot n \\ F_3^v \cdot n \end{pmatrix} &= - \frac{\mu}{pRT} \int_{v \cdot n \geq 0} v \cdot n \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \left[(v - u) \otimes (v - u) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{(1 - \gamma)}{2} (v - u)^2 I_3 + \lambda (1 - \gamma) RT I_3 \right] : \frac{\partial u}{\partial x} M(v) dv \\
&= - \frac{\mu}{2\pi RT} \int_{(\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \begin{pmatrix} \sqrt{RT}\omega_1 + u_1 \\ \sqrt{RT}\omega_2 + u_2 \end{pmatrix} \times \\
&\quad \times \left[\omega \otimes \omega + \frac{(1 - \gamma)}{2} \omega^2 I_3 + \lambda (1 - \gamma) I_3 \right] : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega
\end{aligned}$$

Nous calculons séparément chaque terme de la somme

$$\begin{aligned}
&\bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u) \cdot n \begin{pmatrix} \sqrt{RT}\omega_1 + u_1 \\ \sqrt{RT}\omega_2 + u_2 \end{pmatrix} \omega \otimes \omega : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1 + u \cdot n) R_{ot} \begin{pmatrix} \sqrt{RT}z_1 + u \cdot n \\ \sqrt{RT}z_2 + u \cdot \tau \end{pmatrix} (R_{ot} z \otimes z R_{ot}^{-1}) : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial u_i}{\partial x_i} R_{ot} \left(\begin{array}{l} \bullet \quad RT n_i^2 a_{40} + RT n_{(3-i)}^2 a_{22} + 2 \sqrt{RT} n_i^2 u \cdot n a_{30} \\ \quad + 2 \sqrt{RT} n_{(3-i)}^2 u \cdot n a_{12} + n_i^2 u \cdot n^2 a_{20} + n_{(3-i)}^2 u \cdot n^2 a_{02} \\ \bullet \quad (-1)^i 2 RT n_i n_{(3-i)} a_{22} + \sqrt{RT} n_i^2 u \cdot \tau a_{30} + \sqrt{RT} n_{(3-i)}^2 u \cdot \tau a_{12} \\ \quad (-1)^i 2 \sqrt{RT} n_i n_{(3-i)} u \cdot n a_{12} + n_i^2 u \cdot n u \cdot \tau a_{20} + n_{(3-i)}^2 u \cdot n u \cdot \tau a_{02} \end{array} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \operatorname{div}(u) R_{ot} \left(\begin{array}{l} \bullet \quad RT n_1 n_2 a_{40} - RT n_1 n_2 a_{22} + 2\sqrt{RT} n_1 n_2 u.n a_{30} \\ \quad - 2\sqrt{RT} n_1 n_2 u.n a_{12} + n_1 n_2 u.n^2 a_{20} - n_1 n_2 u.n^2 a_{02} \\ \bullet \quad RT (n_1^2 - n_2^2) a_{22} + \sqrt{RT} n_1 n_2 u.\tau a_{30} - \sqrt{RT} n_1 n_2 u.\tau a_{12} \\ \quad + \sqrt{RT} (n_1^2 - n_2^2) u.n a_{12} + n_1 n_2 u.n u.\tau a_{20} - n_1 n_2 u.n u.\tau a_{02} \end{array} \right) \\
& = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} R_{ot} \left(\begin{array}{l} (2RT n_i^2 + RT + u_n^2) a_{00} + \sqrt{RT} u.n a_{10} \\ \sqrt{RT} (1 + n_i^2) u.\tau a_{10} + ((-1)^i 2RT n_i n_{(3-i)} + u.\tau u.n) a_{00} \end{array} \right) \\
& + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) R_{ot} \left(\begin{array}{l} 2RT u_1 u_2 a_{00} \\ RT (n_1^2 - n_2^2) a_{00} + \sqrt{RT} n_1 n_2 u.\tau a_{10} \end{array} \right) \\
& \bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n \left(\begin{array}{l} \sqrt{RT}\omega_1 + u_1 \\ \sqrt{RT}\omega_2 + u_2 \end{array} \right) \omega^2 e^{-\omega^2/2} d\omega \\
& = \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n) R_{ot} \left(\begin{array}{l} \sqrt{RT} z_1 + u.n \\ \sqrt{RT} z_2 + u.\tau \end{array} \right) z^2 e^{-z^2/2} dz \\
& = R_{ot} \left(\begin{array}{l} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n)^2 z^2 e^{-z^2/2} dz \\ \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n) (\sqrt{RT} z_2 + u.\tau) z^2 e^{-z^2/2} dz \end{array} \right) \\
& = R_{ot} \left(\begin{array}{l} 2(2RT + u.n^2) a_{00} + 2\sqrt{RT} u.n a_{10} \\ 2u.n u.\tau a_{00} + 3\sqrt{RT} u.\tau a_{10} \end{array} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n \begin{pmatrix} \sqrt{RT}\omega_1 + u_1 \\ \sqrt{RT}\omega_2 + u_2 \end{pmatrix} e^{-\omega^2/2} d\omega \\ &= R_{ot} \begin{pmatrix} \sqrt{RT} u.n a_{10} + (RT + u.n^2) a_{00} \\ \sqrt{RT} u.\tau a_{10} + u.n u.\tau a_{00} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ainsi, après simplification, $F_2^v.n$ et $F_3^v.n$ s'écrivent

$$\begin{aligned} R_{ot}^{-1} \begin{pmatrix} F_2^v.n \\ F_3^v.n \end{pmatrix} &= -\frac{\mu}{2\pi RT} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \begin{pmatrix} (2n_i^2 + (1-\gamma))RT a_{00} \\ 2(-1)^i RT n_i n_{(3-i)} a_{00} + \left(\frac{(1-\gamma)}{2} + n_i^2\right) \sqrt{RT} u.\tau a_{10} \end{pmatrix} \\ &- \frac{\mu}{2\pi RT} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \begin{pmatrix} 2RT n_1 n_2 a_{00} \\ RT (n_1^2 - n_2^2) a_{00} + \sqrt{RT} n_1 n_2 u.\tau a_{10} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Calcul de $F_2^{ch}.n$ et $F_3^{ch}.n$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} F_2^{ch}.n \\ F_3^{ch}.n \end{pmatrix} &= -\frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\kappa}{2pRT} \int_{v.n \geq 0} v.n \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \left(\frac{(v-u)^2}{RT} - 4 \right) (v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} M(v) dv \\ &= -\frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\kappa}{4\pi(RT)^{\frac{3}{2}}} \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n \begin{pmatrix} \sqrt{RT}\omega_1 + u_1 \\ \sqrt{RT}\omega_2 + u_2 \end{pmatrix} \times \\ &\quad \times (\omega^2 - 4) \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\ &= -\frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\kappa}{4\pi(RT)^{\frac{3}{2}}} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1 + u.n) R_{ot} \begin{pmatrix} \sqrt{RT}z_1 + u_n \\ \sqrt{RT}z_2 + u_r \end{pmatrix} \times \\ &\quad \times (z^2 - 4) \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-z^2/2} dz. \end{aligned}$$

Nous calculons séparément chaque terme de la somme

$$\begin{aligned}
& \bullet \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u_n) R_{ot} \left(\frac{\sqrt{RT} z_1 + u_n}{\sqrt{RT} z_2 + u_r} \right) z^2 \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial T}{\partial x_i} R_{ot} \left(\begin{array}{l} \bullet RT n_i (a_{50} + a_{32}) + 2 \sqrt{RT} n_i u.n (a_{40} + a_{22}) \\ + n_i u.n^2 (a_{30} + a_{12}) \\ \bullet \sqrt{RT} n_i u.\tau (a_{40} + a_{22}) + n_i u.n u.\tau (a_{30} + a_{12}) \\ + (-1)^i RT n_{(3-i)} (a_{32} + a_{14}) + (-1)^i \sqrt{RT} n_{(3-i)} u.n (a_{22} + a_{04}) \end{array} \right) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x_i} R_{ot} \left(\begin{array}{l} \bullet 10 RT n_i a_{10} + 8 \sqrt{RT} n_i u.n a_{00} \\ \bullet (5(-1)^i RT n_{(3-i)} - n_i u.n u.\tau) a_{10} \\ + 4 \sqrt{RT} ((-1)^i n_{(3-i)} u.n + n_i u.\tau) a_{00} \end{array} \right). \\
& \bullet \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u_n) R_{ot} \left(\frac{\sqrt{RT} z_1 + u_n}{\sqrt{RT} z_2 + u_r} \right) \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial T}{\partial x_i} R_{ot} \left(\begin{array}{l} \bullet RT n_i a_{30} + 2 \sqrt{RT} n_i u.n a_{20} + n_i u.n^2 a_{10} \\ \bullet \sqrt{RT} n_i u.\tau a_{20} + n_i u.n u.\tau a_{10} \\ + (-1)^i RT n_{(3-i)} a_{12} + (-1)^i \sqrt{RT} n_{(3-i)} u.n a_{02} \end{array} \right) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x_i} R_{ot} \left(\begin{array}{l} 2 RT n_i a_{10} + 2 \sqrt{RT} n_i u.n a_{00} \\ (-1)^i RT n_{(3-i)} a_{10} + \sqrt{RT} ((-1)^i n_{(3-i)} u.n + n_i u.\tau) a_{00} \end{array} \right).
\end{aligned}$$

Après simplification $F_2^{ch}.n$ et $F_3^{ch}.n$ peuvent s'écrire

$$\begin{pmatrix} F_2^{ch}.n \\ F_3^{ch}.n \end{pmatrix} = -\frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\kappa}{4\pi(RT)^{\frac{3}{2}}} \frac{\partial T}{\partial x_i} R_{ot} \begin{pmatrix} 2 RT n_i a_{10} \\ ((-1)^i RT n_{(3-i)} - n_i u.n u.\tau) a_{10} \end{pmatrix}.$$

Finalement, les composantes 2 et 3 du flux s'écrivent

$$\begin{aligned} R_{ot}^{-1} \begin{pmatrix} F_2(U)^+.n \\ F_3(U)^+.n \end{pmatrix} &= \frac{\rho}{2\pi} \begin{pmatrix} \sqrt{RT} u.n a_{10} + (RT + u.n^2) a_{00} \\ \sqrt{RT} u.\tau a_{10} + u.n u.\tau a_{00} \end{pmatrix} \\ &- \frac{\mu}{2\pi} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \begin{pmatrix} (2 n_i^2 + (1-\gamma)) a_{00} \\ (-1)^i 2 n_1 n_2 a_{00} + \left(\frac{(1-\gamma)}{2} + n_i^2 \right) \frac{1}{\sqrt{RT}} u.\tau a_{10} \end{pmatrix} \\ &- \frac{\mu}{2\pi} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \begin{pmatrix} 2 n_1 n_2 a_{00} \\ (n_1^2 - n_2^2) a_{00} + \frac{1}{\sqrt{RT}} n_1 n_2 u.\tau a_{10} \end{pmatrix} \\ &- \frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\kappa}{4\pi\sqrt{RT}} \frac{\partial T}{\partial x_i} \begin{pmatrix} 2 n_i a_{10} \\ ((-1)^i n_{(3-i)} - \frac{1}{RT} n_i u.n u.\tau) a_{10} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

6.6 Calcul de la composante $F_4(U)^+.n$

Rappelons que pour cette composante du flux il apparait une contribution supplémentaire donnée par g_{NS} . Nous écrivons alors

$$\begin{aligned}
F_4(U)^+.n &= \int_{v.n \geq 0} v.n \left(\frac{v^2}{2} f_{NS} + g_{NS} \right) dv \\
&= \int_{v.n \geq 0} v.n \left(\frac{v^2}{2} + \lambda RT \right) f_{NS} dv \\
&\quad - \frac{\lambda \mu}{\rho T} \int_{v.n \geq 0} v.n \left((v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + (1-\gamma) T \operatorname{div}(u) \right) M(v) dv \\
&= \lambda RT F_1(U)^+.n + \int_{v.n \geq 0} v.n \frac{v^2}{2} f_{NS} dv \\
&\quad - \frac{\lambda \mu}{\rho T} \int_{v.n \geq 0} v.n \left((v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + (1-\gamma) T \operatorname{div}(u) \right) M(v) dv \\
&= \lambda RT F_1(U)^+.n + F_4^c.n + F_4^v.n + F_4^{ch}.n + F_4^{comp}.n,
\end{aligned}$$

où $F_4^{comp}.n$ est le dernier terme de la somme précédente.

Calcul de $F_4^c.n$

$$\begin{aligned}
F_4^c.n &= \int_{v.n \geq 0} v.n \frac{v^2}{2} M(v) dv \\
&= \frac{\rho}{4\pi RT} \int_{v.n \geq 0} v.n v^2 e^{-(v-u)^2/2RT} dv
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\rho}{4\pi} \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\sqrt{RT}\omega + u)^2 e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \frac{\rho}{4\pi} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n) \left((\sqrt{RT} z_1 + u.n)^2 + (\sqrt{RT} z_2 + u.\tau)^2 \right) e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\rho}{4\pi} \left[(RT)^{\frac{3}{2}} a_{30} + 3 RT u.n a_{20} + 3 \sqrt{RT} u.n^2 a_{10} + u.n^3 a_{00} \right. \\
&\quad \left. + (RT)^{\frac{3}{2}} a_{12} + \sqrt{RT} u.\tau^2 a_{10} + RT u.n a_{02} + u.n u.\tau^2 a_{00} \right] \\
&= \frac{\rho}{4\pi} \left(\sqrt{RT} (3 RT + u.n^2 + u.\tau^2) a_{10} + (4 RT + u.n^2 + u.\tau^2) u.n a_{00} \right).
\end{aligned}$$

Calcul de $F_4^v.n$

$$\begin{aligned}
F_4^v.n &= -\frac{\mu}{2\rho(RT)^2} \int_{v.n \geq 0} v.n v^2 \times \\
&\quad \times \left((v-u) \otimes (v-u) + \frac{(1-\gamma)}{2} (v-u)^2 I_3 + \lambda(1-\gamma) RT I_3 \right) : \frac{\partial u}{\partial x} \times \\
&\quad \times e^{-(v-u)^2/2RT} dv \\
&= -\frac{\mu}{4\pi(RT)} \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\sqrt{RT}\omega + u)^2 \times \\
&\quad \times \left(\omega \otimes \omega + \frac{(1-\gamma)}{2} \omega^2 I_3 + \lambda(1-\gamma) I_3 \right) : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega.
\end{aligned}$$

Nous calculons séparément chaque terme de la somme

$$\bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\sqrt{RT}\omega + u)^2 \omega \otimes \omega : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n) \left((\sqrt{RT} z_1 + u.n)^2 + (\sqrt{RT} z_2 + u.\tau)^2 \right) \times \\
&\quad \times (R_{ot} z \otimes z R_{ot}^{-1}) : \frac{\partial u}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \left(n_i^2 \beta_1 + (-1)^i 2 n_1 n_2 \beta_2 + n_{(3-i)}^2 \beta_3 \right) \\
&\quad + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) (n_1 n_2 (\beta_1 - \beta_3) + (n_1^2 - n_2^2) \beta_2),
\end{aligned}$$

où nous avons posé

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= (RT)^{\frac{3}{2}} a_{50} + 3 RT u.n a_{40} + 3 \sqrt{RT} u.n^2 a_{30} + u.n^3 a_{20} \\
&\quad + (RT)^{\frac{3}{2}} a_{32} + \sqrt{RT} u.\tau^2 a_{30} + RT u.n a_{22} + u.n u.\tau^2 a_{20} \\
&= (10 RT + u.n^2 + u.\tau^2) u.n a_{00} \\
&\quad + \sqrt{RT} (10 RT + u.n^2 + 2 u.\tau^2) a_{10} \\
\beta_2 &= 2 RT u.\tau a_{22} + 2 \sqrt{RT} u.n u.\tau a_{12} \\
&= 2 RT u.\tau a_{00}, \\
\beta_3 &= (RT)^{\frac{3}{2}} a_{32} + 3 RT u.n a_{22} + 3 \sqrt{RT} u.n^2 a_{12} + u.n^3 a_{02} \\
&\quad + (RT)^{\frac{3}{2}} a_{14} + \sqrt{RT} u.\tau^2 a_{12} + RT u.n a_{04} + u.n u.\tau^2 a_{02} \\
&= \sqrt{RT} (5 RT + u.n^2 + u.\tau^2) a_{10} \\
&\quad + (6 RT + u.n^2 + 2 u.\tau^2) u.n a_{00}.
\end{aligned}$$

De plus, on peut écrire

$$\beta_1 - \beta_3 = 4 RT u.n a_{00} + \sqrt{RT} (5 RT + u.\tau^2) a_{10}.$$

$$\begin{aligned}
& \bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\sqrt{RT}\omega + u)^2 \omega^2 e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \int_{z_1 \geq 0} (\sqrt{RT}z_1 + u.n) \left((\sqrt{RT}z_1 + u.n)^2 + (\sqrt{RT}z_2 + u.\tau)^2 \right) z^2 e^{-z^2/2} dz \\
&= (RT)^{\frac{3}{2}} (a_{50} + a_{32}) + 3 RT u.n (a_{40} + a_{22}) + 3 \sqrt{RT} u.n^2 (a_{30} + a_{12}) \\
&\quad + u.n^3 (a_{20} + a_{02}) + (RT)^{\frac{3}{2}} (a_{32} + a_{14}) + \sqrt{RT} u.\tau^2 (a_{30} + a_{12}) \\
&\quad + RT u.n (a_{22} + a_{04}) + u.n u.\tau^2 (a_{20} + a_{02}) \\
&= \sqrt{RT} (2 u.n^2 + 3 u.\tau^2 + 15 RT) a_{10} \\
&\quad + (16 RT + 2 (u.n^2 + u.\tau^2)) u.n a_{00}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\sqrt{RT}\omega + u)^2 e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= (\text{d\u00e9j\u00e0 calcul\u00e9}) \\
&= \sqrt{RT} (3 RT + u.n^2 + u.\tau^2) a_{10} + (4 RT + u.n^2 + u.\tau^2) u.n a_{00}.
\end{aligned}$$

Finalement, apr\u00e8s simplification, $F_4^v.n$ peut s'\u00e9crire

$$\begin{aligned}
F_4^v.n &= -\frac{\mu}{4\pi RT} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_i} (n_i^2 \beta_1 + 2(-1)^i n_1 n_2 \beta_2 + n_{(3-i)}^2 \beta_3) \right. \\
&\quad + \frac{(1-\gamma)}{2} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} (\sqrt{RT} (2 u.n^2 + 3 u.\tau^2 + 15 RT) a_{10} \\
&\quad + (16 RT + 2 (u.n^2 + u.\tau^2)) u.n a_{00}) \\
&\quad + \lambda(1-\gamma) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} (\sqrt{RT} (3 RT u.n^2 + u.\tau^2) a_{10} + (4 RT + u.n^2 + u.\tau^2) u.n a_{00}) \\
&\quad \left. + \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) (n_1 n_2 (\beta_1 - \beta_3) + (n_1^2 - n_2^2) \beta_2) \right].
\end{aligned}$$

Calcul de $F_4^{ch}.n$

$$\begin{aligned}
F_4^{ch}.n &= - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{\kappa}{2pRT} \int_{v.n \geq 0} v.n \frac{v^2}{2} \left(\frac{(v - u)^2}{RT} - 4 \right) (v - u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} M(v) dv \\
&= - \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \frac{\kappa}{8\pi(RT)^{\frac{3}{2}}} \int_{(\sqrt{RT}\omega + u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n \times \\
&\quad \times (\sqrt{RT}\omega + u)^2 (\omega^2 - 4) \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega.
\end{aligned}$$

Nous calculons séparément chaque terme de la somme

$$\begin{aligned}
&\bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega + u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\sqrt{RT}\omega + u)^2 \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \int_{z_1 \geq 0} (\sqrt{RT} z_1 + u.n) \left((\sqrt{RT} z_1 + u.n)^2 + (\sqrt{RT} z_2 + u.\tau)^2 \right) \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial T}{\partial x_1} (n_1 \alpha_1 - n_2 \alpha_2) + \frac{\partial T}{\partial x_2} (n_2 \alpha_1 + n_1 \alpha_2) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot Rot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

où nous avons posé

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= (RT)^{\frac{3}{2}} a_{40} + 3 RT u.n a_{30} + 3 \sqrt{RT} u.n^2 a_{20} + u.n^3 a_{10} \\
&\quad + (RT)^{\frac{3}{2}} a_{22} + \sqrt{RT} u.\tau^2 a_{20} + RT u.n a_{12} + u.n u.\tau^2 a_{10} \\
&= 3 RT u.n a_{10} + \sqrt{RT} (4 RT + 3 u.n^2 + u.\tau^2) a_{00}, \\
\alpha_2 &= 2 RT u.\tau a_{12} + 2 \sqrt{RT} u.n u.\tau a_{02} \\
&= 2 \sqrt{RT} (\sqrt{RT} a_{10} + u.n a_{00}) u.\tau.
\end{aligned}$$

De même, le second terme s'écrit

$$\begin{aligned}
& \bullet \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega + u).n (\sqrt{RT}\omega + u)^2 \omega^2 \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\
&= \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT} z_1 + u.n) \left((\sqrt{RT} z_1 + u.n)^2 + (\sqrt{RT} z_2 + u.\tau)^2 \right) \times \\
&\quad \times z^2 \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\
&= \frac{\partial T}{\partial x_1} (n_1 \gamma_1 - n_2 \gamma_2) + \frac{\partial T}{\partial x_2} (n_2 \gamma_1 + n_1 \gamma_2) \\
&= \frac{\partial T}{\partial x} \cdot R_{ot} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

où nous avons posé

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= (RT)^{\frac{3}{2}} (a_{60} + a_{42}) + 3 RT u.n (a_{50} + a_{32}) + 3 \sqrt{RT} u.n^2 (a_{40} + a_{22}) \\
&\quad + u.n^3 (a_{30} + a_{12}) + (RT)^{\frac{3}{2}} (a_{42} + a_{24}) + \sqrt{RT} u.\tau^2 (a_{40} + a_{22}) \\
&\quad + RT u.n (a_{32} + a_{14}) + u.n u.\tau^2 (a_{30} + a_{12}) \\
&= (11 RT u.n - u.n u.\tau^2) a_{10} \\
&\quad + \sqrt{RT} (24 RT + 12 u.n^2 + 4 u.\tau^2) a_{00}, \\
\gamma_2 &= 2 RT u.\tau (a_{32} + a_{14}) + 2 \sqrt{RT} u.n u.\tau (a_{22} + a_{04}) \\
&= 10 RT u.\tau a_{10} + 8 \sqrt{RT} u.n u.\tau a_{00}.
\end{aligned}$$

Finalement l'expression de $F_4^{ch}.n$ peut s'écrire

$$F_4^{ch}.n = -\frac{(\gamma-1)}{\gamma} \frac{\kappa}{8\pi(\sqrt{RT})^{\frac{3}{2}}} \frac{\partial T}{\partial x} \cdot Rot \begin{pmatrix} -4\alpha_1 + \gamma_1 \\ -4\alpha_2 + \gamma_2 \end{pmatrix}.$$

Calcul de $F_4^{comp}.n$

$$F_4^{comp}.n = -\frac{\lambda\mu}{\rho T} \int_{v.n \geq 0} v.n \left((v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} + (1-\gamma) T \operatorname{div}(u) \right) M(v) dv.$$

Nous calculons séparément chaque terme de la somme

$$\begin{aligned} & \bullet -\frac{\lambda\mu}{\rho T} \int_{v.u \geq 0} v.n(v-u) \cdot \frac{\partial T}{\partial x} M(v) dv \\ &= -\frac{\lambda\mu}{2\pi} \frac{R}{\sqrt{RT}} \int_{(\sqrt{RT}\omega+u).n \geq 0} (\sqrt{RT}\omega+u).n \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-\omega^2/2} d\omega \\ &= -\frac{\lambda\mu}{2\pi} \frac{R}{\sqrt{RT}} \int_{z_1 \geq \alpha} (\sqrt{RT}z_1+u.n) \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial x} e^{-z^2/2} dz \\ &= -\frac{\lambda\mu}{2\pi} \frac{R}{\sqrt{RT}} \left[\frac{\partial T}{\partial x_1} (\sqrt{RT} n_1 a_{20} + n_1 u.n a_{10}) \right. \\ & \quad \left. + \frac{\partial T}{\partial x_2} (\sqrt{RT} n_2 a_{20} + n_2 u.\tau a_{10}) \right] \\ &= -\frac{\lambda\mu}{2\pi} R \left(\frac{\partial T}{\partial x_1} n_1 + \frac{\partial T}{\partial x_2} n_2 \right) a_{00}. \\ & \bullet -\frac{\lambda\mu}{\rho T} \int_{v.n \geq 0} v.u (1-\gamma) T \operatorname{div}(u) M(v) dv \end{aligned}$$

$$= - \frac{\lambda\mu}{2\pi} (1 - \gamma) \operatorname{div}(u) (\sqrt{RT} a_{10} + u \cdot n a_{00}).$$

Finalement $F_4^{comp} \cdot n$ s'écrit

$$\begin{aligned} F_4^{comp} \cdot n &= - \frac{\lambda\mu}{2\pi} (1 - \gamma) \operatorname{div}(u) (\sqrt{RT} a_{10} + u \cdot n a_{00}) \\ &\quad - \frac{\lambda\kappa}{2\pi} \frac{(\gamma - 1)}{\gamma} \left(\frac{\partial T}{\partial x_1} n_1 + \frac{\partial T}{\partial n_2} \right) a_{00}. \end{aligned}$$

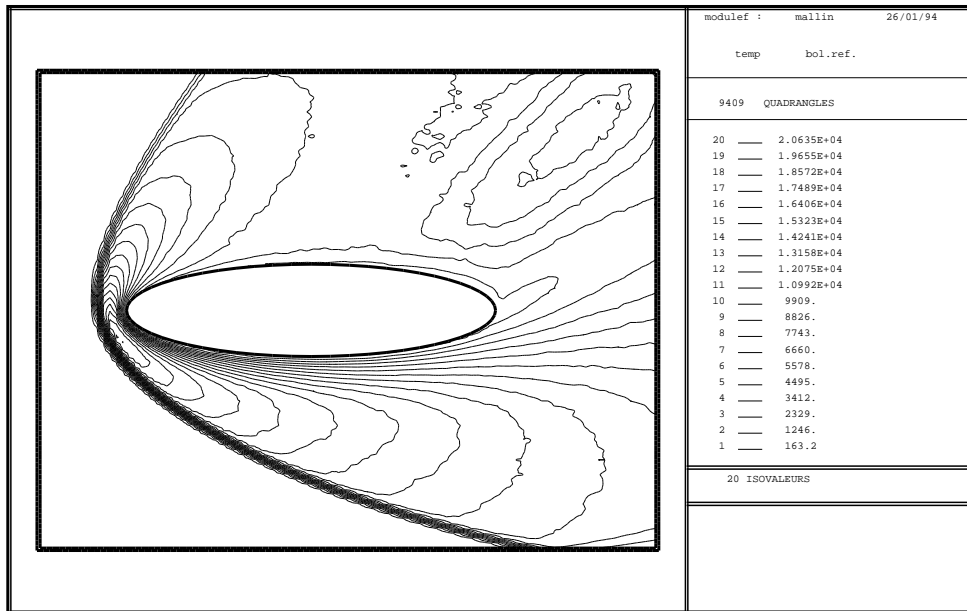


FIG. 8 - Lignes iso-Température

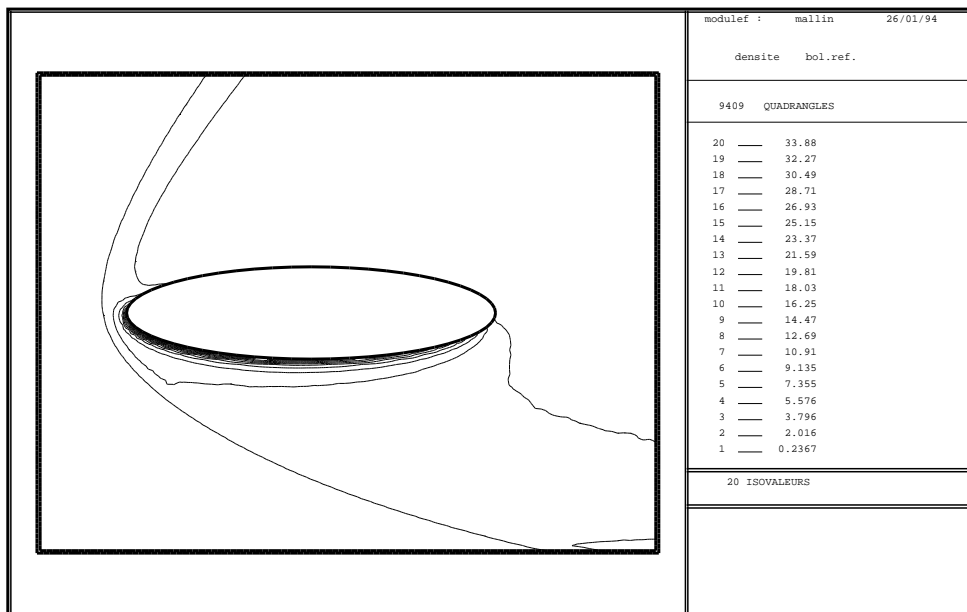
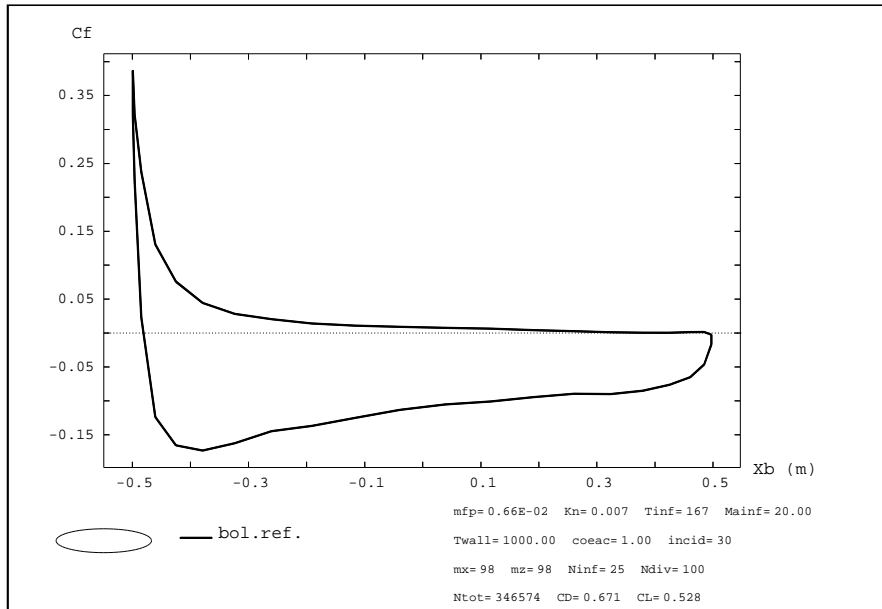
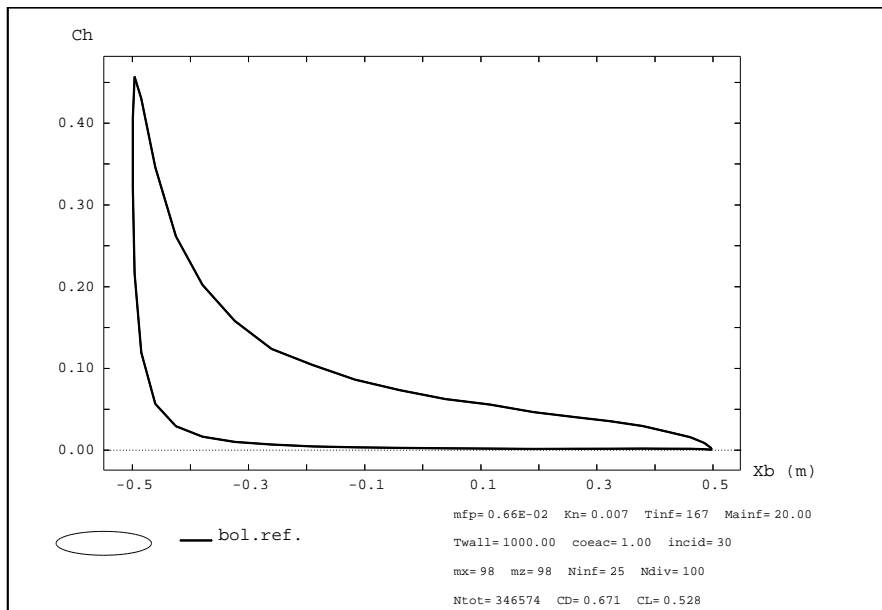


FIG. 9 - Lignes iso-densité

FIG. 10 - Coefficient de chaleur C_f FIG. 11 - Coefficient de frottement Ch

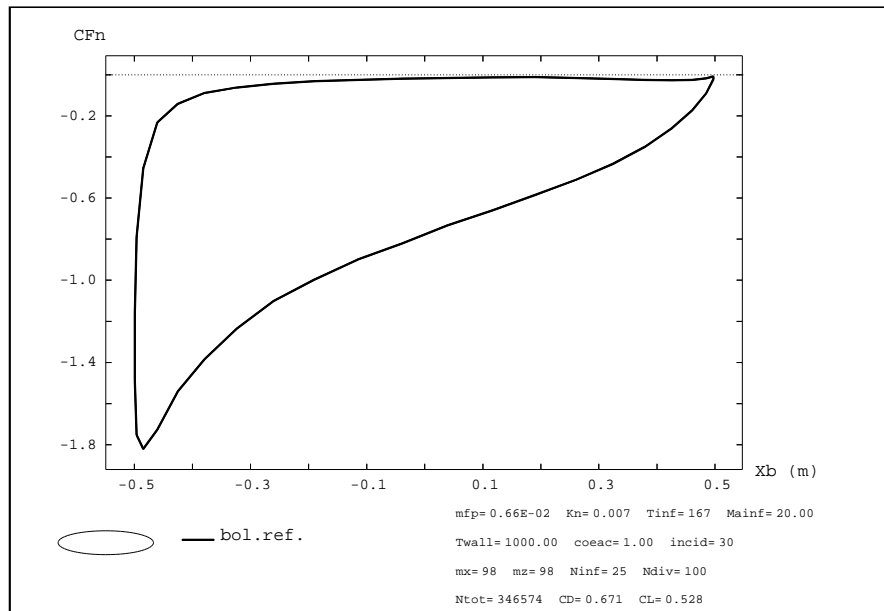
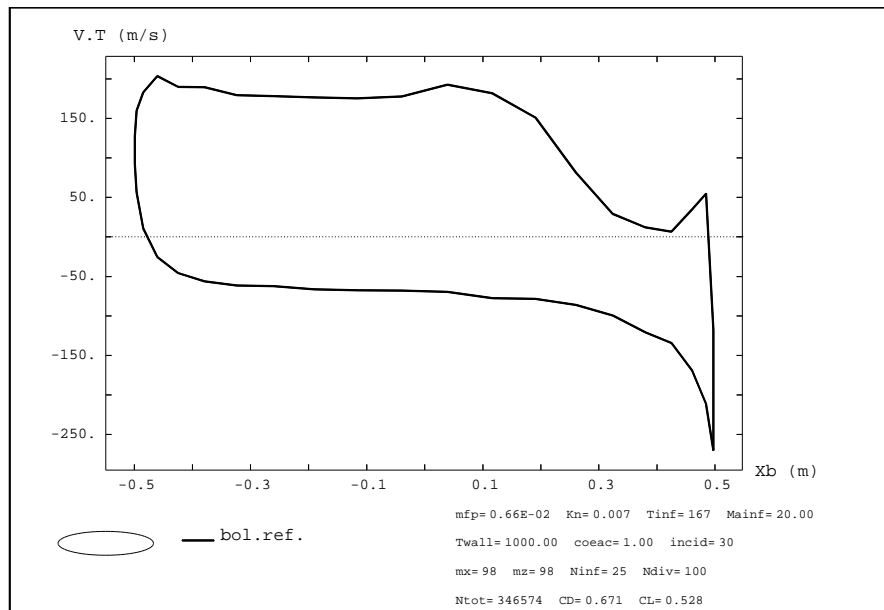
FIG. 12 - Coefficient de force normale C_{F_n} 

FIG. 13 - Vitesse tangentielle

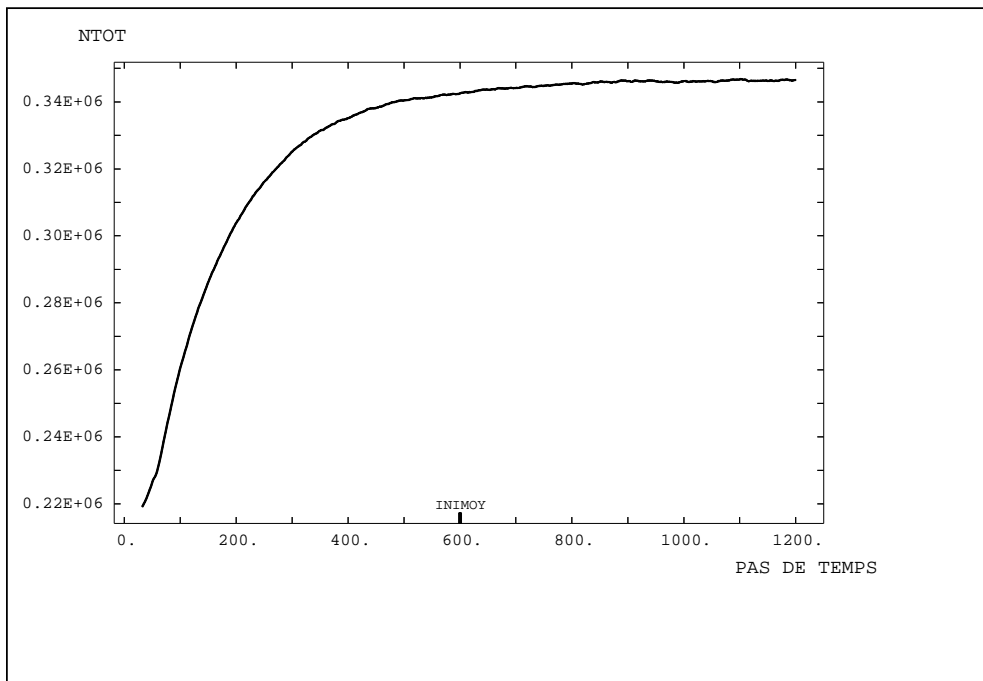
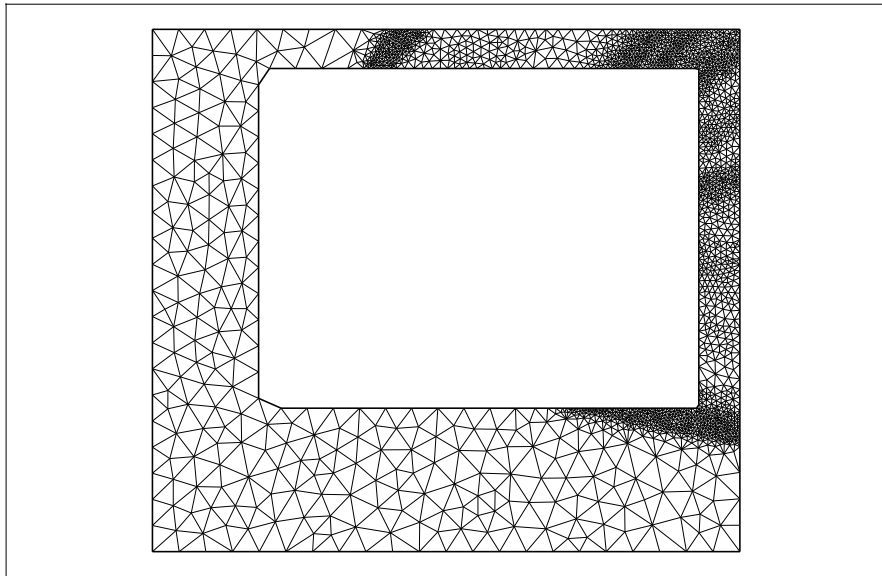
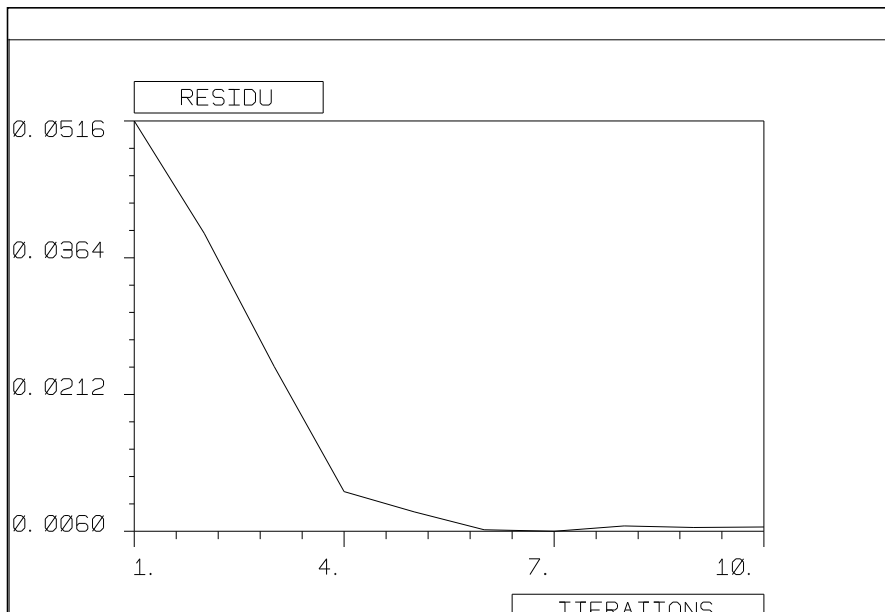


FIG. 14 - *Courbe de convergence*

FIG. 15 - *Maillage Navier-Stokes du couplage 1*FIG. 16 - *Residu du premier couplage B/NS*

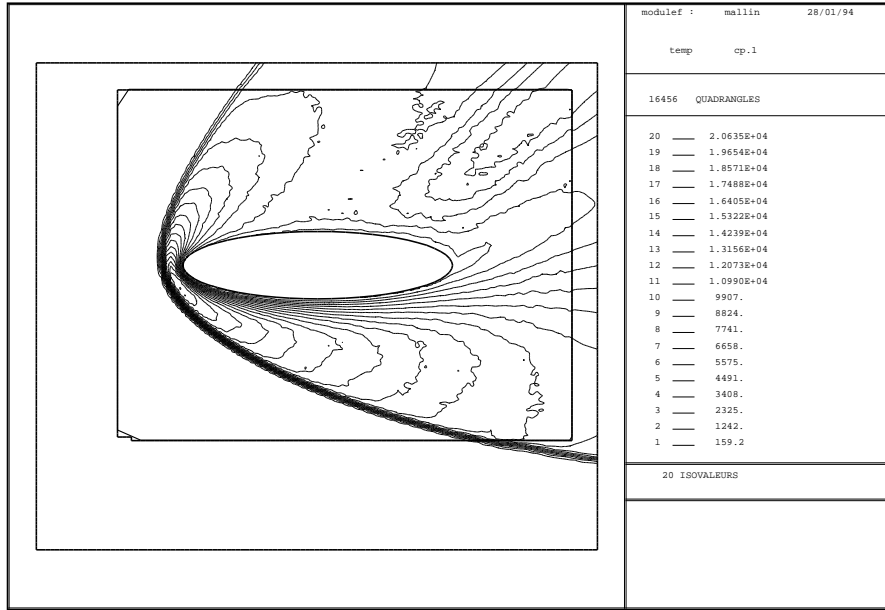


FIG. 17 - Lignes iso-Température

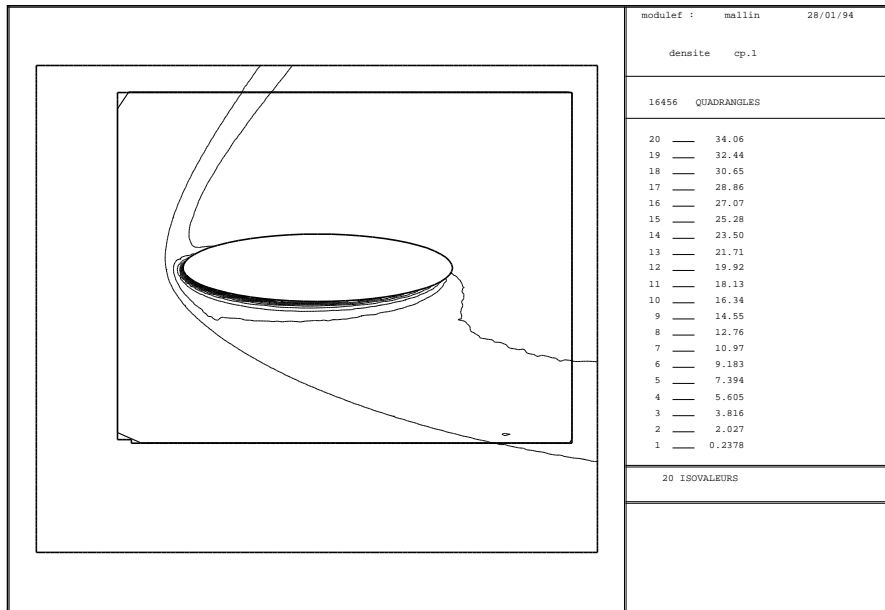


FIG. 18 - Lignes iso-densité

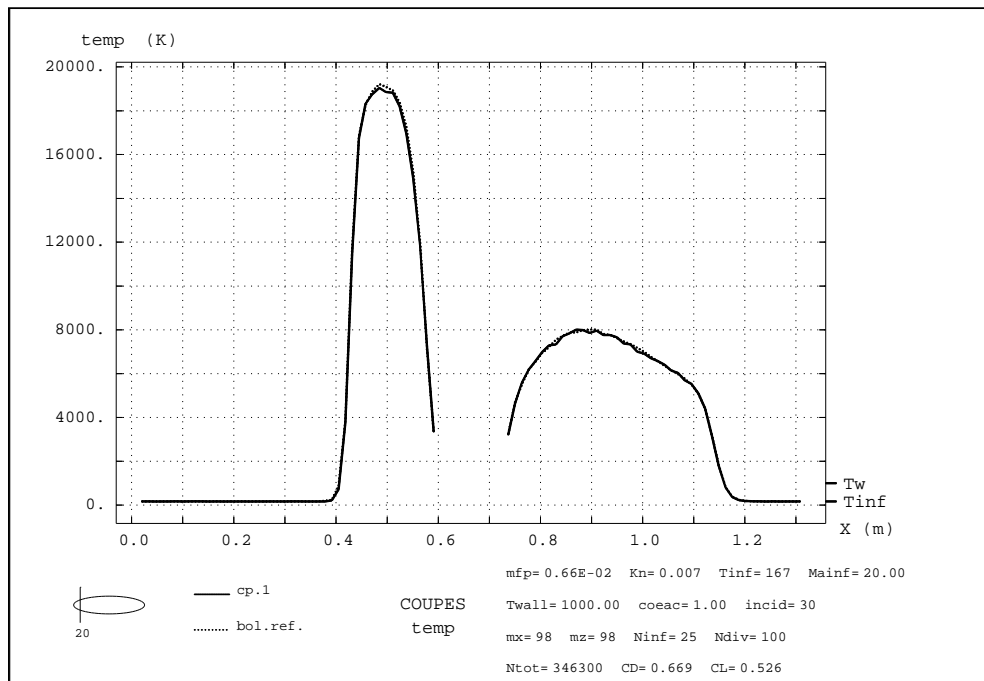


FIG. 19 - Coupe température

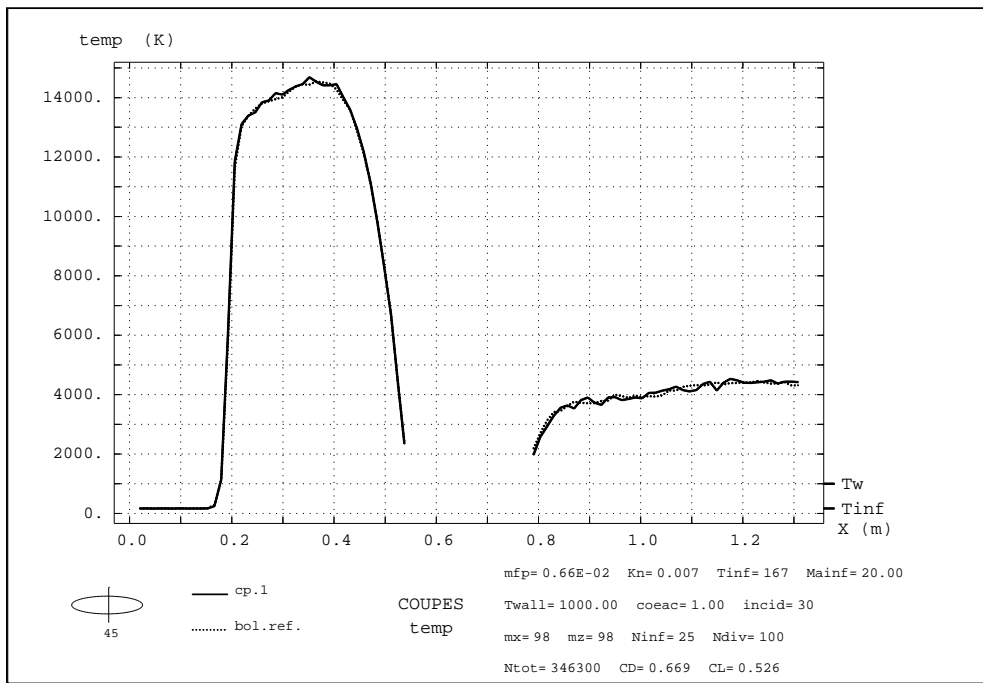
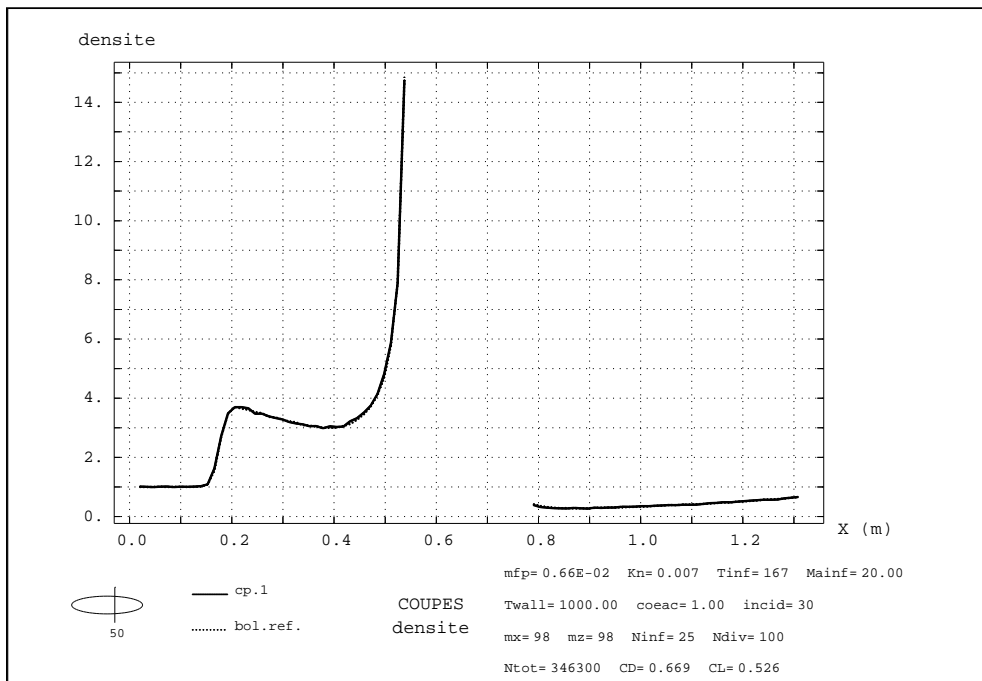


FIG. 20 - Coupe température

FIG. 21 - *Coupe densité*

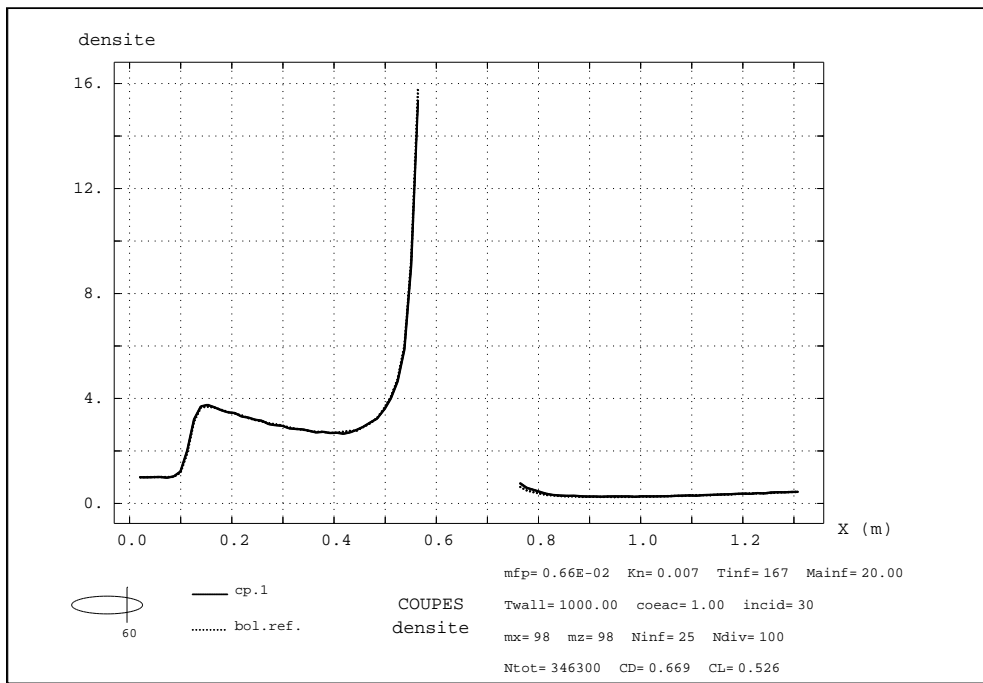
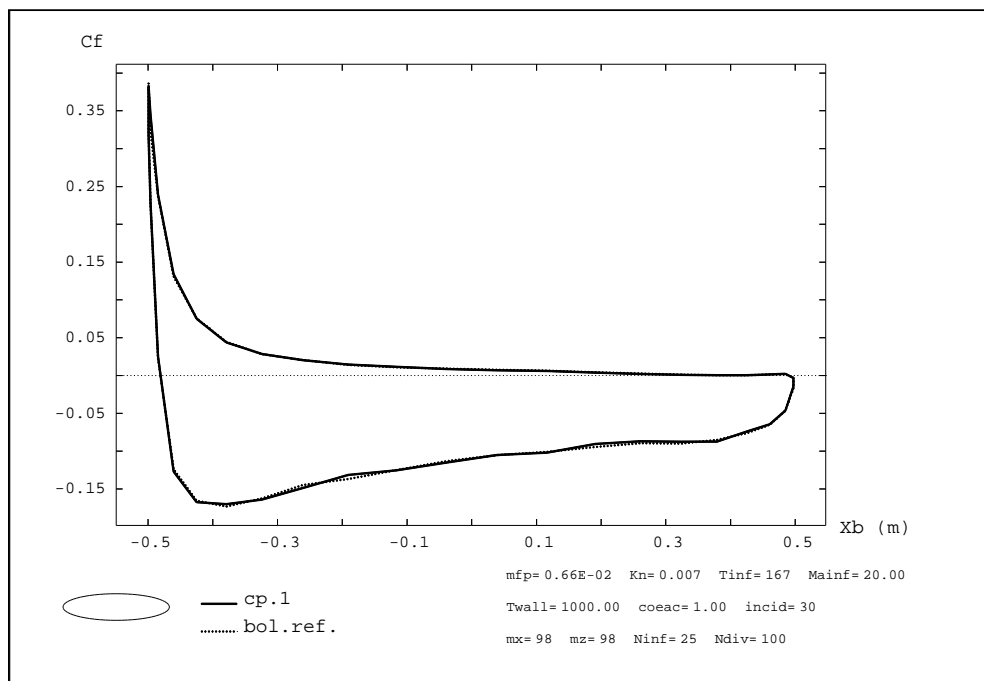
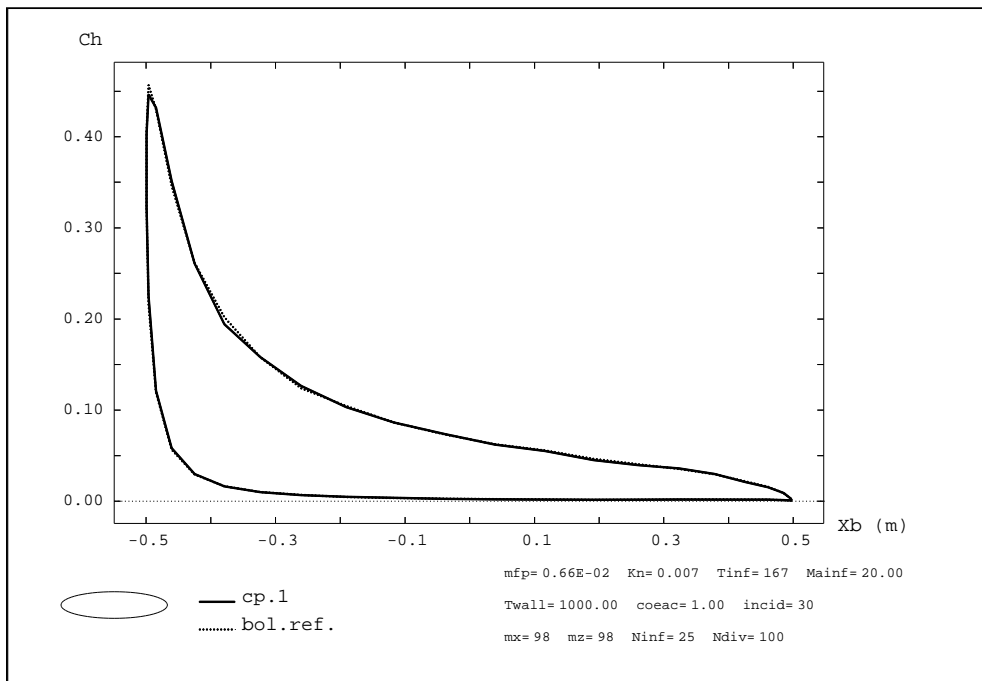
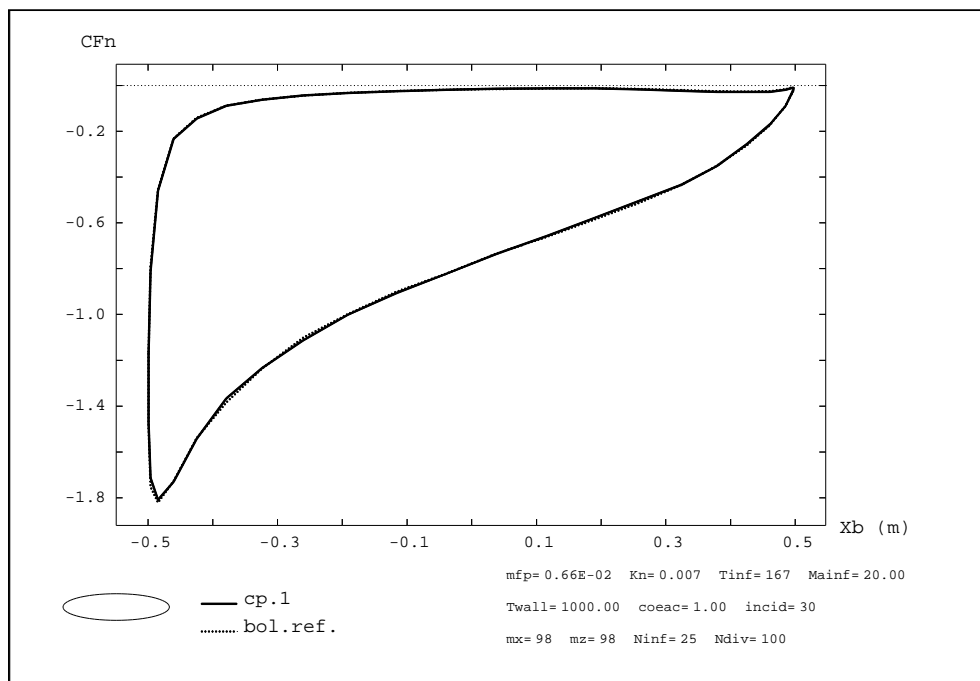
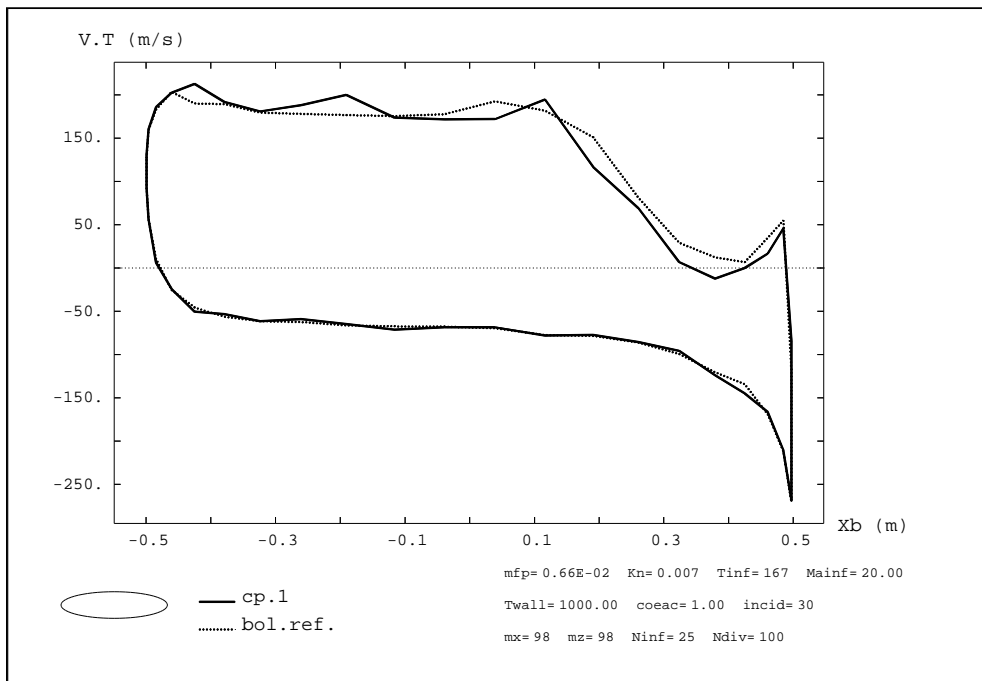


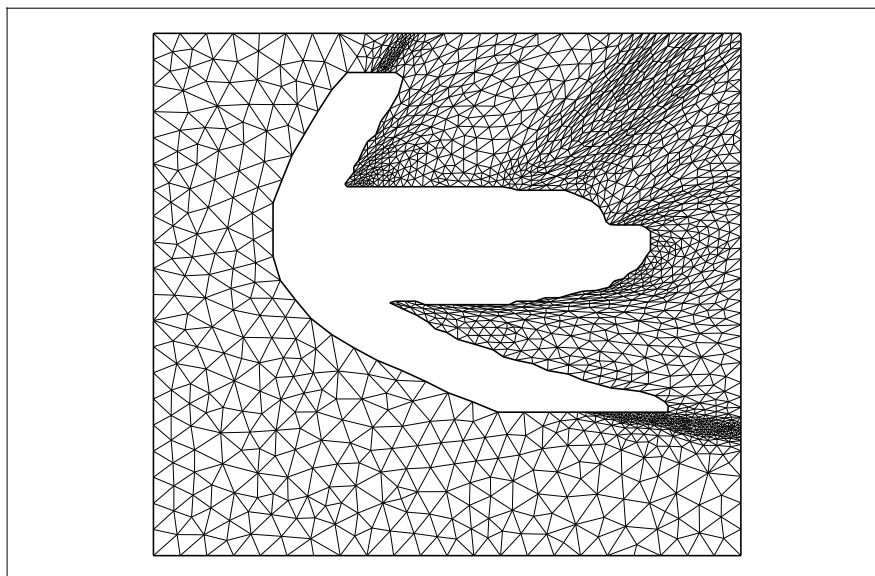
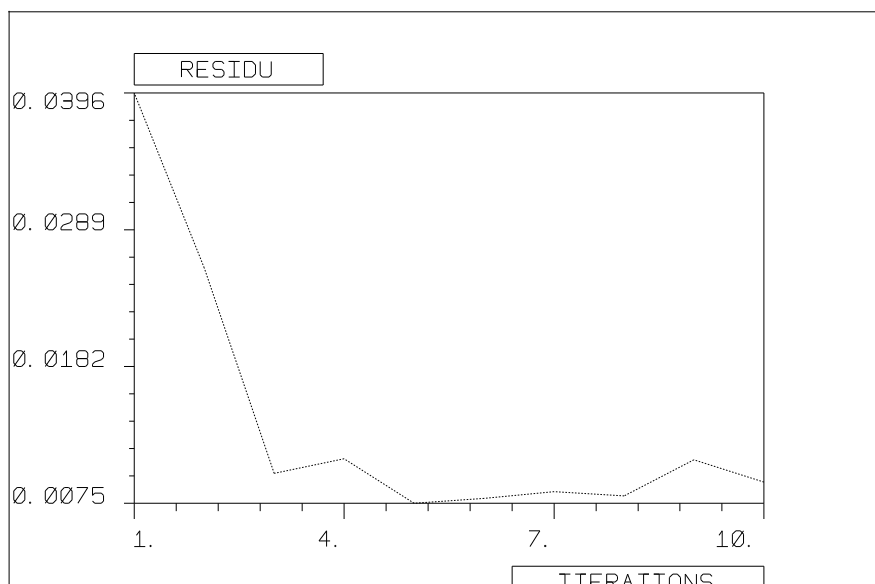
FIG. 22 - Coupe densité

FIG. 23 - Coefficient de frottement C_f

FIG. 24 - Coefficient de chaleur Ch

FIG. 25 - Coefficient de force normale C_{Fn}

FIG. 26 - *Vitesse tangentielle*

FIG. 27 - *Maillage Navier-Stokes du couplage 2*FIG. 28 - *Résidu du deuxième couplage B/NS*

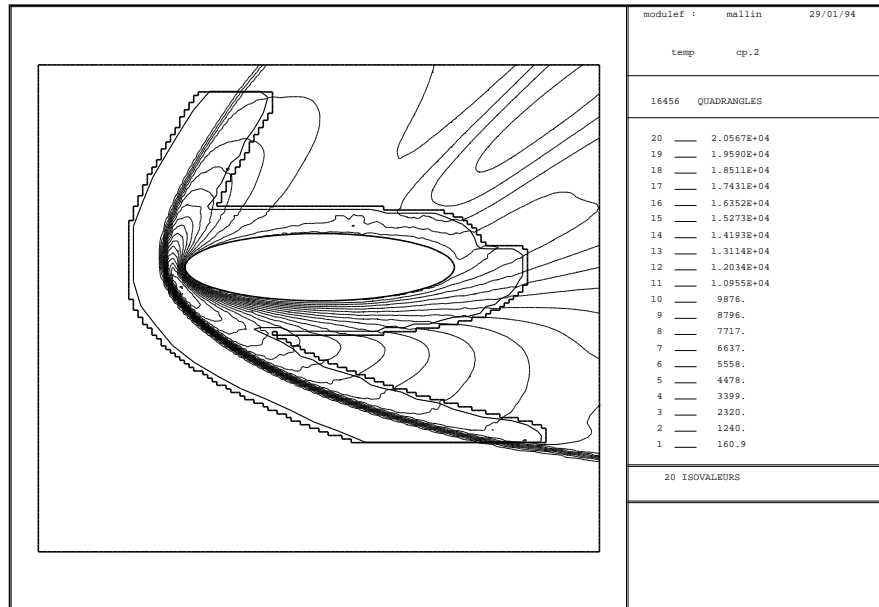


FIG. 29 - Lignes iso-Température

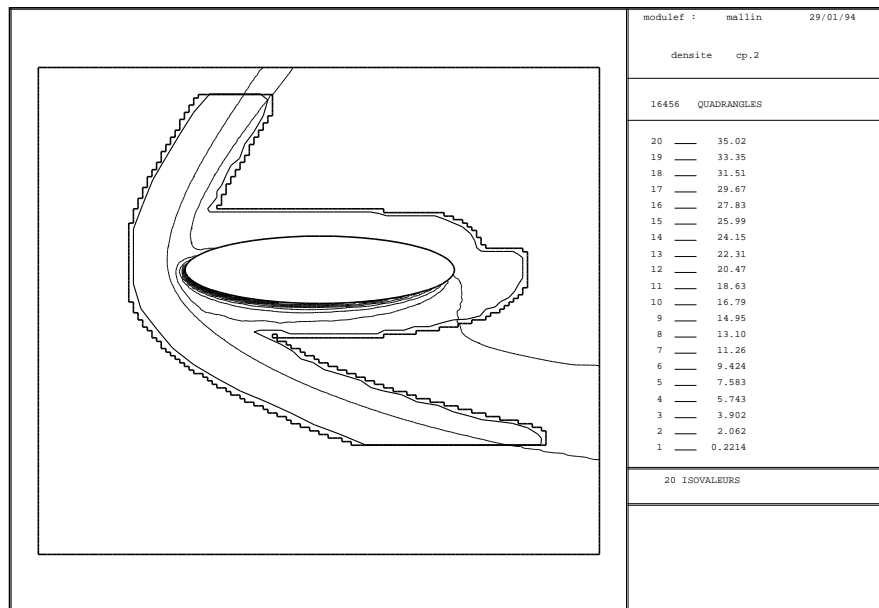


FIG. 30 - Lignes iso-densité

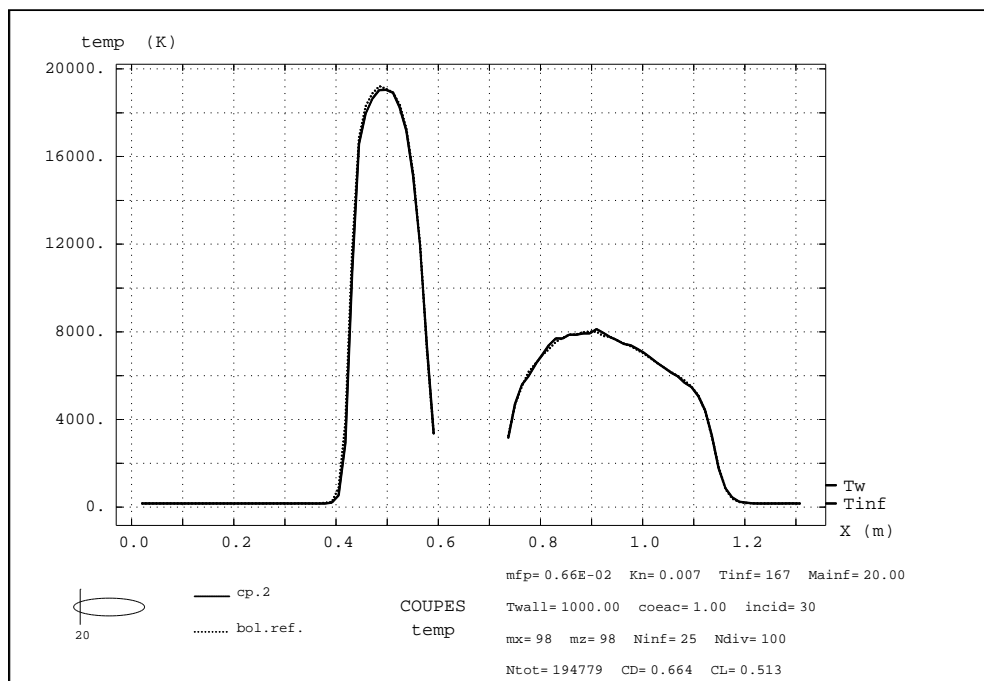


FIG. 31 - Coupe température

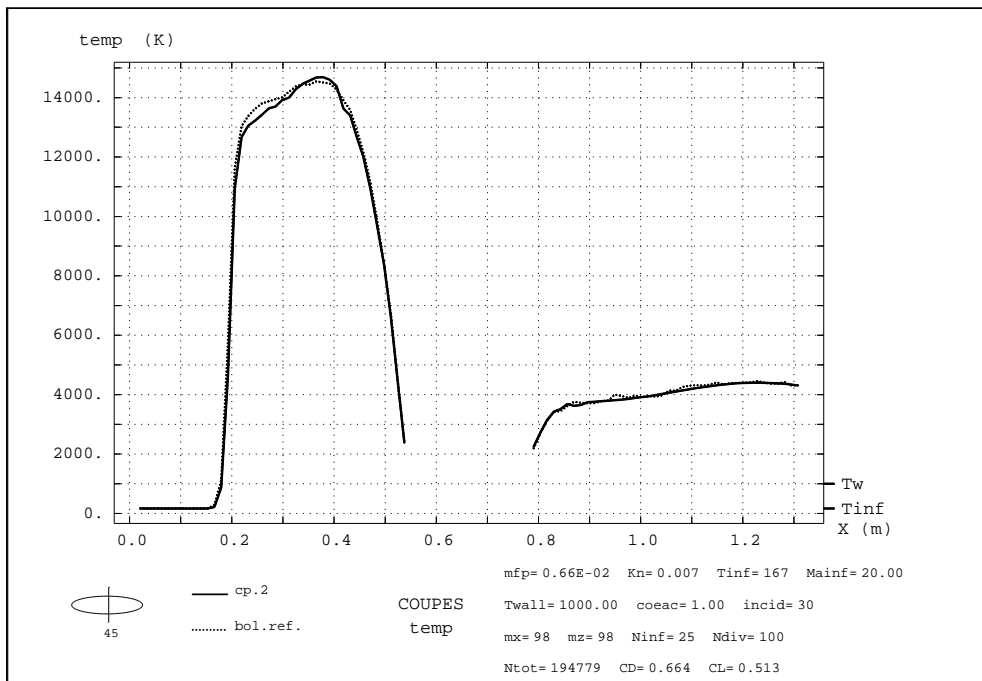


FIG. 32 - Coupe température

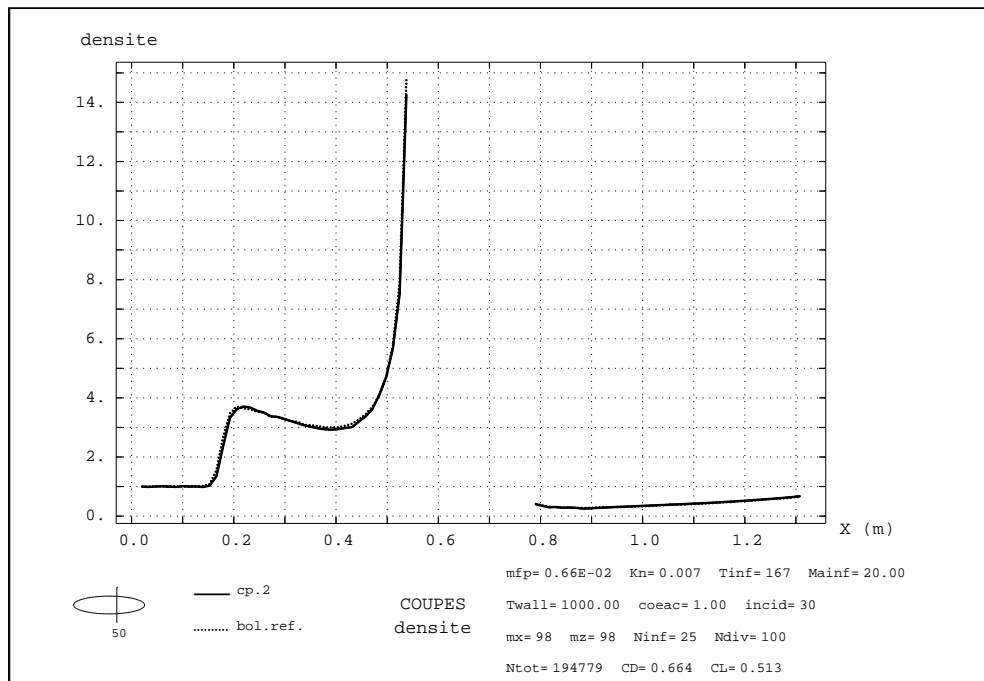


FIG. 33 - Coupe densité

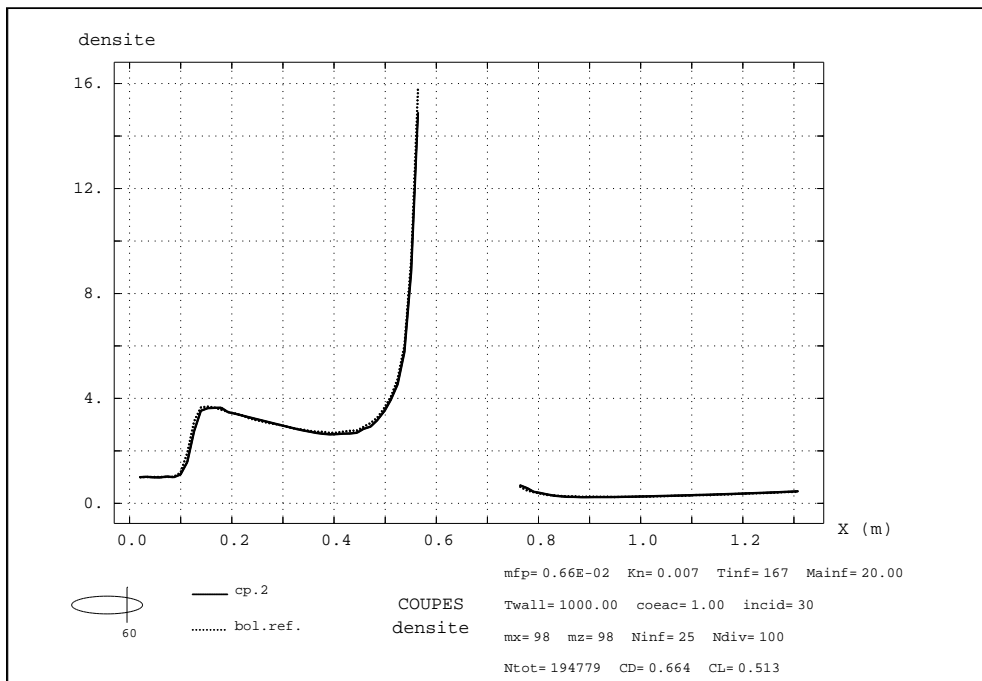
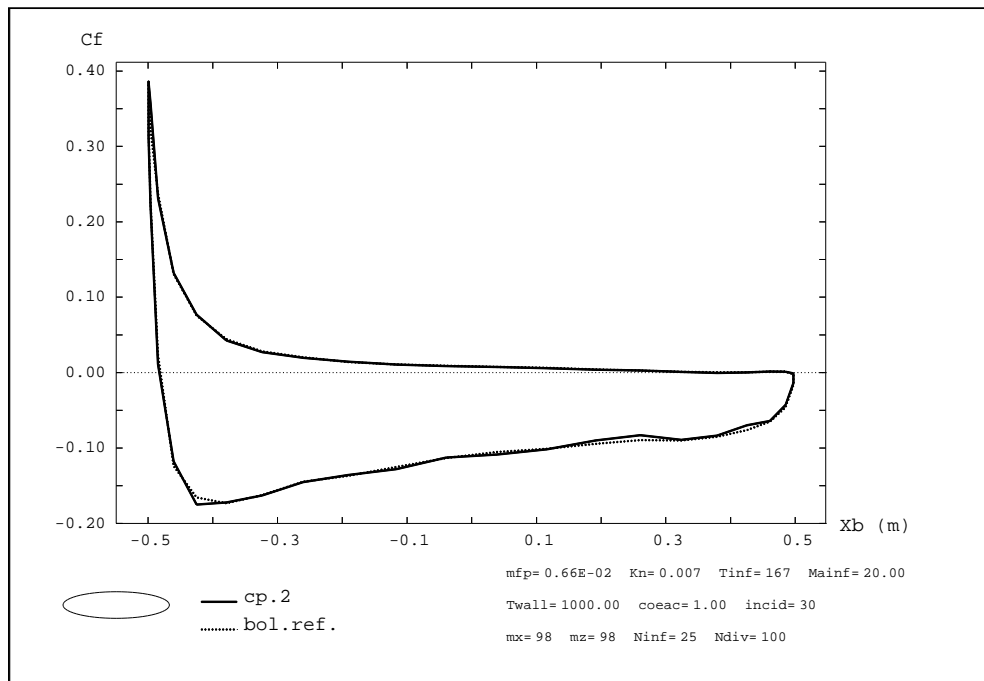
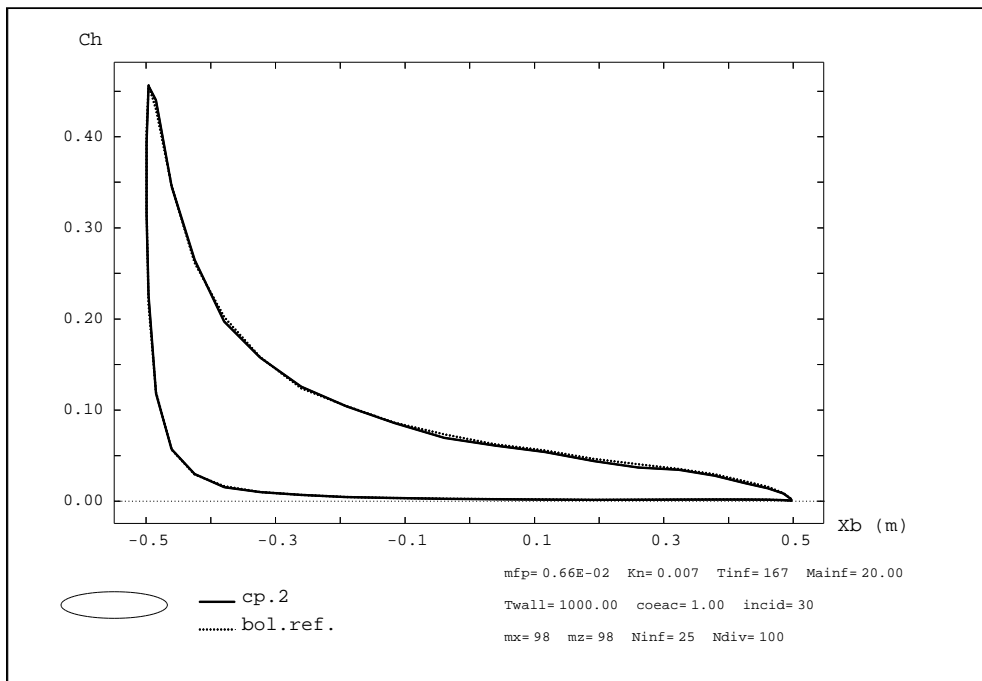


FIG. 34 - Coupe densité

FIG. 35 - Coefficient de frottement C_f

FIG. 36 - Coefficient de chaleur Ch