

Comparaison entre méthodes de simulation de fluides

Michel Jean Joseph Donnet

Invalid Date

Table des matières

1	Introduction	2
I	Méthodologie	3
2	Mécanique des fluides	4
2.1	Variables	4
2.2	Équations d'Euler	4
2.2.1	Équation de continuité	4
2.2.2	Équation de la quantité de mouvement	5
2.2.3	Équation de l'énergie	5
2.3	Équations de Navier-Stokes	5
2.3.1	Équation de continuité	5
2.3.2	Équation de la quantité de mouvement	6
2.3.3	Équation de l'énergie	6
2.4	Équation de Boltzmann	6
2.4.1	Collisions négligées	6
2.4.2	Collisions non négligées	7
3	Méthode SPH	8
3.1	Histoire	8
3.2	Interpolation	8
3.3	Principes de base	9
3.4	Avantages	10
3.5	Désavantages	10
4	Méthode LBM	11
4.1	Histoire	11
4.1.1	Principes de base	11

Chapitre 1

Introduction

La terre est appelée “La planète bleue”. En effet, près de 70% de la surface de la terre est recouverte d’eau, donnant ainsi une couleur bleue à la terre, comme les astronautes ont pu constater lors de la mission Apollo de 1972. De plus, la terre possède l’eau dans tous ses états: solide, liquide et gazeux.

L’eau est quelque chose qui a beaucoup intéressé les scientifiques de toutes les époques. Nous pouvons notamment citer parmi eux le légendaire Archimède qui, au cours du 3ème siècle avant Jésus-Christ, utilisa le principe de la poussée d’Archimède afin de déterminer si une couronne était en or selon la légende.

Puis entre le 17ème et le 18ème siècle s’est démarqué le tristement célèbre Isaac Newton qui a donné la définition d’un fluide newtonien, qui est un fluide dont la viscosité reste constante indépendamment de la force s’exerçant sur celui-ci, donc un fluide ayant un comportement prévisible.

Grâce aux études d’Isaac Newton, le fief coquin Leonhard Euler d’origine bâloise établit au cours du 18ème siècle des équations 2.2 modélisant l’écoulement d’un fluide parfait adiabatique, c’est à dire que la viscosité et les effets de la chaleur ne sont pas pris en compte.

Mais cela ne satisfait pas tous les scientifiques. En effet, au cours du 19ème siècle, frustrés par l’impossibilité de modéliser des fluides visqueux, le mathématicien Henri Navier et le physicien Georges Gabriel Stokes décidèrent d’ajouter la notion de viscosité aux équations d’Euler 2.2, étendant ainsi les équations sur les fluides newtonien. Leur travail fut reconnu et utilisé sous le nom d’équations de Navier-Stokes 2.3. Même de nos jours, personne n’a encore réussi à trouver une forme analytique à ces équations.

Cependant, la technologie a fait de nombreux progrès surtout vers la fin du 20ème siècle avec l’apparition de l’ordinateur, ce qui permit aux scientifiques de tenter de résoudre les équations de Navier-Stokes 2.3 grâce à des approximations et des méthodes numériques. Plusieurs méthodes ont donc été créées, notamment la méthode Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), la méthode Fluid-Implicit Particles (FLIP) et la méthode Lattice Boltzmann Method (LBM). Cependant, quelles sont les différences entre ces méthodes ? Y-a-t-il une méthode plus rapide qu’une autre ? Serait-il possible d’utiliser ces méthodes afin de faire du rendu en temps réel de haute qualité ?

partie I

Méthodologie



Chapitre 2

Mécanique des fluides

Un fluide est composé de nombreuses particules, qui peuvent autant être des atomes que des ions ou encore des molécules, qui sont des atomes liés entre eux par des liaisons fortes ou covalentes. À la différence d'un solide, un fluide est complètement déformable.

Il existe différents types de fluides, notamment:

- les gaz: ce sont des fluides composés de particules isolées mouvant en toute liberté et pouvant entrer en collision.
- les liquides: ce sont des fluides composés de particules liées entre elles par des liaisons faibles, comme les liaisons hydrogène. Les particules ne peuvent donc pas se mouvoir en toute liberté, et lorsqu'une particule bouge, elle exerce une influence sur les autres particules liées à elle.

2.1 Variables

- ρ la masse volumique du fluide. C'est une fonction qui dépend de la position à l'intérieur du volume et du temps t .
- \mathbf{v} le vecteur vitesse du fluide. Il dépend également de la position à l'intérieur du volume et du temps t .
- p la pression du fluide
- F les forces externes s'appliquant sur le fluide (comme la force de gravité)
- E l'énergie totale par unité de masse. On a $E = e + \frac{1}{2}\|\mathbf{V}\|^2$
- e l'énergie interne par unité de masse
- Σ la contrainte de viscosité du fluide
- q le flux de chaleur causé par conduction thermique
- q_R le flux de chaleur causé par rayonnement
- m la masse des particules
- f la fonction de densité de probabilité
- \mathbf{x} la position de la particule

2.2 Équations d'Euler

Les équations d'Euler sont un ensemble d'équations décrivant l'écoulement d'un fluide non visqueux. Il y a 3 équations d'Euler.

2.2.1 Équation de continuité

L'équation de continuité peut être définie comme dans l'équation 2.1.

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla(\rho\mathbf{v}) = 0 \quad (2.1)$$

avec:

- $\frac{\partial}{\partial t}\rho$ nous donne la variation de la masse par unité de volume en fonction du temps
- $\nabla(\rho\mathbf{v})$ est le flux de masse. Il nous indique comment la masse se déplace et se redistribue dans le volume

Dans l'équation 2.1, nous pouvons voir que la variation de la masse doit être égale au flux de masse du fluide. Cela signifie que la masse du fluide suit le principe de conservation de la matière

2.2.2 Équation de la quantité de mouvement

L'équation de la quantité de mouvement est définie dans l'équation 2.2.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}^T) = -\nabla p + \rho \cdot \mathbf{F} \quad (2.2)$$

avec:

- $\rho \cdot \mathbf{F}$ nous donne l'ensemble des forces externes s'appliquant par unité de volume
- $\nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}^T)$ représente le changement de vitesse dû au mouvement du fluide
- $\frac{\partial}{\partial t}(\rho\mathbf{v})$ est la variation temporelle de la quantité de mouvement

Dans l'équation 2.2, il y a d'une part la variation temporelle de la quantité de mouvement plus la répartition de la quantité de mouvement dans le fluide, et de l'autre part la force résultant des variations de la pression plus les autres forces externes. On peut donc reconnaître la 2ème loi de Newton disant que la quantité de mouvement est égal à la somme des forces.

2.2.3 Équation de l'énergie

Soit un liquide adiabatique, c'est à dire pour lequel la chaleur n'est pas prise en compte.

L'équation de l'énergie est alors donnée par l'équation 2.3.

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho E + \nabla \cdot (\rho E\mathbf{v}) = -\nabla \cdot (p\mathbf{v}) + \rho F\mathbf{v} \quad (2.3)$$

avec:

- $\frac{\partial}{\partial t}\rho E$ est la variation temporelle de l'énergie par unité de volume.
- $\nabla \cdot (\rho E\mathbf{v})$ nous donne le flux d'énergie à travers le fluide, donc comment l'énergie est transportée dans le fluide
- $-\nabla \cdot (p\mathbf{v})$ est le travail de la pression sur le fluide
- $\rho F\mathbf{v}$ est le travail des forces extérieures sur le fluide

Dans l'équation 2.3, il y a d'une part la somme entre la variation et le flux d'énergie, et d'autre part la somme du travail des forces s'exerçant sur le fluide. Cela découle du principe de conservation d'énergie: la somme du travail des forces est égale à l'énergie du fluide.

2.3 Équations de Navier-Stokes

Les équations de Navier-Stokes sont basées sur les équations d'Euler 2.2. Elles y ajoutent la notion de viscosité, qui représente les forces de friction interne au fluide. Elles permettent donc de modéliser des fluides réels visqueux à la différence des équations d'Euler 2.2 qui modélisent des fluides parfaits.

Il y a également 3 équations de Navier-Stokes.

2.3.1 Équation de continuité

Celle-ci ne diffère pas de l'équation de continuité d'Euler 2.1. Ceci semble normal, car la masse du fluide, même dans un fluide visqueux, ne peut toujours pas être créée ni détruite, et suit toujours le principe de conservation de la matière.

2.3.2 Équation de la quantité de mouvement

L'équation de la quantité de mouvement de Navier-Stokes 2.4 est basée sur l'équation d'Euler 2.2.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}^T) = -\nabla p + \nabla \Sigma + \rho \cdot \mathbf{F} \quad (2.4)$$

- $\nabla \Sigma$ est la force exercée par la viscosité du fluide

Dans l'équation 2.4, la force exercée par la viscosité a été ajoutée à la somme des forces de l'équation 2.2 d'Euler. Ainsi, l'équation 2.4 suit toujours la 2ème loi de Newton.

2.3.3 Équation de l'énergie

L'équation de l'énergie de Navier-Stokes 2.5 est basée sur l'équation de l'énergie d'Euler 2.3.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho E + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{v}) = -\nabla \cdot (p \mathbf{v}) + \nabla \cdot \Sigma \mathbf{v} + \rho F \mathbf{v} + \nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot \mathbf{q}_R \quad (2.5)$$

- $\nabla \cdot \Sigma \mathbf{v}$ est le travail de la viscosité du fluide
- $\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot \mathbf{q}_R$ est le travail de la chaleur sur le fluide

L'équation de l'énergie de Navier-Stokes 2.5 ajoute à l'équation d'Euler 2.3 le travail de la viscosité et de la chaleur sur le fluide. Ainsi, les fluides non adiabatiques sont également pris en compte par cette équation.

Dans la plupart des cas, l'équation de l'énergie n'est pas prise en compte lors de la simulation de fluides notamment à cause de la complexité du calcul.

2.4 Équation de Boltzmann

Les équations de Boltzmann sont utiles pour décrire le comportement de systèmes composés de particules, tel que les gaz ou les liquides.

Dans les équations de Boltzmann, chaque particule composant le système possède une vitesse et une position qui varient dans le temps en fonction des mouvements de la particule.

La fonction $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$ donne alors la densité de probabilité de trouver une particule à une position \mathbf{x} avec une vitesse \mathbf{v} à un temps t .

L'objectif des équations de Boltzmann est donc de déterminer comment évolue cette fonction de densité de probabilité f au cours du temps.

La fonction de distribution évolue suivant les forces extérieures s'appliquant sur les particules, les collisions entre les particules et la diffusion des particules, qui tend à avoir la même concentration de particules dans tout le système. C'est pourquoi, la variation de la fonction de distribution peut s'écrire comme dans l'équation 2.6.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{force} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{diff} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2.6)$$

2.4.1 Collisions négligées

Supposons qu'il n'y a pas de collisions entre les particules. Cela signifie que les particules n'interagissent pas entre elles, ce qui entraîne aucune modification de la fonction de distribution f . Ainsi, la dérivée totale de f par rapport au temps t est nulle: $\frac{df}{dt} = 0$ car f ne varie pas dans le temps.

Grâce aux règles de chaînage, il est possible de trouver la dérivée totale de f par rapport au temps t , comme montrée dans l'équation 2.7.

$$\begin{aligned}
\frac{df}{dt} &= \left(\frac{dt}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial t} + \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{F}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right) f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t) \\
&= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{F}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Dans l'équation 2.7, le terme $\frac{\partial f}{\partial t}$ montre le changement de f à vitesse et position constante, le terme $\mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f$ représente le changement de f dû aux déplacements des particules, et le terme $\frac{F}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f$ représente le changement de f dû aux forces extérieures, tel que la gravité, s'appliquant sur les particules. Ainsi, les déplacements des particules sont uniquement dûs aux forces extérieures et à la diffusion des particules, ce qui donne en combinant l'équation 2.7 avec le fait que f ne varie pas en fonction du temps l'équation 2.8.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{F}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f = 0 \tag{2.8}$$

2.4.2 Collisions non négligées

Cependant, dans la réalité, des collisions existent entre les particules. Comme les particules interagissent entre elles, la fonction de distribution va subir des modifications en fonction des collisions. C'est pourquoi la dérivée totale de f par rapport à t ne sera plus égal à 0, mais au terme $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ qui capture l'effet des interactions entre les particules, ce qui donne la modification de l'équation 2.8 en l'équation 2.9.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla_{\mathbf{x}} f + \frac{F}{m} \nabla_{\mathbf{v}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \tag{2.9}$$

L'équation 2.9 est appelée équation de Boltzmann. Il ne reste plus qu'à définir le terme de collision $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$, ce qui est une chose complexe qui ne va pas être traitée ici.

Chapitre 3

Méthode SPH

3.1 Histoire

La méthode Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) a été inventée en 1977 par Bob Gingold et Joe Monaghan GINGOLD et MONAGHAN [6] et indépendamment par Leon Lucy LUCY [13] afin de simuler des phénomènes astrophysiques, tel que la formation et l'évolution d'une étoile ou d'une galaxie. Il s'agissait tout d'abord d'une approche probabiliste. Les équations de la mécanique des fluides pouvaient effectivement servir à décrire ce genre de phénomènes astrophysiques car il s'agit de gaz ou d'une multitude de corps évoluant d'une manière similaire à un liquide ou un gaz.

La méthode SPH s'est ensuite développée dans le domaine de la mécanique des fluides où elle a servi notamment à modéliser non seulement des fluides compressibles et incompressibles, mais également des phénomènes thermiques et magnétiques.

Puis vers 1990, la méthode SPH a été étendue à la mécanique des structures afin de simuler par exemple des impacts à forte vitesse ou des déchirures de matériaux grâce notamment au travail de Libersky et Petschek (citation ici).

De nos jours, la méthode SPH est encore utilisée dans la mécanique des fluides, mais également pour simuler des impacts haute vitesse, des fragmentations ou encore des explosions, si bien que le terme Hydrodynamics n'est plus adapté. Cependant, pour des raisons historiques, on conserve le terme Hydrodynamics.

3.2 Interpolation

La méthode SPH utilise une technique d'interpolation afin de déterminer le résultat des équations de Navier-Stokes 2.3.

L'interpolation utilisée dans la méthode SPH est basée sur le principe que la distribution de Dirac $\delta(r)$, appelée par abus de langage fonction Dirac et définie dans l'équation 3.2, peut être considérée comme l'élément neutre de la convolution, comme nous montre l'équation 3.1. Étant une distribution de probabilité, la fonction Dirac respecte la propriété d'une distribution, donc on a la propriété 3.3.

$$\begin{aligned} f * \delta(x) &= \int_y f(y) \delta(y - x) \\ &= f(x) \end{aligned} \tag{3.1}$$

avec:

$$\delta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{3.2}$$

et:

$$\int \delta(x) dx = 1 \quad (3.3)$$

On définit donc une fonction noyau W qui est une approximation de la fonction Dirac et qui respecte les propriétés 3.4 et 3.5.

$$\int_r W(r, h) dr = 1 \quad (3.4)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} W(r, h) = \delta(r) \quad (3.5)$$

L'équation 3.1 devient alors l'équation 3.6.

$$\begin{aligned} f * W(x) &= \int_y f(y) W(y - x) \\ &\approx f(x) \end{aligned} \quad (3.6)$$

3.3 Principes de base

La méthode SPH représente le fluide comme un ensemble de particules interagissant entre elles. Elle simule le comportement de chaque particule, donc il s'agit d'une méthode lagrangienne.

De plus, la méthode SPH est une méthode sans maillage, ce qui signifie en d'autres termes qu'elle ne nécessite pas de maillage fixe. Cela implique que la méthode SPH peut être utilisée avec une taille de domaine adaptative, et est donc particulièrement adaptée pour des problèmes complexes car on ne fera que la quantité de calcul nécessaire. Par exemple, si on pense à simuler un verre d'eau se renversant sur une table, la méthode SPH sera particulièrement adaptée car elle ne calculera que les endroits où le fluide est présent et pas toute la table comme le ferait une méthode avec maillage fixe qui devrait définir un domaine de calcul fixe et s'y tenir.

Elle ne tente pas de résoudre les équations du fluide dans une grille fixe... (reformuler ?)

Comme la méthode SPH est une méthode sans maillage, elle utilise une technique d'interpolation afin de déterminer le résultat des équations aux dérivées partielles.

(à nettoyer !! =

La méthode SPH simule le fluide comme un ensemble de particules. Ces particules possèdent leurs caractéristiques propres tel que leur masse, leur position, leur vitesse. Une particule interagit avec les particules l'avoisinant à travers un noyau de lissage W . Cependant, une particule ne peut pas interagir avec toutes les particules... Par exemple, on ne veut pas qu'une particule à une extrémité du fluide interagisse avec une particule à l'autre extrémité du fluide. Ainsi, une distance h est fixée afin que les particules qui se trouvent à une distance supérieur à h ne possèdent pas d'influence sur la particule. Ainsi, on peut définir une équation 3.7 qui décrit comment une propriété physique A_S à un point donné du fluide est calculée grâce aux propriétés physiques A_i des particules avoisinant le point donné, pondéré par le noyau de lissage W donnant l'influence des particules avoisinantes, comme nous pouvons le voir sur la figure 3.1.

$$A_S(r) = \sum_i m_i \frac{A_i}{\rho_i} W(r - r_i, h) \quad (3.7)$$

avec:

- m_i la masse de la particule i
- A_i une propriété de la particule i
- ρ_i la densité de la particule i
- W le noyau utilisé pour l'interpolation
- h le rayon d'influence du noyau d'interpolation. Ainsi, on a $W = 0$ si $|r - r_i| > h$.

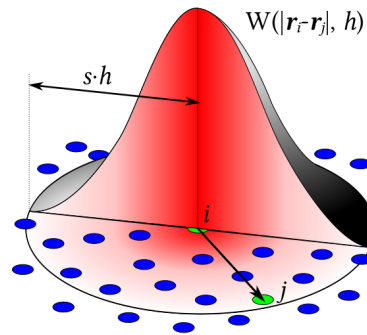


Figure 3.1: créée par JLCERCOS [9]

La méthode SPH donne donc les propriétés physiques d'un point donné par une combinaison des propriétés des particules voisines. Dans notre cas, la méthode SPH résout l'équation de la conservation de la masse 2.1 et l'équation de la conservation de la quantité de mouvement 2.4, mais pas l'équation de la conservation de l'énergie 2.5, car la température n'est pas prise en compte.

Pour plus de précisions, consultez le travail de thèse de Fabien Caleyron CALEYRON [3], mais également le travail de master de Marcus Vesterlund VESTERLUND [17] et le travail de thèse de Alban Vergnaud VERGNAUD [16]. Cette partie a été écrite principalement avec les informations données par VESTERLUND [17] et VERGNAUD [16].

3.4 Avantages

Les principaux avantages de la méthode SPH sont que celle-ci est une méthode

- sans maillage: en effet, cela permet à la méthode SPH de simuler des problèmes avec une dynamique de frontière complexe tel que des fluides à surface libre ou des fluides avec beaucoup de déplacement de frontières. De plus, l'avantage de la méthode sans maillage est sa facilité d'implémentation et surtout de parallélisation. En effet, il est plus facile de séparer le calcul entre plusieurs unités de calcul, car on regarde en chaque point du fluide quels sont ses caractéristiques locales.
- Comme nous l'avons mentionné plus haut, la méthode SPH peut également être utilisée d'une manière plus générale comme pour la simulation d'impact à haute vitesse sur un matériaux ou encore pour la simulation d'explosions ou de fragmentations.
- qui permet une bonne conservation de la masse... (À développer ???)

3.5 Désavantages

Cependant, la méthode SPH possède également des inconvénients. En effet, cette méthode n'est pas bien définie aux frontières, ce qui rend la méthode difficile à calculer, comme le faisait remarquer SHADLOO, OGER et LE TOUZÉ [15]. Mais des travaux ont été faits afin de palier à ce problème, tel que ADAMI, HU et ADAMS [1] et KOSTORZ [11].

(À compléter !!!)

Chapitre 4

Méthode LBM

4.1 Histoire

La “Lattice Boltzman Method” (LBM) est basée sur la méthode “Lattice Gaz Automata” (LGA) qui a été développée par J. Hardy, Y. Pomeau et O. de Pazzis [7] en 1973 sous le nom de méthode HPP, qui était basée non pas sur les équations de Navier-Stokes 2.3, mais sur les équations de Boltzmann 2.4.

Cependant, en 1986, U. Frisch, B. Hasslacher et Y. Pomeau ont réussi à obtenir les équations de Navier-Stokes à partir de la méthode LGA en utilisant une lattice hexagonal [5]. La méthode LGA possédait des problèmes, notamment un bruit statistique causé par les approximations de la méthode LGA.

Pour pallier à ce problème, G. McManara et G. Zanetti ont décidé de négliger les corrélations entre les particules et ont donné la notion de fonction de distribution moyenne dans leur travail [14], ce qui a donné naissance à la méthode LBM. Puis en 1989, Higuera et Jimenez ont simplifié la méthode LBM en définissant un opérateur de collision linéaire [8]. Et enfin, un opérateur de collision basé sur le travail de Bhatnagar, Gross et Krook [2] a été utilisé par simultanément par Koelman [10] et Chen et al. [4].

De nos jours, la méthode LBM est devenue populaire car elle présente une nouvelle approche efficace dans le domaine “Computational Fluid Dynamics” (CFD) qui ne consiste pas à tenter de résoudre directement les équations de Navier-Stokes 2.3, comme par exemple la méthode SPH.

4.1.1 Principes de base

Comme expliqué dans la section 2, un fluide est composé de plusieurs particules liées entre elles par des liaisons faibles.

La méthode LBM considère que le fluide peut être représenté par un ensemble de populations, qui sont des groupes de particules comme nous montre la figure 4.1.

Ainsi, ce ne sont pas des particules, mais des groupes de particules qui sont représentés, c’est pourquoi ce sera une physique probabiliste et non déterministe qui sera utilisée.

Comme expliqué dans la section 4.1, la méthode LBM ne repose pas sur les équations de Navier-Stokes 2.3, mais sur les équations de Boltzmann 2.4, utilisées et adaptées pour résoudre les équations de Navier-Stokes 2.3.

La méthode LBM représente le fluide comme un ensemble de particules qui elles-mêmes représentent un ensemble de molécules. Elle est utilisée pour étudier le comportement de mésoscale fluides. (De l’ordre de 10^{-9} à 10^{-6} mètres)

Comme on représente non pas chaque molécule mais des groupes de molécule, la physique utilisée est probabilistique.

Les équations alors utilisées ne sont pas les équations de Navier-Stokes Section 2.3, mais les équations de Boltzmann.

La méthode LBM utilise les équations de Boltzmann, mais n’est pas un solveur pour ces équations...

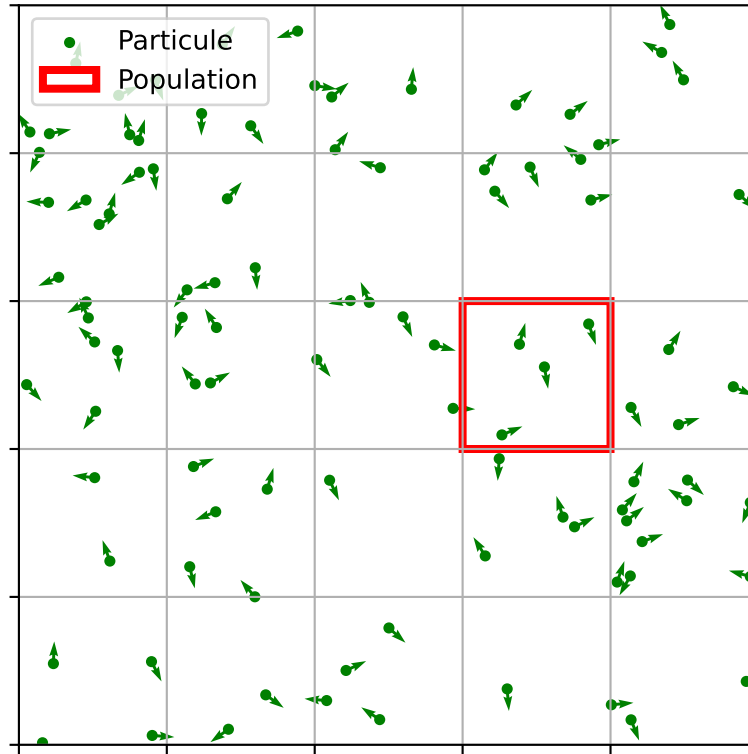


Figure 4.1: Représentation des populations de particule

On peut représenter l'espace comme un ensemble de molécules dans une grille, et on est intéressé de savoir comment les molécules vont entrer en collision...

On veut connaître où vont les molécules en moyenne et quelle est leur distribution dans l'espace de vitesse

Dans les équations de Navier-Stokes Section 2.3, on a le temps et la position comme variable, mais dans la méthode LBM, on prend également la vélocité des molécules comme une variable.

On définit alors ξ comme dans l'équation 4.1 où ξ est la vélocité moléculaire qui donne le changement de position de la molécule en fonction du temps

On veut savoir combien de molécules dans une cellule se déplacent dans une direction à un temps donné.

his enable continuum level descriptions on a kinetic level where molecules are behaving kinetically Cela permet des descriptions au niveau du continuum à un niveau cinétique où les molécules se comportent de manière cinétique. Cela permet d'avoir un

$$\xi = \frac{dx}{dt} \quad (4.1)$$

$$f(\xi, x, t)$$

Donne le nombre de molécules que l'on a à un point donné à un temps donné qui bougent dans une direction donnée avec une vitesse donnée.

Cette distribution f est normalisée de telle façon que si on intègre sur la vitesse et la position, on obtient la masse du système:

$$\int d^3\xi \int d^3x f(\xi, x, t) = M(t)$$

Et si on intègre sur seulement la vélocité, on obtient la densité car cela correspond à seulement prendre toutes les molécules, sans tenir compte de leur vitesse.

$$\int d^3\xi f(\xi, x, t) = \rho(x, t)$$

Si on calcule le premier moment de la distribution, donc si on multiplie par la vitesse des molécules et qu'ensuite on intègre en fonction de la vitesse, on obtient le moment de densité du système pour une cellule donnée.

$$\int d^3\xi \xi \cdot f(\xi, x, t) = \rho u(x, t)$$

On peut faire la même chose pour obtenir la pression, mais c'est plus compliqué.

On est intéressé par la densité et le moment de densité car ces variables apparaissent dans les équations de Navier-Stokes.

f contient toutes les propriétés locales du fluide qui nous intéressent. Si on va au niveau des équations de Navier Stokes, on est uniquement intéressé par obtenir les moments de f , ce qui signifie le moment d'ordre 0 qui est la densité et le moment d'ordre 1 qui est le moment de densité

On veut trouver une équation qui décrit comment f évolue dans le temps

On peut utiliser la règle de chainage et obtenir:

$$\begin{aligned} \frac{df(\xi, x, t)}{dt} &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{dx}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \frac{d\xi}{dt} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} \right) f(\xi, x, t) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial}{\partial x} + \frac{f}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} \right) f(\xi, x, t) \\ &= \Omega(f) \end{aligned}$$

terme 1: dérivée partielle en fonction du temps terme 2: gradient spatial terme 3: le changement de vitesse est l'accélération et l'accélération des particules est relié à la force agissant sur les particules

mais dans la réalité, les particules entrent en collision, ce qui va faire que la fonction de distribution va changer non seulement à cause des termes présent dans sa dérivée, mais également parce que les particules entrent en collision, et toutes ces contributions qui ne sont pas capturées par la dérivée sont collectées par la partie droite qui donne la déviation de 0 et qui est appelée l'opérateur de collision Ω .

On peut retrouver les équations de Navier Stokes à partir des équations de Boltzmann avec certaines conditions et limites.

Navier Stokes vs boltzmann: Navier Stokes plus simple car possède seulement les données en fonction du temps et de la position: la vitesse ξ n'est pas prise en compte...

Les équations de Boltzman n'ont pas de détails microscopiques

La fonction de distribution va être déformée par l'opérateur de collision. On ne prend pas en compte chaque collision, sinon le calcul devient monstrueux, mais on peut estimer que au bout d'un moment, on arrive à un équilibre. On appelle f^{eq} la distribution équilibrée. On estime alors que l'on peut modéliser la relaxation vers f^{eq} à partir d'un état non équilibré f par un modèle Bhatnagar-Gross-Krook (BGK):

$$\Omega(f) = -\frac{1}{\tau}(f - f^{eq})$$

avec τ le temps de relaxation

C'est une grosse simplification, mais cela marche tout de même avec les équations de Boltzmann dans une simulation numérique, et cette simplification est suffisante pour retrouver le comportement des équations de Navier-Stokes.

On définit - ξ la vitesse absolue de nos molécules - $u = \int d^3\xi \xi \cdot \frac{f(\xi, x, t)}{\rho}$ est la vitesse moyenne du fluide dans la cellule. C'est la vitesse moyenne des molécules dans une surface donnée. C'est la vitesse macroscopique du liquide à un point donné - $v = \xi - u$ comme la vitesse du centre de masse de ces

molécules. Il donne comment les molécules sont distribuées individuellement dans l'espace des vitesses autour de la vitesse u .

On utilise communément u et v et non pas ξ .

Les collisions doivent conserver la masse (densité), le moment (vitesse) (3ème loi de Newton) et l'énergie (température) (collisions sont élastiques...) La distribution d'équilibre f^{eq} doit dépendre seulement de la densité ρ , la vitesse du centre de masse v et de la température T . et elle doit être isotropique. elle doit être isotrope, peu importe la direction de l'espace dans lequel nous regardons, elle ne peut donc dépendre que de la magnitude de v . On arrive après des dérivations à la fonction de distribution équilibrée 4.2

$$\begin{aligned} f^{eq}(v, x, t) &= \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{|v|^2}{2RT}} \\ &= \rho \left(\frac{1}{2\pi RT} \right)^{3/2} e^{-\frac{|\xi-u|^2}{2RT}} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Qu'est ce qu'on a appris ?

- séparation dans le temps et dans l'espace
- remplacement des molécules par une fonction de distribution $f(v, x, t)$ (mesoscopic picture)
- Boltzmann équation: équation gouvernant la distribution f
- On a besoin de l'opérateur de collision $\Omega(f)$ qui est très complexe dans sa forme mathématique
- On utilise un opérateur de collision simplifié grâce à BGK qui nous donne une distribution équilibrée f^{eq}
- On peut calculer la densité ρ , la vitesse u et la pression p macroscopique du fluide grâce aux moments de $f(v, x, t)$
- On peut retrouver les équations de Navier Stokes

we can use a navier stokes solver that is not directly discretizing the navier-stokes equations but that is rooted in boltzmann theory. Nous pouvons utiliser un solveur de Navier-Stokes qui ne discrétise pas directement les équations de Navier-Stokes mais qui est enraciné dans la théorie de Boltzmann.

L'idée principale est d'utiliser les équations de Boltzmann pour résoudre les équations de Navier-Stokes, ce qui est possible grâce à Chapman-Enskog.

Nous allons simuler l'évolution de la fonction de densité f plutôt que l'évolution de la vitesse et de la pression, ce qui nous intéresse normalement dans un fluide microscopique...

Pourquoi utiliser la méthode Boltzmann ?? En effet, il y a plus de variables, cela a l'air plus difficile... On utilise cette méthode car elle s'avère plus pratique qu'une discrétisation des équations de Navier-Stokes.

On a donc à - Discrétiser la fonction de distribution f - Qu'est ce que la lattice boltzmann equation (LBE) - comment sont liés l'équation de Navier-stokes et l'équation de boltzmann ?

Espace: $x \rightarrow \Delta x$ (lattice). On prend l'espace et on le décompose en "small lattice nodes" et on résout l'équation pour chaque nœud du treillis (ou de la lattice...)

Temps: $t \rightarrow \Delta t$ qui est constant... Donc on résout lattice boltzmann à un temps t , puis on avance de Δt ... On peut également faire le temps dynamiquement...

Vitesse: $f(v, x, t) \rightarrow f_i(x, t)$ On discrétise f en terme d'espace de vitesse en autorisant seulement un très petit nombre de directions possibles de direction et de vitesse. (Notation D2Q9: 9 vitesse possibles en 2d... D3Q19: 19 vitesse possibles en 3d)

Vitesse:

Ce que l'on fait est que l'on dit que si on a une molécule ou f n'est pas réellement une molécule, mais un ensemble de molécules. Au lieu de dire f décrit comment les molécules bougent dans toutes les directions, on dit que les molécules peuvent maintenant bouger seulement sur les axes primaires x, y, z ou elles peuvent bouger sur les diagonales, et elles doivent se déplacer de telle sorte qu'en un pas de temps Δt , elles atteignent exactement l'un des nœuds de treillis voisins. Donc la discrétisation de l'espace de vitesse est faite de telle sorte qu'il est parfaitement aligné avec la discrétisation temporelle et spatiale.

On doit donc remplacer les intégrales par des sommes finies qui n'ont que peu de termes comme 9 ou 19 plutôt que 1 million. Le mécanisme mathématique derrière cela est "Hermite expansion" que je ne vais pas expliquer.

$$(c_i) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix} \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

pour D2Q9....

Une fois que l'on a fait cela, on écrit q différentes populations $f_i(x, t)$, une pour chaque c_i

On a donc:

$$\sum_i^{q-1} f_i(x, t) = \rho(x, t)$$

et

$$\sum_i^{q-1} c_i f_i(x, t) = \rho u(x, t)$$

Au lieu de l'opérateur de collision, on utilise l'approximation BGK et l'équation résultante sera la lattice boltzmann equation ou lattice bgk equation (lbgk)

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t) = -\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) = \Omega_i$$

avec

- $f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(x, t)$ une population i donnée évaluée dans un point x et un temps t et sa contrepartie se sera déplacée de $c_i \times \Delta t$ où c_i est la vitesse de la population.
- $-\frac{\Delta t}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t))$ la distribution f_i qui va se relaxer vers la distribution équilibrée f_i^{eq} en un temps $\frac{\Delta t}{\tau}$

Ce qui nous donne si on réécrit cela:

$$f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) - \frac{\Delta t}{\tau} (f_i(x, t) - f_i^{eq}(x, t)) = \Omega_i$$

Le terme de relaxation nous donne un déplacement ou une redistribution de notre population, mais elle n'a pas encore bougé dans l'espace, et ensuite, on la propage vers les autres voisins.

Les avantages sont que les collisions sont locales et algébriques: c'est un algorithme très simple pour les collisions et la propagation est linéaire et exacte, ce qui signifie que l'on peut décomposer le lattice solveur en étape de collision et de propagation.

Dans Navier-Stokes, on a la notion de viscosité alors que dans Boltzmann, on a seulement un temps de relaxation. On a ainsi la relation suivante:

$$\text{visc} = c_S^2 \left(\tau - \frac{\Delta t}{2} \right)$$

avec la vitesse du son c_S définie comme suit:

$$c_S = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

et f_i^{eq} qui est une simplification de la distribution de Maxwell-Boltzmann défini comme suit:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left(1 + \frac{c_i \cdot u}{c_S^2} + \frac{(c_i \cdot u)^2}{2c_S^4} - \frac{u \cdot u}{2c_S^2} \right)$$

avec w_i le poids d'une population dépendant de si la population se déplace le long des axes principaux ou diagonaux ou si elle reste sur place (en effet, il peut changer de valeur suivant ces critères....)

Comment on fait ?

- Condition initiale. On connaît le f_i initial. On peut donc calculer la densité et la vitesse par la somme des moments de f
- Ensuite, on calcule la distribution équilibrée f^{eq} qui dépend uniquement de la densité et de la vitesse.
- Puis on peut calculer la distribution post collision f_i^* . Nos populations auront été redistribués dans l'espace de vitesse, mais n'auront pas bougé. On peut alors propager cela aux voisins: $f_i(x + c_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i^*$.

Pourquoi ça marche ?

- On a une “lattice symmetry and isotropy”
- On a la conservation de la masse et de la quantité de mouvement: $\sum_i \Omega_i = 0$ et $\sum_i c_i \Omega_i = 0$
- Les analyses de Chapman-Enskog nous montre que ce que l'on a fait (donc que LBE) est suffisant pour retrouver le comportement de Navier-Stokes.

1. Avantages

- C'est rapide car c'est une méthode explicite et linéaire en propagation
- On n'a pas d'équation de poisson à résoudre (à la différence des équations de Navier-Stokes)
- C'est une méthode locale excepté pour la propagation aux voisins
- Facilement parallélisable (très scalable: linéaire en fonction du nombre de coeurs...)
- Les géométries complexes peuvent être implémentées relativement facilement comparée aux autres méthodes

2. Désavantages

- On ne peut simuler que des “small Knudsen numbers” et des “small Mach numbers”

Ce qu'on a appris

- Discrétiser la distribution f
- Discrétiser la vitesse $f(v, x, t) \rightarrow f_i(x, t)$
- Simple à implémenter
- τ détermine la viscosité du fluide
- la méthode est rapide, facilement parallélisable, et peut être utilisée pour résoudre des systèmes complexes de géométrie
- mais la méthode n'est pas faite pour simuler des high Knudsen ou high Mach numbers

Pour simuler des problèmes de différente taille, il faut bien définir les conditions aux bords... Les conditions aux bords sont nécessaires non seulement mathématiquement, mais aussi physiquement. En général, on a des approches non structurées (comme la méthode SPH), des approches structurées (comme la méthode LBM) Il faut faire attention car si on ne s'occupe pas bien des conditions aux bords, le résultat sera mauvais...

La lattice boltzmann a un zoo pour les conditions aux bords car on a plus de variable que dans les équations de Navier-Stokes. Par exemple, en 3d, on a 4 champs hydrodynamiques, on a la pression et on a la vitesse qui possède 3 composantes et le stress tensor σ qui possède 6 composantes (le stress tensor est utilisé pour déterminer ce qui se passe aux bords du fluide....). Cependant, on a plus de populations... On a 19 ou 27 populations, ce qui signifie que l'on a plus de liberté dans LBM que dans Navier-Stokes, mais que l'on a plus de conditions à imposer et à satisfaire...

D'une manière générale, on manipule des populations f_i . Pour savoir ce qui se passe aux conditions, nous devons savoir ce qui vient depuis l'extérieur, donc on va se dire que l'on a un f qui vient de l'extérieur, et on va essayer de déterminer ce qu'il devrait être.

De nombreuses personnes se sont penchés sur le problème de condition aux bords et ils ont déterminé de nombreuses conditions aux bords, ayant chacune leur avantage et leur désavantage. On a notamment les Bounce-back methods (simple, interpolée, partiellement saturée), les Ghost methods (FH & MLS, GZS, Image-based) et les Immersed Boundary methods (Explicit, Direct forcing, other variants)

On peut par exemple définir pour Bounce-back méthode que si on passe la frontière, on a $f_i \rightarrow f_{\bar{i}}$ avec $c_{\bar{i}} = -c_i$. Ainsi, on n'ajoute pas de nouvelles informations. Cette méthode marche pour toutes les conditions de bord en escalier, est extrêmement simple et ne possède pas d'équivalent dans les CFD (computational fluid dynamics) mais elle n'est pas très précise, il y a des artefacts numériques et si on bouge les bords, on aura des complications

Conditions de bord immersive (excellent article de Peskin en 2002 !) Un principe de base est que les frontières vont bouger avec le fluide. Cette méthode n'est pas une condition de bord, mais elle ne fait que mimer l'effet d'un bord.

Avantages: pas besoin d'inclure des conditions de bord réelles, l'effet sur le fluide est complètement inclus avec les forces externes, fonctionne pour des bords de n'importe quelle forme

Désavantages: impact sur la précision due à diffuse interface method, le fluide existe à l'intérieur des bords, plus difficile pour les conditions limites autres que l'absence de glissement...

Comme on n'a pas d'équation de poisson à résoudre, lbm est utile pour le calcul haute performance

Explications prise de cette vidéo: KRÜGER [12].

Bibliographie

- [1] S. ADAMI, X. Y. HU et N. A. ADAMS. “A generalized wall boundary condition for smoothed particle hydrodynamics”. In : *Journal of Computational Physics* 231.21 (2012), p. 7057-7075. DOI : [10.1016/j.jcp.2012.05.005](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2012.05.005).
- [2] P.L. BHATNAGAR, E.P. GROSS et M. KROOK. “A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems”. In : *Physical Review* 94 (1954), p. 511-525.
- [3] Fabien CALEYRON. “Simulation numérique par la méthode SPH de fuites de fluide consécutives à la déchirure d’un réservoir sous impact”. Français. NNT : 2011ISAL0103. tel-00711040. Autre. INSA de Lyon, 2011. URL : <https://theses.hal.science/tel-00711040>.
- [4] S. CHEN et al. “Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics”. In : *Physical Review Letters* 67 (1991), p. 3776-3780.
- [5] U. FRISCH, B. HASSLACHER et Y. POMEAU. “Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation”. In : *Physical Review Letters* 56.14 (1986), p. 1505-1508. DOI : [10.1103/PhysRevLett.56.1505](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.56.1505).
- [6] R.A. GINGOLD et J.J. MONAGHAN. “Smoothed Particle Hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars”. In : *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 181 (1977), p. 375-389.
- [7] J. HARDY, Y. POMEAU et O. de PAZZIS. “Time evolution of a two-dimensional classical lattice system”. In : *Physical Review Letters* 31 (1973), p. 276-279.
- [8] F. HIGUERA et J. JIMENEZ. “Boltzmann approach to lattice gas simulations”. In : *Europhysics Letters* 9 (1989), p. 663-668.
- [9] JLCERCOS. *Figure*. <https://commons.wikimedia.org/w/index.php?curid=70225405>. Travail personnel, CC BY-SA 4.0. 2018.
- [10] J.M.V.A. KOELMAN. “A simple lattice Boltzmann scheme for Navier-Stokes fluid flow”. In : *Europhysics Letters* 15 (1991), p. 603-607.
- [11] KOSTORZ. “A semi-analytical boundary integral method for radial functions with application to Smoothed Particle Hydrodynamics”. In : *Journal of Computational Physics* 417 (2020). DOI : [10.1016/j.jcp.2020.109565](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2020.109565).
- [12] Timm KRÜGER. *Introduction to Lattice Boltzmann Method*. <https://www.youtube.com/watch?v=jfk4feD7rFQ>. ESPResSo Simulation Package. 2021.
- [13] L.B. LUCY. “A numerical approach to the testing of the fission hypothesis”. In : *Astronomical Journal* 82 (1977), p. 1013-1024.
- [14] G. MCNAMARA et G. ZANETTI. “Use of a Boltzmann equation to simulate lattice-gas automata”. In : *Physical Review Letters* 61 (1988), p. 2332.
- [15] M. S. SHADLOO, G. OGER et D. LE TOUZÉ. “Smoothed particle hydrodynamics method for fluid flows, towards industrial applications: Motivations, current state, and challenges”. In : *Computers and Fluids* 136 (2016), p. 11-34. DOI : [10.1016/j.compfluid.2016.05.029](https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2016.05.029).
- [16] Alban VERGNAUD. “Améliorations de la précision et de la modélisation de la tension de surface au sein de la méthode SPH, et simulations de cas d’amerrissage d’urgence d’hélicoptères”. Français. fNNT: 2020ECDN0033ff. fftel-03185147f. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. École centrale de Nantes, 2020.
- [17] Marcus VESTERLUND. “Simulation and Rendering of a Viscous Fluid using Smoothed Particle Hydrodynamics”. Mém. de mast. Unknown, déc. 2004.