

# Autour de l'analyse et la simulation numérique des équations cinétiques

Francis FILBET

Institut Camille Jordan  
Université Claude Bernard Lyon 1

Institut Henri Poincaré, 20 Décembre 2012

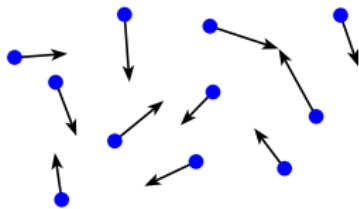


# Le bon choix de modélisation

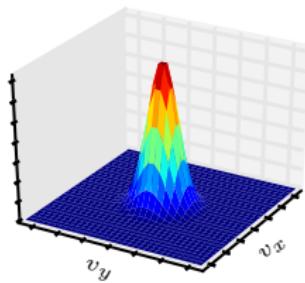


# Les échelles de modélisation

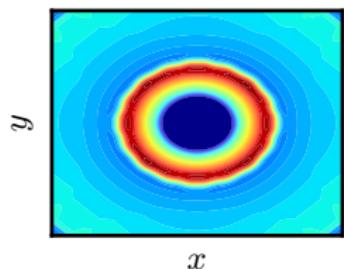
- **Microscopique**: les équations de Newton, système à  $N$  particules,
- **Mésoscopique**: l'équation de Boltzmann,
- **Macroscopique**: les équations de la mécanique des fluides (Euler ou Navier-Stokes).



$(x_i(t), v_i(t))_{1,\dots,N}$   
 $N \rightarrow \infty$



$f^\varepsilon(t, x, v)$   
 $\varepsilon \rightarrow 0$



$\rho(t, x), \mathbf{u}(t, x), E(t, x)$

# L'équation de Boltzmann

## Le modèle mathématique

Étude d'une fonction de distribution des particules  $f^\varepsilon(t, x, v)$ , qui dépend du temps  $t > 0$ , de l'espace  $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$  et de la vitesse  $v \in \mathbb{R}^d$ , qui est solution de<sup>a</sup>

$$\begin{cases} \frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \mathcal{Q}(f^\varepsilon), \\ f^\varepsilon(0, x, v) = f_0(x, v), \end{cases} \quad (1)$$

où  $\mathcal{Q}$  est un **opérateur de collisions**, décrivant la dynamique des collisions (partant d'une description microscopique) et  $\varepsilon$  représente un paramètre d'échelle particulièrement important.

---

<sup>a</sup>C. Bardos, C. Cercignani, R. DiPerna & P.-L. Lions, D. Levermore, C. Villani, F. Golse & L. Saint-Raymond

→  $\varepsilon$  est le **nombre de Knudsen**

# Hypothèses de modélisation

## Dynamique microscopique

- **interactions locales**: les particules interagissent seulement par contact (**collision**), à un temps  $t$  et une position  $x$  donnés;
- **Gaz dilué**: les collisions sont seulement binaires;
- **hypothèse du chaos de Boltzmann**: les vitesses des deux particules collisionnant sont non-corrélées avant la collision.

Le processus microscopique des collisions est dit

- **élastique** lorsque l'énergie cinétique est conservée durant la collision;
- **inélastique** lorsque une fraction de l'énergie est dissipée durant la collision.

## 1 Bref état de l'art des méthodes numériques

## 2 L'équation de Boltzmann pour les gaz granulaires

- Retour à l'équilibre (Gaz Granulaire)
- Formation de clusters dans un gaz granulaire

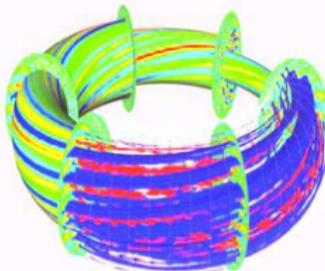
## 3 Les bactéries se balladent en groupe

# Bref état de l'art des méthodes numériques

Essentiellement deux approches distinctes

- Méthodes particulières : ensemble de “particules discrètes”
- Méthodes déterministes : résolution dans  $(x, v) \in \mathbb{R}^6$ .

J'ai développé<sup>1</sup> et analysé différentes méthodes numériques (PFC, algorithmes spectraux rapides) et des logiciels (VADOR).



## Principaux ingrédients

- Algorithmes rapides (FFT, multigrilles).
- Eliminer des petites échelles de  $f(t, x, v)$ .
- Reconstruction d'ordre élevé et amortissement des oscillations numériques (PFC, WENO).
- Analyse mathématique rigoureuse de stabilité.

## Applications

transport en physique des plasmas, oscillation de l'entropie relative

<sup>1</sup>JCP (2001), SIAM JSC (2006), SIAM JNA (2005), AMS Math. Comp. (2008)

# L'équation de Boltzmann pour les gaz granulaires

L'équation de Boltzmann pour les gaz granulaires décrit le comportement d'un gaz de particules fortement dilué lorsque l'on ne tient compte que des collisions binaires **inélastiques**.



## Applications

dissémination de pollen, avalanches, anneaux planétaires<sup>a</sup>, ...

---

<sup>a</sup>Kawai, Shida, *J. Phys. Soc. Japan* (1990)

## L'opérateur de collisions

$$\mathcal{Q}_e(f)(v) = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{S}^{d-1}} \left[ \frac{f('v) f('v_*)}{e^2} - f(v) f(v_*) \right] B d\sigma dv_*,$$

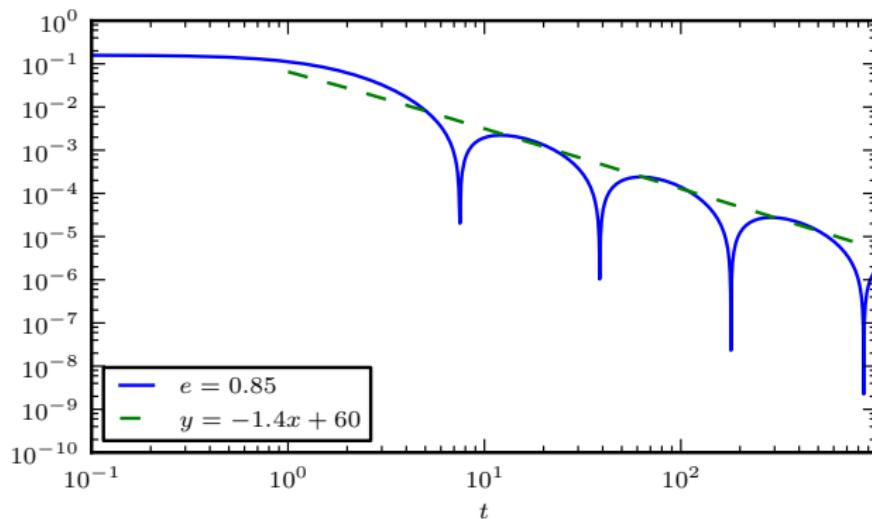
où  $B$  est le **noyau de collision**,  $e \in [0, 1]$  le **coefficient de restitution**, et  $('v, 'v_*)$  sont les vitesses pré-collisionnelles de deux particules dont les vitesses post-collisionnelles sont  $(v, v_*)$ .

# Retour à l'équilibre (Gaz Granulaire)

Evolution de la densité  $\|\rho_f(t) - 1\|_{L^1}$  (conditions aux limites spéculaires)<sup>2</sup>

$$f_0(x, v) = \mathcal{M}_{\rho_0(x), 0, 1}(v), \quad \forall (x, v) \in [0, L] \times \mathbb{R},$$

avec  $\rho_0(x) = 1 + 0.1 \cos(\pi x)$ ,  $L = 1$  et  $\varepsilon = 1 - e = 0.15$



<sup>2</sup>L. Desvillettes & C. Villani, **Inventiones Mathematicae** (2006)

# Formation de clusters dans un gaz granulaire

Les contours du nombre de Mach local  $M(x) := |\mathbf{u}(x)|/\mathbf{C}_s(x)$  où  $C_s$  est la vitesse du son locale.

# Bactéries balladeuses

Considérons une équation de “bouger / tourner”

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f = \int_V T(\mathbf{v}, \mathbf{v}') f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}') d\mathbf{v}' - \int_V T(\mathbf{v}', \mathbf{v}) f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}', \quad (2)$$

avec  $T(\mathbf{v}, \mathbf{v}') = \lambda(\mathbf{v}')$  et

$$\begin{aligned} \lambda(\mathbf{v}') &= \frac{1}{2} (\lambda_N(\mathbf{v}') + \lambda_S(\mathbf{v}')) \\ &= \frac{1}{2} \left( \psi_N \left( \frac{D \log N}{Dt} \Big|_{\mathbf{v}'} \right) + \psi_S \left( \frac{D \log S}{Dt} \Big|_{\mathbf{v}'} \right) \right) \end{aligned}$$

et

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} - D_S \Delta S = -a S + b \int_V f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, & \mathbf{x} \in \Omega, \\ \frac{\partial N}{\partial t} - D_N \Delta N = -c N \int_V f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) d\mathbf{v}, & \mathbf{x} \in \Omega \end{cases} \quad (3)$$

# Résultat d'une expérience sur *Escherichia Coli*

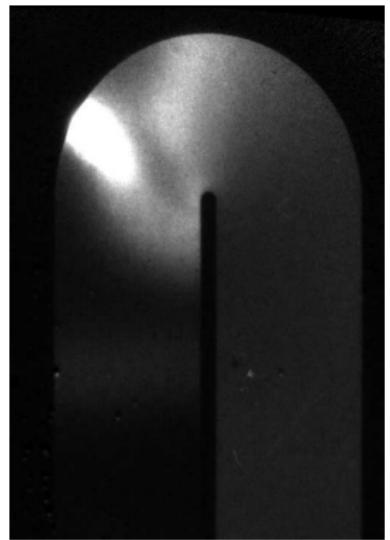
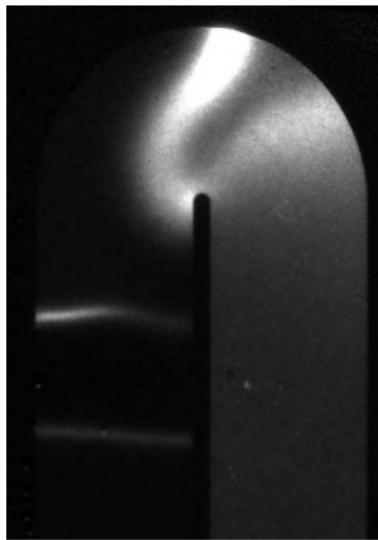
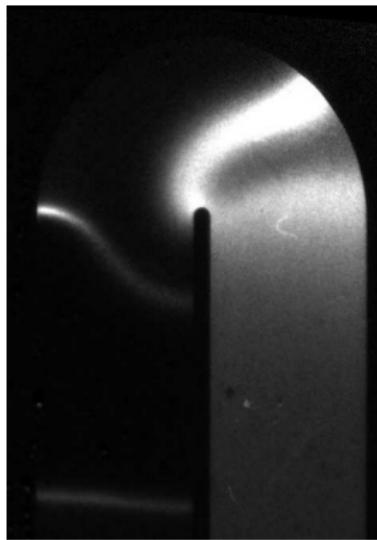


Figure: Évolution temporelle de la densité de bactéries

# Résultat numérique en 2D

Figure: Évolution temporelle de la densité de bactéries