Outils, modélisation et simulation en calcul numérique – Série 7

3 mai 2005

Exercice 1.
La macrodynamique du modèle FHP.
Soit le modèle FHP dont les règles microscopiques ont été définies au cours. Soit $N_i(\mathbf{r}, t)$ la probabilité d'avoir une particule entrant au site $\mathbf{r}$ au temps t, avec vitesse $\mathbf{v}_i = \lambda \mathbf{c}_i / \tau$, où λ est la distance entre deux cellules voisines, τ est le pas de temps, et $\mathbf{c}_i$ est un vecteur unitaire dans la direction i. Soit $N_i^{(0)}$ la solution correspondante décrivant l'équilibre local. Nous savons que

$$N_i^{(0)} = \rho \left[\frac{1}{6} + \frac{1}{3} c_i \cdot \mathbf{w} - \frac{1}{2} G(\rho) w^2 + G(\rho) c_{i\alpha} c_{i\beta} w_\alpha w_\beta \right],$$

où $\mathbf{w} = \mathbf{u}/v$, $\widehat{\mathbf{w}} = \mathbf{w}/w$, $w = |\mathbf{w}|$, $G(\rho) = 2(3-\rho)/[3(6-\rho)]$. Nous avons adopté la convention de Einstein de sommation sur les indices répétés. On désire montrer que cette relation est compatible avec les définitions de la densité de particules ρ et de la vitesse moyenne $\mathbf{u}$. Pour ceci, montrer que

i)
$$\sum_{i=1}^{6} v_{i\alpha} = 0,$$

ii)
$$\sum_{i=1}^{6} v_{i\alpha} v_{i\beta} = 3v^2 \delta_{\alpha\beta},$$

iii)
$$\sum_{i=1}^{6} v_{i\alpha} v_{i\beta} v_{i\gamma} = 0,$$

iv)
$$\sum_{i=1}^{6} N_i^{(0)} = \rho,$$

v)
$$\sum_{i=1}^{6} N_i^{(0)} \mathbf{v}_i = \rho \mathbf{u}.$$

Exercice 2.
Le chaos moléculaire dans le modèle HPP.
Implémenter numériquement la dynamique HPP avec conditions aux bords périodiques. Montrer en particulier que la dynamique est telle que l'hypothèse du chaos moléculaire est vérifiée, c'est-à-dire que $\langle n_i n_j \rangle - \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle \to 0$ pour $t \to \infty$.
Indication : pour éliminer des lois de conservation indésirables, considérer un gaz dans une enceinte avec parois solides.