

Diss. ETH No. 19875

# **Multi-Scale Approximation Models for the Boltzmann Equation**

A dissertation submitted to  
ETH Zürich

for the degree of  
Doctor of Sciences

presented by

**PETER KAUF**

Dipl. Math. ETH

born December 27, 1981

from Felben-Wellhausen, Thurgau  
Switzerland

Accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Manuel Torrilhon, ETH Zürich, RWTH Aachen University, examiner

Prof. Dr. Rolf Jeltsch, ETH Zürich, co-examiner

August 2011

# Abstract

We are developing mathematical and computational approximation models to the Boltzmann Equation, exploiting its behaviour on multiple physical scales.

We will first give a concise overview of the appearing challenges.

In a second introductory part we will describe physics on various scales inside and around the Boltzmann equation. We will see how a molecular dynamics approach can be coarsened into a statistical description and how the Boltzmann distribution function relates to the macroscopic balance laws of continuum physics.

The third part consists of a mathematical analysis for kinetic models with linear collision operators. There, we will present the two main classical strategies of simplifying the Boltzmann equation, the asymptotic expansion in Knudsen number of Chapman Enskog and Grad's Hermite function approximation. Out of these two classical approaches we will construct a new, 'scale induced' method, based on the ideas in [49]. This method combines the physical accuracy in terms of Knudsen numbers as well as the convenient mathematical properties of Grad. The new strategy is tested numerically in the framework of a 16 discrete velocities model and, together with its mathematically proven convergence and stability properties, exhibits significant advantages to other methods. We will outline how this promising method can be applied also outside the framework of kinetic theory.

In the fourth part, we are developing a computationally motivated approximation to the Boltzmann equation. We will consider the BGK model for the collision term and derive a Galilei-invariant, temperature scaled weak formulation. The transformed Boltzmann distribution is non-linearly approximated by an equilibrium Maxwellian, disbalanced by a general series of perturbation functions. In order to ensure conservation of mass, momentum and energy, a major concern in schemes for the Boltzmann equation, we couple our formulation to the balance laws of continuum physics. Micro- / macro compatibility will be ensured either directly through the perturbation functions or through conditions on their series. The resulting equations evidence a considerable numerical challenge. In the Knudsen number regime of our interest, we will leverage physical diffusion to keep this challenge solvable. Our numerical scheme will be tested on a toy model (Grad's equations for 5 moments in one space and one velocity dimension), before we apply it to a full kinetic shocktube problem. The results for the full kinetic case look promising and will motivate future research for higher dimensional cases that are very interesting for applications.

# Zusammenfassung

Wir entwickeln mathematische und numerische Modelle zur Näherung der Boltzmann Gleichung auf verschiedenen physikalischen Skalen. Zuerst besprechen wir in einem Übersichtsteil die dabei auftretenden Schwierigkeiten und Herausforderungen.

In einem zweiten Teil beschreiben wir die physikalischen Prozesse auf verschiedenen Skalen um die Boltzmann Gleichung. Wir werden einen molekular dynamischen Ansatz grobkörniger machen und zu einer statistisch physikalischen Beschreibung transformieren. Aus dieser statistischen Beschreibung können wiederum die makroskopischen Bilanzgleichungen der Kontinuumsphysik hergeleitet werden.

Der dritte Teil der vorliegenden Arbeit ist eine mathematische Abhandlung über kinetische Modelle mit linearen Kollisionsoperatoren. Dabei werden wir die beiden klassischen Strategien untersuchen, um die Boltzmann Gleichung zu vereinfachen: Chapman-Enskog Entwicklung in der Knudsenzahl und den Hermite Funktionen Ansatz von Grad. Mit Hilfe dieser klassischen Methoden werden wir eine neue 'skaleninduzierte' Strategie entwickeln, fussend auf den Ideen in [49]. Diese Strategie kombiniert physikalische Genauigkeit im Mass der Knudsenzahl sowie die günstigen mathematischen Eigenschaften des Ansatzes von Grad. Wir testen diese neue Strategie numerisch im Rahmen eines diskreten Modells mit 16 Geschwindigkeiten. Zusätzlich zu den mathematisch beweisbaren Konvergenz- und Stabilitätseigenschaften zeigen sich dabei signifikant bessere Resultate als mit den klassischen Ansätzen von Chapman-Enskog und Grad. Wir werden skizzieren, wie diese vielversprechende Strategie auch ausserhalb der kinetischen Theorie angewendet werden kann.

Im vierten Teil entwickeln wir eine numerisch-physikalisch motivierte Näherung an die Boltzmann Gleichung. Wir werden das BGK Model für den Kollisionsterm verwenden und damit eine Galilei-invariante, temperaturskalierte schwache Formulierung der Boltzmann Gleichung herleiten. Die invariante Boltzmann Verteilung nähern wir nicht-linear mit Hilfe einer Gleichgewichts-Maxwell Verteilung, erweitert durch eine Störungsreihe. Um dabei Massen-, Impuls- und Energieerhaltung zu gewährleisten, was bei herkömmlichen numerischen Methoden für die Boltzmann Gleichung ein Problem darstellt, koppeln wir unsere schwache, invariante Formulierung an die Bilanzgleichungen der Kontinuumsphysik. Dies geschieht mit Hilfe des Wärmeflusses. Die Kompatibilität von mikroskopischen und makroskopischen Grössen werden wir entweder direkt mit der Wahl der entsprechenden Störungsfunktionen oder mit Bedingungen an die gesamte Störungsreihe sicherstellen. Die so entstehenden Gleichungen stellen eine numerische Herausforderung dar. In den Grössenordnungen der Knudsenzahl, die für uns interessant sind, wird physikalische Diffusion stark zur numerischen Lösbarkeit beitragen. Wir werden einen numerischen Lösungsalgorithmus an einem Spielzeugmodell testen (Gradgleichungen für 5 Momente in einer Raum- und Geschwindigkeitsdimension), bevor wir diesen auf das voll-kinetisches Schockwellenproblem anwenden. Die Resultate im voll-kinetischen Fall sehen vielversprechend aus und motivieren weitere Forschungsprojekte für höher dimensionale Fälle, die für die Praxis interessant sind.