

Un modèle ES-BGK pour des mélanges de gaz

Stéphane Brull^a,

^a *Université Bordeaux 351, cours de la Libération 33405 TALENCE cedex FRANCE*

Reçu le *****; accepté après révision le +++++

Présenté par

Résumé

Dans cette note, nous construisons un modèle de type ES-BGK pour des mélanges inertes qui soit capable de donner un nombre de Prandtl correct correspondant à celui obtenu à partir de l'équation de Boltzmann. Le principe de construction est basé sur un principe de minimisation de l'entropie sous contraintes, en introduisant une relaxation de certains moments non conservés. On obtient ainsi un modèle BGK capable de restituer un bon nombre de Prandtl dans certaines situations. De plus le modèle construit vérifie les propriétés classiques satisfaites par l'opérateur de Boltzmann pour les mélanges de gaz inertes.

Pour citer cet article : A. Nom1, A. Nom2, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 340 (2005).

Abstract

An ES-BGK model for gas mixtures In this note, we derive an ES-BGK model for gas mixtures that is able to give the correct Prandtl number obtained from the true Boltzmann equation. The derivation principle is based on the resolution of an entropy minimisation problem under moments constraints. The set of constraints is constructed by introducing a relaxation of some non conserved moments. The non conserved moments are dissipated according to some relaxation rates. Next, finally the BGK model that is obtained satisfies the classical properties of the Boltzmann operator for inert gas mixtures. *To cite this article: A. Nom1, A. Nom2, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 340 (2005).*

Abridged English version

The aim of this note is to derive an ES-BGK model for gas mixtures. This model has been firstly introduced in [7] in a mono species setting. But the extension to gas mixtures proposed in [7] leads to uncorrect Prandtl numbers. For the present construction we generalize the approach introduced in [4] to gas mixtures. In ([4]) we have proposed a new derivation of the Ellipoidal Statistical model for a mono

Email address: `Stephane.Brull@math.u-bordeaux1.fr` (Stéphane Brull).

Preprint submitted to the Académie des sciences

March 5, 2013

species and monoatomic gas. An extension to polyatomic gases has been performed in ([5]). The goal of the present work is to construct a BGK model of the form $\lambda(\mathbf{G} - \mathbf{f})$ that is based on the correct hydrodynamic limit up to Navier-Stokes. In the expression of the relaxation operator, λ represents a free parameter called relaxation coefficient and is devoted to fit a transport coefficient. Moreover, \mathbf{f} represents the distribution function of the mixture and \mathbf{G} is the relaxation function of the whole mixture. This approach has been used in ([6]) and the authors have derived a BGK model leading to the Fick matrix computed from the Boltzmann equation. More precisely, the methodology that is used is based on the definition of a set of constraints and the resolution of a minimization problem. One important point in the set of constraints is to guarantee that some moments should be conserved and some other moments should be dissipated. The dissipation of the moments is performed according to relaxation rates that are devoted to adjust hydrodynamic coefficients. As a result we obtain an extension of the ES-BGK model for gas mixtures. Moreover the model is proved to satisfy a H-Theorem and the indifferenciability principle. This note summarizes the main line of the strategy and announces a more complete presentation in [3], where the proofs will be given in details.

1. Introduction

Le but de cette note est de construire un modèle ES-BGK pour les mélanges de gaz. Ce modèle a été introduit dans un premier temps dans [7] pour un gaz monoatomique et monoespèce. La motivation de construire un tel modèle est d'obtenir un modèle cinétique de relaxation qui puisse donner un bon nombre de Prandtl à la limite hydrodynamique, car le modèle BGK standard fournit un nombre de Prandtl non physique. Cependant le caractère entropique de ce modèle n'a été établi que bien plus tard dans [2]. Récemment une nouvelle approche de ce modèle a été proposée dans ([4]). Le but est alors de construire un modèle de relaxation capable de fournir les bons coefficients de transport pour le système de Navier-Stokes. L'idée directrice est alors d'introduire des moments conservés mais aussi des moments non conservés qui sont dissipés selon un certain taux. On résout ensuite un problème de minimisation sous contraintes ([10]) et on obtient le modèle ES-BGK pour lequel on propose une nouvelle approche. On généralise ensuite cette approche à des gaz polyatomiques monoespèces ([5]).

La situation des mélanges est beaucoup plus complexes du fait des échanges possibles entre les différentes espèces. Une première manière de concevoir les opérateurs BGK est de construire des opérateurs BGK qui soient capables de restituer les bons taux d'échanges entre les différentes espèces pour les molécules maxwelliennes. Cela revient à construire un opérateur BGK dont chaque composante possède les mêmes moments que l'opérateur de Boltzmann pour les molécules maxwelliennes. Ainsi dans [1], un modèle BGK est construit d'après cette méthodologie. Il possède de plus les propriétés mathématiques fondamentales (positivité de la fonction de distribution, théorème H, ...). L'inconvénient de ce modèle est qu'il restitue des coefficients de transport incorrects à la limite hydrodynamique. Sur la même idée, dans [9] les auteurs proposent un modèle BGK qui coïncide avec les moments de Grad de l'opérateur de Boltzmann linéarisé. Cependant la fonction de relaxation de ce modèle étant un polynôme, la positivité de la fonction de distribution n'est pas garantie. Ainsi, dans [6], nous avons transposé l'approche de ([4], [5]) aux mélanges de gaz. Ainsi nous avons construit un modèle BGK capable de donner la bonne loi de Fick et jouissant des mêmes propriétés fondamentales que l'opérateur de Boltzmann. C'est cette approche qui est employée dans ce travail pour construire un modèle ES-BGK pour les mélanges inertes de gaz. Cette note donne les grandes lignes de la stratégie qui sera développée en détails dans ([3]) pour dériver un tel modèle.

2. Notations

2.1. Fonctions de distribution

Etant donné un gaz à plusieurs composantes, $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_p)$ représentera la fonction de distribution du mélange tandis que f_i décrit l'espèce i . On définit ensuite les quantités hydrodynamiques

$$n^i = \int_{\mathbb{R}^3} f_i dv, \quad \rho^i = m_i n^i, \quad n^i \mathbf{u}^i = \int_{\mathbb{R}^3} v f_i dv, \quad E^i = \frac{1}{2} \rho^i (\mathbf{u}^i)^2 + n^i \mathcal{E}^i, \quad \mathcal{E}^i = \frac{3}{2} k_B T^i = \frac{m_i}{2n^i} \int_{\mathbb{R}^3} (v - \mathbf{u}^i)^2 f_i dv,$$

où m_i représente la masse moléculaire de l'espèce i et k_B représente la constante de Boltzmann. De même, on définit les quantités hydrodynamiques pour le mélange

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

Par ailleurs, étant donné un jeu de paramètres n^i , \mathbf{u} et T on définit les fonctions maxwelliennes d'équilibre comme

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

L'entropie associée à la fonction de distribution \mathbf{f} est définie par

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

2.2. Coefficients de transport

Si on se place dans le cadre de la thermodynamique des processus irréversibles, les flux de masse, d'impulsion et d'énergie s'écrivent de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i &= \sum_{j=1}^{j=p} L_{ij} \nabla \left(\frac{-\mu_j}{T} \right) + L_{i\mathbf{q}} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) \\ \mathbf{J}_{\mathbf{q}} &= \sum_{j=1}^{j=p} L_{\mathbf{q}j} \nabla \left(\frac{-\mu_j}{T} \right) + L_{\mathbf{q}\mathbf{q}} \nabla \left(\frac{1}{T} \right) \\ \mathbb{J}_{\mathbf{u}} &= L_{\mathbf{u}\mathbf{u}} \mathbb{D}(\mathbf{u}), \end{aligned} \quad (2)$$

où $\mathbb{D}(\mathbf{u}) = \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{1}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbb{I}$ représente le tenseur de Reynolds et $-\frac{\mu_i}{T} = k_B \left(\ln(n_i) - \frac{3}{2} \ln\left(\frac{2\pi k_B T}{m_i}\right) \right)$ désigne le potentiel chimique. $(L_{ij})_{(i,j) \in \{1;p\}}$ représente la matrice de Fick, $(L_{iq})_{i \in \{1;p\}}$ les coefficients de Soret, $(L_{qi})_{i \in \{1;p\}}$ les coefficients de Duffour, L_{qq} le flux de chaleur et $L_{\mathbf{u}\mathbf{u}}$ le coefficient de viscosité. Afin de comparer le modèle obtenu avec l'ES-BGK ([2], [4]), on pose $\mu = -L_{\mathbf{u}\mathbf{u}}$.

3. Construction du modèle

3.1. Espace des contraintes

\mathbf{f} étant donné, on recherche \mathbf{G} solution du problème de minimisation d'entropie sous les contraintes

$$\int_{\mathbb{R}^3} g_i dv = \int_{\mathbb{R}^3} f_i dv, \quad \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} m_i g_i v dv = \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} m_i f_i v dv, \quad \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} m_i g_i v^2 dv = \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} m_i f_i v^2 dv, \quad (3)$$

pour assurer les propriétés de conservation du modèle final ainsi que la contrainte de relaxation

$$\sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} \lambda (g_i - f_i) \mathbb{A}_i(v - \mathbf{u}) dv = -\lambda_1 \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} f_i \mathbb{A}_i(v - \mathbf{u}) dv \quad (4)$$

où \mathbb{A} désigne le polynôme de Sonine dont la i^{eme} composante s'écrit $\mathbb{A}_i = m_i (v \otimes v - \frac{1}{3} v^2 Id)$. La contrainte (4) peut alors se réécrire comme une contrainte sur $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_p)$ de la manière suivantes

$$\frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} m_i g_i (v - \mathbf{u}) \otimes (v - \mathbf{u}) dv = (1 - \frac{\lambda_1}{\lambda}) \Theta + \frac{\lambda_1}{\lambda} T, \quad (5)$$

où Θ représente le tenseur de pression défini par

$$\Theta = \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} m_i (v - \mathbf{u}) \otimes (v - \mathbf{u}) f_i dv. \quad (6)$$

On utilise alors le changement de variable suivant : $\nu = 1 - \frac{\lambda_1}{\lambda}$ et on obtient la contrainte sur \mathbf{g}

$$\frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} m_i g_i (v - \mathbf{u}) \otimes (v - \mathbf{u}) dv = \nu \Theta + (1 - \nu) T = \tau. \quad (7)$$

Théorème 3.1 *Pour toute fonction $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_p)$ positive et $\nu \in [-\frac{1}{2}, 1]$, le tenseur τ est symétrique défini positif et le problème de minimisation de l'entropie (1) sous les contraintes (3, 7) possède une unique solution $\mathbf{G} = (G_1, \dots, G_p)$ donnée par*

$$G_i = \frac{\rho_i}{\sqrt{2\pi\tau}} \exp\left(-\frac{1}{2}\langle v - \mathbf{u}, \tau^{-1}(v - \mathbf{u}) \rangle\right). \quad (8)$$

Réciproquement, si le problème de minimisation de l'entropie (1) sous les contraintes (3, 7) admet une unique solution pour toute fonction positive $\mathbf{f} \in L^2_1$, alors $\nu \in [-\frac{1}{2}, 1]$.

On montre que l'ensemble des contraintes est non vide car \mathbf{G} défini par 8 appartient à cet ensemble. Ainsi en suivant l'approche de Junk développée dans ([8]) on montre que le problème de minimisation sous contraintes possède une unique solution. Cette preuve sera développée dans ([3]).

3.2. Calcul des coefficients λ et λ_1

On détermine maintenant les coefficients λ et λ_1 pour que le développement de Chapman-Enskog à l'ordre 1 donne la bonne viscosité et le bon flux de chaleur. Pour cela on considère le système d'équations cinétiques

$$\partial_t f_i + v \cdot \nabla f_i = \frac{\lambda}{\varepsilon} (G_i - f_i), \quad i \in \{1, \dots, p\}, \quad (9)$$

où ε est proportionnel au nombre de Knudsen. On développe alors pour chaque composante i , la fonction de distribution selon $f_i = \mathcal{M}_i + \varepsilon f_i^{(1)} + \dots$. De plus, comme \mathbf{G} dépend de \mathbf{f} , \mathbf{G} se développe autour de la Maxwellienne \mathcal{M} selon $\mathbf{G} = \mathcal{M} + \varepsilon \mathbf{G}^{(1)} + \dots$. En tenant compte de $G_i(\mathcal{M}) = \mathcal{M}_i$, l'expression de $G_i^{(1)}$ est donnée par

$$G_i^{(1)} = DG_i(\mathcal{M}) \cdot f_i^{(1)} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{G_i(\mathcal{M} + \tau \mathbf{f}^{(1)}) - \mathcal{M}_i}{\tau}. \quad (10)$$

Ainsi l'ordre 0 dans (9) entraîne

$$\partial_t \mathcal{M} + v \cdot \nabla \mathcal{M} = \lambda (\mathbf{G}^{(1)} - \mathbf{f}^{(1)}), \quad i \in \{1, \dots, p\}. \quad (11)$$

Or, d'après ([6]), on a la relation

$$(\partial_t + v \cdot \nabla) \mathcal{M} = \left(\sum_{j=1}^p k_B^{-1} (\mathcal{I} - \mathcal{P}_{\mathbb{K}})(C_j) \cdot \nabla \left(-\frac{\mu_j}{k_B T} \right) + \frac{1}{k_B T} \mathbb{A} : \mathbb{D}(\mathbf{u}) + \frac{1}{k_B} \mathbf{B} \cdot \frac{\nabla T}{T^2} \right) \mathcal{M} \quad (12)$$

où la i^{eme} composante du polynôme de Sonine \mathbf{B} s'écrit

$$B_i = (v - \mathbf{u}) \left(\frac{1}{2} m_i (v - \mathbf{u})^2 - \frac{5}{2} k_B T \right).$$

La relation (4) à l'ordre 1 en ε pour $\mathbf{g} = \mathbf{G}$ nous conduit à

$$\sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} \lambda (G_i^{(1)} - f_i^{(1)}) \mathbb{A}_i(v - \mathbf{u}) dv = -\lambda_1 \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} f_i^{(1)} \mathbb{A}_i(v - \mathbf{u}) dv.$$

Par raison d'orthogonalité on obtient alors

$$\sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} f_i^{(1)} \mathbb{A}_i(v - \mathbf{u}) dv = -\frac{1}{k_B T \lambda_1} \sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} \mathbb{A}_i(v - \mathbf{u}) : \mathbb{A}_i(v - \mathbf{u}) \mathcal{M}_i dv \mathbb{D}(\mathbf{u}) = -\frac{n k_B T}{\lambda_1} \mathbb{D}(\mathbf{u}).$$

Ainsi on définit λ_1 comme étant $\lambda_1 = \frac{n k_B T}{\mu}$. On pose alors

$$\lambda = \frac{\lambda_1}{1 - \nu} = \frac{\rho T}{\mu(1 - \nu)}.$$

Ainsi, on définit le modèle de relaxation comme étant $R_i(\mathbf{f}) = \frac{\rho T}{\mu(1 - \nu)} (G_i - f_i)$, $i \in \{1, \dots, p\}$. Afin de déterminer le flux de chaleur, on multiplie (11) par $\mathbf{B}(v - \mathbf{u})$ et on intègre. Or, d'après la relation (10) définissant $\mathbf{G}^{(1)}$, on peut montrer que $\int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{G}^{(1)} \mathbf{B}(v - \mathbf{u}) dv = 0$. On obtient alors

$$\sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} B_i(v - \mathbf{u}) f_i^{(1)} dv = -\frac{1}{3 k_B \lambda} \sum_{i=1}^p \left(\int_{\mathbb{R}^3} B_i(v - \mathbf{u}) \cdot B_i(v - \mathbf{u}) \mathcal{M}_i dv \right) \frac{\nabla T}{T^2} \cdot \mathbf{u}.$$

Un calcul direct nous donne

$$\sum_{i=1}^p \int_{\mathbb{R}^3} B_i(v - \mathbf{u}) \cdot B_i(v - \mathbf{u}) \mathcal{M}_i dv = \frac{15}{2} k_B^3 T^3 \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{m_i}.$$

Cela entraîne que $L_{\mathbf{q}\mathbf{q}} = \frac{5}{2\lambda} k_B^2 T^3 \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{m_i}$. Afin de comparer le modèle obtenu avec le modèle monoespèce construit dans ([4]), on pose $\kappa = \frac{L_{\mathbf{q}\mathbf{q}}}{T^2}$. Le nombre de Prandtl s'écrit alors

$$Pr = \frac{5}{2} \frac{R\mu}{\kappa} = R \frac{\lambda}{\lambda_1} \frac{n}{k_B \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{m_i}} = \frac{R}{1-\nu} \frac{n}{k_B \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{m_i}} = \frac{1}{1-\nu} \frac{1}{\sum_{i=1}^p \frac{n_i}{n} \frac{m}{m_i}}, \quad \text{où } m = \sum_{i=1}^p \frac{n_i}{n} m_i, \quad R = \frac{k_B}{m}. \quad (13)$$

En situation d'indifférentiabilité ($\forall i \in \{1; p\}, m_i = m$), on obtient $Pr = \frac{1}{1-\nu}$ et $Pr = \frac{2}{3}$ est obtenu pour $\nu = -\frac{1}{2}$. De plus, la fonction de distribution $f = \sum_{i=1}^p f_i$ est solution de l'ES-BGK pour un gaz monoespèce ([2], [4]). Le modèle ainsi construit vérifie bien le principe d'indifférentiabilité.

4. Théorème H

Dans cette section on montre que notre modèle BGK vérifie une propriété de dissipation d'entropie pour $-\frac{1}{2} \leq \nu < 1$.

Théorème 4.1 *Pour $-\frac{1}{2} \leq \nu < 1$ et \mathbf{G} défini par (8), on a la propriété de dissipation suivante*

$$D(\mathbf{f}) = \sum_{i=1}^p (G_i - f_i) \ln(f_i) dv \leq 0.$$

De plus, $D(\mathbf{f}) < 0$ pour $-\frac{1}{2} \leq \nu < 1$ avec égalité ssi $f_i = \mathcal{M}_i, i = \{1, \dots, p\}$.

Références

- [1] P. Andries, K. Aoki, B. Perthame *A consistent BGK-type model for gas mixtures*. J. Stat. Phys., 106, No 5/6, (2002), 993-1018.
- [2] P. Andries, P. LeTallec, J.P. Perlat, B. Perthame *Entropy condition for the ES BGK model of Boltzmann equation for mono and polyatomic gases*. Eur. J. Mech. (B fluids) 19, (2000), 813-830.
- [3] S.Brull *An ES-BGK model for gas mixtures*, en préparation.
- [4] S. Brull, J. Schneider *A new approach of the Ellipsoidal Statistical Model*. Cont.Mech.Thermodyn. 20 (2008), no.2, 63-74.
- [5] S. Brull, J. Schneider *On the Ellipsoidal Statistical Model for polyatomic gases*. Cont.Mech.Thermodyn. 20 (2009), no.8, 489-508.
- [6] S. Brull, V. Pavan, J. Schneider *Derivation of BGK models for mixtures*. Eur.J.Mech. (B-Fluids), 33, (2012), 74-86.
- [7] L.H. Holway *New statistical models for kinetic theory : methods of construction*, Phys. Fluids 9, (1966), 1958-1673.
- [8] Junk, M. *Maximum entropy for reduced moment problems*. Math. Mod.Meth.Appl.Sci. 10 (2000), no.7, 1001-1025.
- [9] S.Kosuge *Model Boltzmann equation for gas mixtures : Construction and numerical comparison*, Eur.J.Mech B/Fluids, (2009), 170-184.
- [10] D.Levermore *Moment closure hierarchies for kinetic theories*. Journ.Stat.Phys. 83 (1996), no.5-6, 1021-1065.