Un schéma volumes finis pour les équations de Navier-Stokes quantique

Robin Colombier, encadré par Caterina Calgaro et Emmanuel Creusé
Congré d'Analyse NUMérique (CANUM)

29 mai 2024

Table de matières

1. Introduction
2. Adaptation du système
3. Applications numériques
4. Conclusion

Table des matières

1 Introduction

2 Adaptation du système

3 Applications numériques

4 Conclusion

Sur le tore $\Omega = \mathbb{T}^d, \quad d = 1, 2, 3$

Equations de Navier-Stokes quantique

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p(\rho)\mathbb{I}) = 2\nu \nabla \cdot (\rho D(\mathbf{u})) + 2\epsilon^2 \rho \nabla \frac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} - r\rho\mathbf{u} \\ \rho(0,x) = \rho_0(x), \quad \mathbf{u}(0,x) = \mathbf{u}_0(x), \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad x \in \Omega \end{cases}$$

Paramètres

- $p(\rho) = \rho^\gamma$ la pression
- γ coefficient adiabatique ($\gamma > 1$)
- ϵ la constante de Planck
- ν la constante de viscosité
- r une constante d'amortissement

Système des équations de Navier-Stokes quantique

Physique des équations

- Passage du microscopique au macroscopique
- **A. Jüngel, 2009, LNP, Transport Equations for Semiconductors**
- Équation de Liouville-Von Neumann
- Transformée de Wigner
- Équation de Wigner-BGK
- Passage à la limite hydrodynamique

Potentiel de Bohm

- Terme d'ordre 3
- $2\rho\nabla\dfrac{\Delta\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = \nabla\cdot(\rho\nabla^2 log(\rho)) = \Delta\nabla\rho - 4\nabla\cdot(\nabla\sqrt{\rho}\otimes\nabla\sqrt{\rho})$
- Difficulté pour la construction de schéma numérique

Table des matières

1 Introduction

2 Adaptation du système

3 Applications numériques

4 Conclusion

Construction du système augmenté

- **Gisclon**, **Lacroix** $-$ **Violet**, **2015**, **JNLA**
- **Bresch**, **Desjardins**, **Zatorska**, **2015**, **JMPA**
- **Bresch**, **Gisclon**, **Lacroix** $-$ **Violet**, **2019**, **ARMA**
- $v = \epsilon \dfrac{\nabla \rho}{\rho}$
- Système augmenté d'ordre 2
- Nouvelle équation comme gradient de la conservation de la masse

Rappel

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p(\rho)\mathbb{I}) = 2\nu \nabla \cdot (\rho D(\mathbf{u})) + 2\epsilon^2 \rho \nabla \dfrac{\Delta \sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} - r\rho \mathbf{u} \end{cases}$$

Système augmenté

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \\ \partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) + \rho^\gamma \mathbb{I}) = \epsilon \nabla \cdot (\rho \nabla \mathbf{v}) + 2\nu \nabla \cdot (\rho D(\mathbf{u})) - r\rho \mathbf{u}, \\ \partial_t (\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{u}) = -\epsilon \nabla \cdot (\rho \nabla^T \mathbf{u}). \end{cases}$$

Égalité de κ-entropie

Équation d'énergie

Égalité d'énergie

$$\int_\Omega \partial_t \Big(\frac{\rho}{2}|\mathbf{u}|^2 + \frac{\rho}{2}|\mathbf{v}|^2 + \frac{\rho^\gamma}{\gamma - 1}\Big) + \int_\Omega \Big(r\rho|\mathbf{u}|^2 + \nu|\sqrt{\rho}\nabla\mathbf{u}|^2\Big) = 0$$

- **Bresch, Giovangigli, Zatorska, 2015, JMPA**
- **Bresch, Gisclon, Lacroix-Violet, Vasseur, 2021, JMFM**
- $\kappa \in]0,1[$

Egalité de κ-entropie

$$\int_\Omega \partial_t \Big(\frac{\rho}{2}(u + \frac{2\kappa\nu}{\epsilon}v)^2 + \frac{\rho}{2}(1 + \frac{4\nu\kappa(1-\kappa)}{\epsilon^2})v^2) + \frac{\rho^\gamma}{\gamma - 1} + 2r\nu\kappa\rho \; ln(\rho)\Big) dx$$
$$+ \int_\Omega \Big(2\kappa\nu\gamma\rho^{\gamma-2}|\partial_x\rho|^2 + 2\nu(1-\kappa)(\sqrt{\rho}\partial_x u)^2 + 2\kappa\nu(\sqrt{\rho}\partial_x v)^2 + r\rho u^2\Big) dx = 0 \qquad (1)$$

Démontrer (1)

Système augmenté

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \rho^\gamma) = \epsilon \partial_x(\rho \partial_x v) + 2\nu \partial_x(\rho \partial_x u) - r\rho u, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho v u) = -\epsilon \partial_x(\rho \partial_x u). \end{cases}$$

- $w = u + \dfrac{2\kappa\nu}{\epsilon} v$
- Système en les variables ρ, w, v
- On note $c = \epsilon - \dfrac{4\kappa\nu^2(1-\kappa)}{\epsilon}$

Réecriture du système en ρ, w, v

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho w) = 2\kappa\nu \partial_{xx}\rho, \\ \partial_t(\rho w) + \partial_x(\rho w^2 + \rho^\gamma + 2r\kappa\nu\rho) \\ \qquad = 2\kappa\nu \partial_x(w \partial_x \rho) + 2\nu(1-\kappa)\partial_x(\rho \partial_x w) + c\partial_x(\rho \partial_x v) - r\rho w + 4r\kappa\nu \partial_x \rho, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho v w) = 2\kappa\nu \partial_{xx}(\rho v) - \epsilon \partial_x(\rho \partial_x w). \end{cases}$$

Système

On obtient le système suivant :

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = M(U)$$

Notations

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho w \\ \rho v \end{pmatrix}, \quad F(U) = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho w^2 + \rho^\gamma + 2r\kappa\nu\rho \\ \rho v w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_2 \\ \dfrac{U_2^2}{U_1} + U_1^\gamma + 2r\kappa\nu U_1 \\ \dfrac{U_2 U_3}{U_1} \end{pmatrix}$$

$$M = \begin{pmatrix} 2\kappa\nu\partial_{xx}^2\rho \\ 2\kappa\nu\partial_x(w\partial_x\rho) + 2\nu(1-\kappa)\partial_x(\rho\partial_x w) + c\partial_x(\rho\partial_x v) - r\rho w + 4r\kappa\nu\partial_x\rho \\ 2\kappa\nu\partial_x(v\partial_x\rho) - \epsilon\partial_x(\rho\partial_x w) + 2\kappa\nu\partial_x(\rho\partial_x v) \end{pmatrix}$$

Ébauche de la démonstration de la κ-entropie

Remarques

- $E_\kappa = \frac{1}{2}\Big(\frac{U_2^2}{U_1} + c\frac{U_3^2}{U_1}\Big) + \frac{U_1^\gamma}{\gamma - 1} + 2r\nu\kappa U_1 ln(U_1)$
- E_κ est convexe
- $G(U) = w(E_\kappa + p(\rho) + 2r\kappa\nu\rho)$
- $\nabla_U G = (\nabla_U F)\nabla_U(E_\kappa)$

Une ébauche de preuve, avec $\kappa \in (0,1)$

$$
\begin{aligned}
&\partial_t U + \partial_x F(U) = M(U) \\
&\Rightarrow \int_\Omega \partial_t U \nabla_U E_\kappa + \partial_x F(U)\nabla_U E_\kappa = \int_\Omega M(U)\nabla_U E_\kappa \\
&\Leftrightarrow \int_\Omega \partial_t E_\kappa + \partial_x G(U) = \int_\Omega M(U)\nabla_U E_\kappa \\
&\Leftrightarrow \int_\Omega \partial_t E_\kappa = -\int_\Omega 2r\kappa\nu\gamma\rho^{\gamma-2}(\partial_x\rho)^2 + 2\nu(1-\kappa)(\sqrt{\rho}\partial_x u)^2 + 2\kappa\nu(\sqrt{\rho}\partial_x v)^2 + r\rho u^2
\end{aligned}
$$

Schéma de splitting

Notations

On suit la démarche proposé par **D. Bresch et al., JCP, 2020**. On note :

$$U_i^n \approx U(t^n, x_i) = \begin{pmatrix} \rho(t^n, x_i) & \rho w(t^n, x_i) & \rho v(t^n, x_i) \end{pmatrix}^\top$$

$$U^n = (U_1^n, \dots, U_N^n)$$

$$E_\kappa(U_i^n) = \frac{1}{2}\rho_i((w_i^n)^2 + (1 + \frac{4\nu^2\kappa(1-\kappa)}{\epsilon^2})(v_i^n)^2) + \frac{1}{\gamma - 1}(\rho_i^n)^\gamma + 2r\nu\kappa\rho_i^n ln(\rho_i^n)$$

$$E_{\kappa,tot}^n = dx \sum_{i=1}^{N} E_\kappa(U_i^n)$$

Schéma de splitting

On utilise un schéma de splitting :

$$\begin{cases} U^{n+\frac{1}{2}} = U^n + dt\ \partial_x F(U^n) & \text{Phase hyperbolique} \\ U^{n+1} = U^{n+\frac{1}{2}} + dt\ M(U^{n+1}) & \text{Phase diffusive} \end{cases}$$

Phase hyperbolique

Étape $\partial_t U + \partial_x F(U) = 0$
Avec $\lambda_{max}(F(U_i)) = |w_i^n| + \sqrt{\gamma(\rho_i^n)^{\gamma-1} + 2r\kappa\nu}, i \in [1, N]$

Phase hyperbolique

L'étape est :

$$U_i^{n+\frac{1}{2}} = U_i^n - \frac{dt}{dx}(F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n)$$

Le flux de Rusanov est :

$$F_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2}(F(U_{i+1}^n) - F(U_i^n)) - \max_{j\in i,i+1}(|w_j^n| + \sqrt{\gamma(\rho_j^n)^{\gamma-1} + 2r\kappa\nu})\frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{2}$$

Qui permet d'avoir :

$$E_{tot}^{n+\frac{1}{2}} \leq E_{tot}^n$$

Phase diffusive

- Étape $U^{n+1} = U^{n+\frac{1}{2}} + dtM(U^{n+1})$
- Discrétisation différences finies
- Schéma Euler implicite en temps

Résolution de ρ^{n+1}

On calcule ρ^{n+1} en premier

$$\partial_t \rho = 2\kappa\nu\partial^2_{xx}\rho,$$

$$(\mathbb{I} + 2\kappa\nu\lambda\mathbb{D})\rho^{n+1} = \rho^{n+\frac{1}{2}}$$

avec $\mathbb{D}$ la matrice du Laplacien périodique, $\lambda = \dfrac{dt}{dx^2}$.

Grâce à l'obtention de ρ^{n+1}, le reste du problème devient linéaire

Bloc matriciel

On défini la matrice suivante :

$$\mathbb{C}(\rho) = \begin{pmatrix} \frac{\rho_2+\rho_N}{\rho_1} & -\frac{\rho_1}{\rho_2} & 0 & \dots & & 0 & -\frac{\rho_1}{\rho_N} \\ -\frac{\rho_2}{\rho_1} & \frac{\rho_3+\rho_1}{\rho_2} & -\frac{\rho_2}{\rho_3} & & & & \\ \vdots & & & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & & & -\frac{\rho_{N-1}}{\rho_{N-2}} & \frac{\rho_{N-2}+\rho_N}{\rho_{N-1}} & -\frac{\rho_{N-1}}{\rho_N} \\ -\frac{\rho_N}{\rho_1} & 0 & \dots & & & -\frac{\rho_N}{\rho_{N-1}} & \frac{\rho_{N-1}+\rho_1}{\rho_N} \end{pmatrix}$$

Discrétisation

$$M_{2,3} = \begin{pmatrix} 2\kappa\nu\partial_x(w\partial_x\rho) + 2\nu(1-\kappa)\partial_x(\rho\partial_x w) + c\partial_x(\rho\partial_x v) - r\rho w + 4r\kappa\nu\partial_x\rho \\ -\epsilon\partial_x(\rho\partial_x w) + 2\kappa\nu\partial^2_{xx}(\rho\partial_x v) \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{M}(\rho^{n+1}) = \begin{bmatrix} rdt\mathbb{I} + 2\kappa\nu\lambda(\mathbb{C}(\rho^{n+1}) - \mathbb{D}) + 2(1-\kappa)\nu\lambda(\mathbb{D} + \mathbb{C}(\rho^{n+1})) & \frac{c}{2}\lambda(\mathbb{D} + \mathbb{C}(\rho^{n+1})) \\ -\epsilon\lambda(\mathbb{D} + \mathbb{C}(\rho^{n+1})) & 2\kappa\nu\lambda\mathbb{D} \end{bmatrix}$$

$$S^{n+1} = \left(4r\kappa\nu \left(\frac{\rho_i^{n+1} - \rho_{i-1}^{n+1}}{dx\sqrt{\rho_i^n \hat{\rho}^{n+1}_{i-\frac{1}{2}}}} \right) \right)$$

- On veut être consistant avec $\partial_x\rho = \rho\partial_x(log(\rho))$.
- On discrétise $\rho\left(\frac{\partial_x\rho}{\rho}\right) = \frac{\rho_i^n - \rho_{i-1}^n}{dx\sqrt{\rho_i^n\hat{\rho}^n_{i-\frac{1}{2}}}}$, avec $\hat{\rho}^n_{i-\frac{1}{2}} = \frac{\rho_i - \rho_{i-1}}{ln(\rho_i) - ln(\rho_{i-1})}$

Résolution

$$U_{2,3}^{n+1} = U_{2,3}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbb{M}(\rho^{n+1})U_{2,3}^{n+1} + S^{n+1}$$

Décroissance de l'énergie en phase parabolique

Rappel : Égalité de κ-entropie

$$\int_\Omega \partial_t \left(\frac{\rho}{2}(u + \frac{2\kappa\nu}{\epsilon} v)^2 + \frac{\rho}{2}\epsilon c v^2 + \frac{\rho^\gamma}{\gamma - 1} + 2r\nu\kappa\rho ln(\rho) \right) dx$$
$$+ \int_\Omega \left(2\kappa\nu\gamma\rho^{\gamma-2}(\partial_x \rho)^2 + 2\nu(1-\kappa)(\sqrt{\rho}\nabla u)^2 + 2\kappa\nu(\sqrt{\rho}\nabla v)^2 + r\rho u^2 \right) dx = 0$$

Équivalent discret

$$E_{tot}^{n+1} \leq E_{tot}^n - \frac{dt}{dx}\Bigg(2\kappa\nu\gamma \sum_i (\tilde{\rho}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^{\gamma-2}(\rho_i^{n+1} - \rho_{i-1}^{n+1})^2 + 2\kappa\nu \sum_i \rho_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}(v_i^{n+1} - v_{i-1}^{n+1})^2$$
$$+ 2\nu(1-\kappa)\sum_i \rho_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}(w_i^{n+1} - \frac{2\kappa\nu}{\epsilon}v_i^{n+1} - (w_{i-1}^{n+1} - \frac{2\kappa\nu}{\epsilon}v_{i-1}^{n+1}))^2$$
$$+ r\sum_i \rho_i^{n+1}\left\{ dx w_i^{n+1} - 2\kappa\nu \frac{\rho_i^{n+1} - \rho_{i-1}^{n+1}}{\sqrt{\rho_i^{n+1}\hat{\rho}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}}} \right\}^2 \Bigg)$$

Table des matières

1 Introduction

2 Adaptation du système

3 Applications numériques

4 Conclusion

Solution d'Euler quantique

Solution à partir de l'équation de Schrödinger

- Équation de Schrödinger non linéaire $i\epsilon\partial_t\Psi + \frac{\epsilon^2}{2}\partial^2_{xx}\Psi - f(|\Psi|^2)\Psi = 0$.
- Transformée de Madelung, **E. Madelung, Zeit. f. Phys. 1927**
- Équation d'Euler quantique :

$$\begin{cases} \partial_t\rho + \partial_x(\rho u) = 0 \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2) + \partial_x(\frac{\rho^2}{2}) - \frac{1}{2}\rho\partial_x\frac{\partial^2_{xx}\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = 0 \end{cases}$$

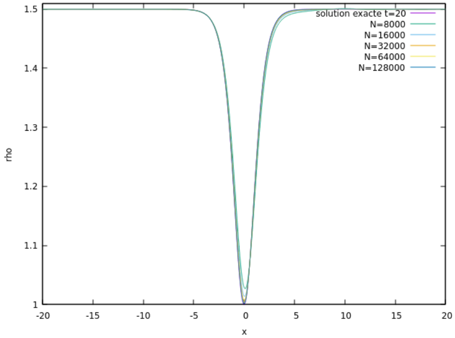
- correspond à une équation de transport avec $\epsilon = \frac{1}{2}, \nu = 0, r = 0, p(\rho) = \frac{\rho^2}{2}$

Soliton 'gris' 1d

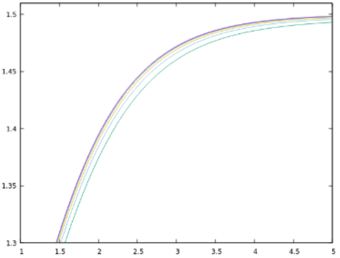
- Simulations numériques tirées de **F. Dhaouadi et al., SIAM, 2019**
- $\rho(t,x) = b1 - \frac{b1 - b3}{cosh(\sqrt{b1-b3}(x-Ut))^2}$, $\quad b1, b3, U \in \mathbb{R}^+$, ici $b1 = 1.5, b3 = 1, U = 2$

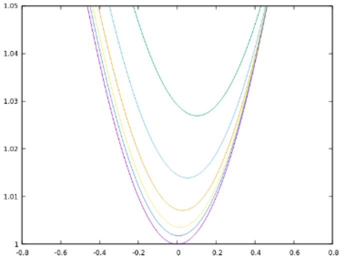
  $u(t,x) = U - \frac{b1\sqrt{b3}}{\rho(t,x)}$

Résultats numériques



(a) simulation pour le soliton sur une période





Avec $\quad Err = \sqrt{\sum (dx(x_{num} - x_{exacte}))^2}$

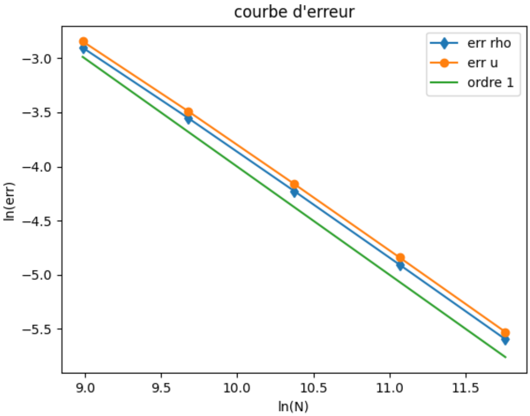


Figure – Courbe de convergence pour des maillages de 8000 à 128000 mailles

Autre cas numérique

Problème de Riemann dispersif

- Problème sans solution analytique
- Conditions initiales :

$$\text{En notant} \quad \rho_M = \frac{\rho_L + \rho_R}{2}, \quad u_M = \frac{u_L + u_R}{2}$$

$$\rho_0(x) = \rho_M - \frac{\rho_L - \rho_R}{2} tanh(\frac{x}{\delta})$$

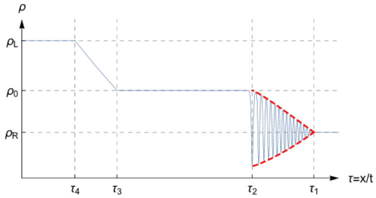
$$u_0(x) = u_M - \frac{u_L - u_R}{2} tanh(\frac{x}{\delta})$$

- 4 valeurs caractéristiques définissent différents régimes :

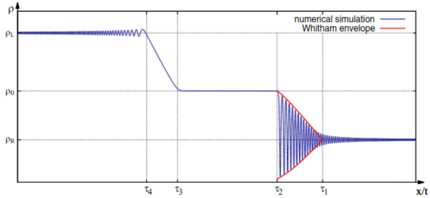
$$\tau_1 = u_R + \frac{8\rho_M - 8\sqrt{\rho_M \rho_R} + \rho_R}{2\sqrt{\rho_M} - \sqrt{\rho_R}}, \quad \tau_2 = u_R + \sqrt{\rho_M},$$

$$\tau_3 = u_M - \sqrt{\rho_M}, \quad \tau_4 = u_L - \sqrt{\rho_L}$$

- Conditions limites de Dirichlet



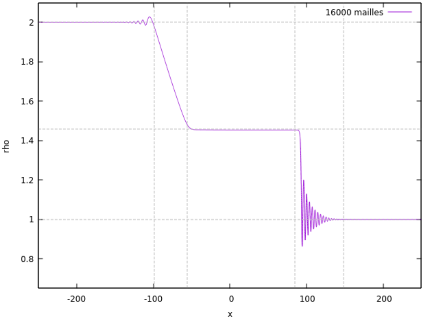
(a) Résultat numérique attendu



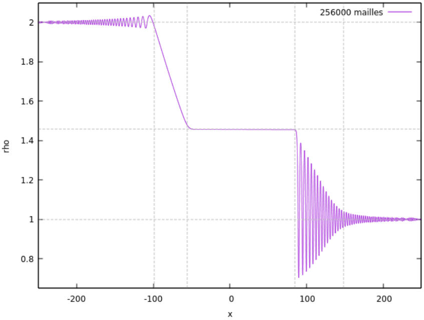
(b) Résultat numérique obtenu par F. Dhaouadi et al.

Figure – $\rho(x)$ pour $\rho_L = 2, \rho_R = 1, u_L = u_R = 0, \delta = 0.2$ à $t = 70$

Résultats numériques pour ρ

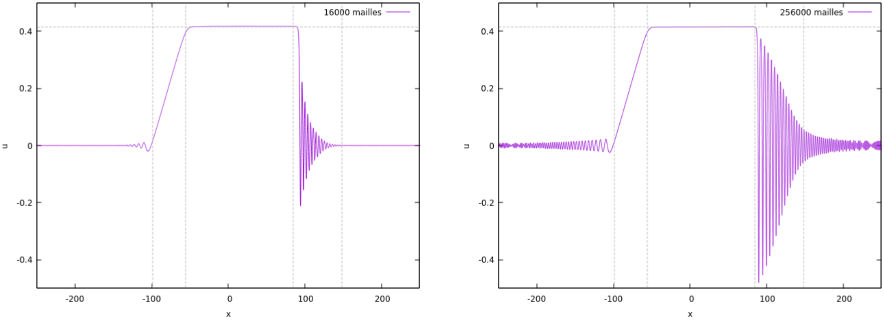


(a) Simulation 16000 mailles



(b) Simulation 256000 mailles

Figure – $\rho(x)$ pour $\rho_L = 2$, $\rho_R = 1$, $u_L = u_R = 0$, à $t = 70$



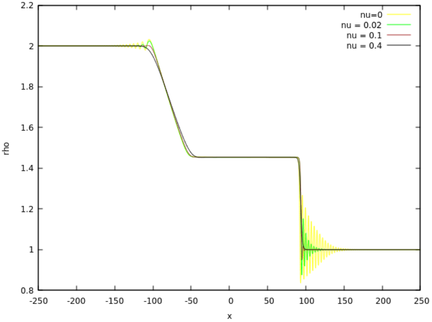
(a) Simulation 16000 mailles

(b) Simulation 256000 mailles

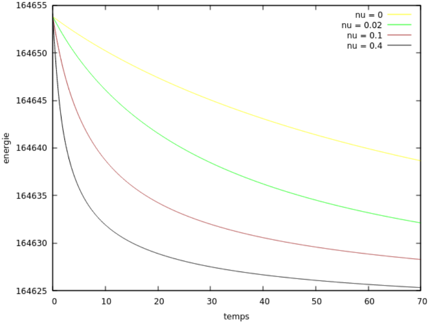
Figure – $u(x)$ pour $\rho_L = 2$, $\rho_R = 1$, $u_L = u_R = 0$, à $t = 70$

Ajout de la viscosité

On considère désormais ce qu'il se passe avec de la viscosité :



(a) Simulation pour différentes viscosités



(b) Décroissance de l'énergie pour différentes viscosités

Figure – Problème de Riemann dispersif avec viscosité pour 32000 mailles

Table des matières

1 Introduction

2 Adaptation du système

3 Applications numériques

4 Conclusion

Conclusion

Travail fait

- Adaptation des équations en les variables ρ, w, v
- Nouvelle méthode de démonstration de l'inégalité de κ-entropie
- Construction d'un schéma numérique qui respecte cette inégalité

Perspéctives possibles

- Extension du schéma à la 2d
- Obtenir un résultat sur la vitesse de décroissance de l'énergie

Résolution

On résout :

$$U_{2,3}^{n+1} = U_{2,3}^{n+\frac{1}{2}} - M(\rho^{n+1})U_{2,3}^{n+1} + S^{n+1}$$

On conjecture que la matrice est inversible

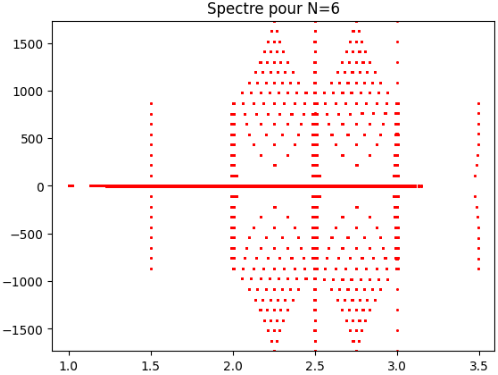


Figure – Valeur propre dans $\mathbb{C}$ pour différentes valeurs de ρ, $\kappa = \frac{1}{2}$

Pour comprendre le sens physique du système des équations de Navier-Stokes quantique, on va effectuer un passage à l'échelle macroscopique en partant de l'échelle microscopique. On s'aide pour cela des travaux A.Jüngel [**Jngel2012QuantumNE**, **book:Jungel**].
Sur le livre de A. Jüngel, Springer, 2009, *Transport Equations for Semiconductors*
C'est l'équation de Liouville-Von Neumann qui permet de donner l'état quantique d'un système de particules.

Equation de Liouville-Von Neumann

$$i\hbar\partial_t \rho_{op}(t,x,y) = (H_x - H_y)\rho_{op}, \quad (t,x,y) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M, \tag{2}$$

avec $H_\mathbf{z} = \dfrac{-\hbar^2}{2m}\Delta_\mathbf{z} - qV(\mathbf{z})$, où $\hbar$ est la constante de Planck réduite, q la charge d'un électron et V un potentiel électrique.
On peut faire le lien entre ρ_{op} et la densité ρ tel que :

$$\rho(t,\mathbf{x}) = 2\rho_{op}(t,\mathbf{x},\mathbf{x}),$$

Échelle mésoscopique

Besoin d'une équation cinétique

Transformée de Wiger

Soit $g : \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M \to \mathbb{C}$, on défini la transformée de Wigner de g par :

$$W(g)(t,x,p) = \int_{\mathbb{R}^M} g\left(t, x + \frac{y}{2}, x - \frac{y}{2}\right) e^{-\frac{iy\cdot p}{\epsilon}} dy. \tag{3}$$

On appelle son inverse la quantité de Weil, noté W^{-1}.

Équation de Wiger

Si on défini $w(t,x,p) = W(\rho_{op})(t,x,p)$, alors w est solution de l'équation :

$$\partial_t w + \frac{1}{m} p \cdot \nabla_x w + q\theta[V]w = 0, \quad (t,x,p) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M, \tag{4}$$

avec

$$\theta[V]w(t,x,p) = \frac{1}{(2\pi\epsilon)^M} \int_{\mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^M} \frac{i}{\epsilon} \delta V(t,x,y) w(t,x,p') e^{\frac{iy\cdot(p-p')}{\hbar}} dp' dy.$$

Et $\delta V(t,x,y) = V(t, x + \frac{1}{2}y) - V(t, x - \frac{1}{2}y)$.

Équation cinétique

Sous certaines hypothèses notamment de symétrie dans les interactions entre particules, on peut simplifier le terme de potentiel $\theta[V]$. Il faut de plus prendre en compte les collisions entre particules, pour cela, on considère une relaxe à l'équilibre, c'est le modèle de Wigner-BGK, dont l'équation adimensionnée est :

Équation de Wigner-BGK

$$\partial_t w + p \cdot \nabla_x w + q\theta[V_{eff}]w = \frac{1}{\nu}(M_{eq}[w] - w), \quad (t, x, p) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \tag{5}$$

avec

$$V_{eff}(t,x) = V_{ext}(t,x) + \int_{\mathbb{R}} \rho(t,s)V_0(x,s)ds,$$

$$M_{eq}[w] = Exp((A(t,x) - \frac{|p(t,x) - u(t,x)|^2}{2(t,x)})), \text{avec} \quad Exp(f) = W(e^{W^{-1}(f)}).$$

Où V_0 représente les interactions entre les particules à l'état initiale, et M_{eq} est une maxwelienne qui représente l'état à l'équilibre de w.

Passage à l'échelle macroscopique

Conservation des moments

Selon le choix de la maxwelienne, les moments de w peuvent représenter des quantités physiques :

$$\begin{cases} \rho(t,x) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}} w(t,x,s)ds, \text{ la densité de particules,} \\ \rho u(t,x) = \displaystyle\int_{\mathbb{R}} sw(t,x,s)ds, \text{ la densité de courant,} \end{cases} \tag{6}$$

Passage à la limite hydrodynamique

ϵ est le nombre de Knudsen, il fait le lien entre les échelles mésoscopique et macroscopique. En effectuant le développement autour de l'équilibre en posant $w = M_{eq}[w] + \nu g$, et en passant à la limite $\nu \to 0$, les moments de w deviennent solutions, à $O(\nu)$ près, des équations de Navier-Stokes quantique :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2) + \partial_x p(\rho) - 2\epsilon^2 \rho \partial_x \dfrac{\partial^2_{xx}\sqrt{\rho}}{\sqrt{\rho}} = 2\nu \partial_x(\rho \partial_x u), \end{cases} \tag{7}$$

avec α la constante de Planck réduite adimensionnée, sous l'hypothèse que $\epsilon^2 = O(\nu)$.