

Méthode de Boltzmann sur réseau pour la mécanique des fluides

Lucas Helluy, Arnaud Frering

13 janvier 2017

1 Équations de la mécanique des fluides

Nous considérons un fluide (liquide ou gaz) compressible s'écoulant dans un milieu d -dimensionnel ($d = 2$ ou 3). Dans ce travail, nous ne considérerons que le cas $d = 2$, mais les méthodes présentées sont généralisables au cas $d = 3$. Les coordonnées spatiales sont notées

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$$

et la variable temporelle $t \in \mathbb{R}_+$. Le fluide est caractérisé par sa masse volumique $\rho(x, t)$ et sa vitesse

$$u(x, t) = \begin{pmatrix} u_1(x, t) \\ u_2(x, t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2.$$

Pour établir les équations satisfaites par ρ et u nous considérons un domaine Ω fixe du plan. Sa frontière est notée $\partial\Omega$, et le vecteur normal unitaire sur $\partial\Omega$ sortant à Ω est noté n . La masse de fluide contenue dans Ω est donnée par

$$M(t) = \int \int_{\Omega} \rho(x, t) dx_1 dx_2.$$

En abrégé, nous noterons aussi

$$M = \int_{\Omega} \rho.$$

La variation de masse dans Ω s'écrit, en dérivant sous l'intégrale

$$\frac{dM}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho = \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

La variation de masse dans Ω est aussi égale au flux de masse à travers $\partial\Omega$ (ds est l'élément de surface sur $\partial\Omega$)

$$\frac{dM}{dt} = - \int_{\partial\Omega} \rho u \cdot n ds.$$

Nous appliquons le théorème de Green-Ostrogradski

$$\int_{\partial\Omega} \rho u \cdot n ds = \int_{\Omega} \nabla \cdot (\rho u).$$

Nous en déduisons

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0.$$

Cette égalité est valable pour n'importe quel domaine Ω , donc

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0. \quad (1)$$

C'est l'équation de conservation de la masse.

Nous allons maintenant établir l'équation de quantité de mouvement. La quantité de mouvement contenue dans le domaine Ω est

$$\frac{d\vec{Q}}{dt} = \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho u = \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u).$$

D'autre part cette variation de quantité de mouvement est égale à la puissance des forces exercées sur Ω plus le flux de quantité de mouvement à travers $\partial\Omega$. Pour simplifier, nous supposons que le fluide n'est soumis qu'à des forces de pression qui agissent sur le bord de Ω . En notant p la pression, nous obtenons

$$\frac{dQ}{dt} = - \int_{\partial\Omega} p n ds - \int_{\partial\Omega} \rho u (u \cdot n) ds.$$

Nous appliquons à nouveau la formule de Green-Ostrogradski

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u u^T) + \nabla p \right) = 0.$$

Nous en déduisons l'équation de bilan de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u u^T) + \nabla p = 0. \quad (2)$$

Les équations (1) et (2) constituent les équations d'Euler de la mécanique des fluides compressibles. Il y a 3 équations et 4 inconnues ρ , u_1 , u_2 et la pression p . Pour pouvoir résoudre ces équations il faut ajouter une loi de fermeture. Pour simplifier, nous pouvons par exemple supposer que la pression est une fonction linéaire de la masse volumique

$$p = c^2 \rho \quad (3)$$

(c'est le cas si le fluide est isotherme). La constante c est la vitesse du son dans le fluide.

2 Méthode de Boltzmann sur réseau

Les équations (1), (2), (3) sont des équations non-linéaires difficiles à résoudre. Sauf dans certains cas particuliers, il est impossible de calculer les solutions aux moyens de formules analytiques. Il faut utiliser une méthode numérique. La méthode de Boltzmann sur réseau ("lattice Boltzmann" en anglais) est une méthode numérique extrêmement simple pour simuler sur ordinateur un écoulement de fluide. De très nombreux travaux portent sur cette méthode. Nous pouvons par exemple citer [Dub07].

Le principe de la méthode de Boltzmann sur réseau est de faire une analogie avec la théorie cinétique des gaz. En fait un fluide est composé d'un très grand nombre de particules qui se déplacent avec leur propre vitesse microscopique v et qui collisionnent à certains moments. En théorie cinétique, il faut considérer la fonction de distribution des particules

$$f(x, v, t)$$

qui comptent les particules qui au point x et à l'instant t ont une vitesse v . La masse volumique est donnée par

$$\rho(x, t) = \int_v f(x, v, t) dv_1 dv_2$$

et la quantité de mouvement par

$$\rho(x, t)u(x, t) = \int_v f(x, v, t) v dv_1 dv_2.$$

Sans collisions les particules se déplaceraient librement

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = 0.$$

Les collisions vont avoir tendance à ramener la fonction de distribution vers une distribution d'équilibre $M_{\rho, u}(v)$. Nous obtenons ainsi l'équation de Boltzmann

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = \frac{1}{\tau} (M_{\rho, u} - f), \quad (4)$$

où τ est un temps caractéristique (en général petit) de retour vers l'équilibre. Le principe de conservation de la masse et de la quantité de mouvement impliquent

$$\int_v (M_{\rho, u} - f) = 0, \text{ ou } \int_v M_{\rho, u}(v) dv_1 dv_2 = \rho \quad (5)$$

et

$$\int_v (M_{\rho, u} - f) v = 0, \text{ ou } \int_v M_{\rho, u}(v) v dv_1 dv_2 = \rho u. \quad (6)$$

On constate que si τ est très petit nous aurons toujours

$$f(x, v, t) \simeq M_{\rho(x, t), u(x, t)}(v).$$

Par ailleurs, si nous multiplions l'équation (4) par le vecteur $(1, v_1, v_2)^T$ et intégrons par rapport à v nous obtenons

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho u \\ \int_v v v^T M_{\rho, u} \end{pmatrix} = O(\tau).$$

Par conséquent, à l'ordre 1 en τ nous retrouvons les équations d'Euler, à condition que

$$\int_v v v^T M_{\rho, u} = \rho u u^T + p I. \quad (7)$$

Pour l'instant, dans cette présentation, la vitesse microscopique v est dans \mathbb{R}^d . L'équation de Boltzmann est plus simple que l'équation d'Euler. Mais il est difficile de la résoudre numériquement car elle est écrite dans un espace de dimension $2 \times d$. La méthode de Boltzmann sur réseau consiste à supposer que v est dans un ensemble fini de l vitesses V , le plus petit possible

$$V = \{\xi^0, \dots, \xi^{l-1}\}.$$

Pour la fonction de distribution nous employons désormais la notation

$$f(x, \xi^i, t) = f^i(x, t), \quad i = 0 \dots l-1,$$

et nous remplaçons les intégrales en v par une somme sur les vitesses discrètes

$$\begin{aligned} \int_v f(x, v, t) dv_1 dv_2 &= \sum_{i=0}^{l-1} \omega_i f^i(x, t), \\ \int_v f(x, v, t) v dv_1 dv_2 &= \sum_{i=0}^{l-1} \omega_i f^i(x, t) \xi^i, \end{aligned}$$

où les ω_i sont appelés les poids d'intégration discrète.

Il s'agit maintenant de trouver une fonction de distribution d'équilibre $M_{\rho, u}(\xi^i)$ vérifiant les conditions (5), (6) et (7). Nous noterons aussi

$$M_{\rho, u}^i = M_{\rho, u}(\xi^i), \quad i = 0 \dots l-1.$$

Un modèle de réseau très couramment utilisé est le modèle dit D2Q9 (2dimensions et $l = 9$ vitesses de réseau) défini par

$$\xi = \sqrt{3}c \left[\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right]$$

$$\omega = \left[\frac{4}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{1}{36}, \frac{1}{36}, \frac{1}{36}, \frac{1}{36} \right],$$

$$M_{\rho, u}^i = \rho \left(1 + \frac{\xi^i \cdot u}{c^2} + \frac{(\xi^i \cdot u)^2}{c^4} - \frac{u \cdot u}{2c^2} \right).$$

Nous vérifions que

$$\sum_i \omega_i M_{\rho,u}^i = \rho,$$

$$\sum_i \omega_i M_{\rho,u}^i \xi^i = \rho u$$

et

$$\sum_i \omega_i M_{\rho,u}^i \xi^i (\xi^i)^T = \begin{pmatrix} \rho u_1^2 + c^2 \rho & \rho u_1 u_2 \\ \rho u_1 u_2 & \rho u_2^2 + c^2 \rho \end{pmatrix}.$$

3 Programmation de la méthode Boltzmann sur réseau en C

Pour discrétiser numériquement l'équation de Boltzmann sur réseau, nous supposons d'abord que le domaine de calcul est un rectangle $\Omega =]0, L1[\times]0, L2[$. Ce domaine est discrétisé par une grille de pas Δx tel que

$$L1 = N1 \times \Delta x, \quad L2 = N2 \times \Delta x.$$

Les points de grille sont définis par

$$x^{i,j} = \begin{pmatrix} i\Delta x \\ j\Delta x \end{pmatrix}, \quad i = 0 \dots N1 - 1, \quad j = 0 \dots N2 - 1.$$

La fonction de distribution est définie en chacun de ces points de grille par une approximation aux instants $t_n = n\Delta t$

$$f^k(x^{i,j}, n\Delta t) \simeq fn[k][i][j] \quad k = 0 \dots l - 1, \quad i = 0 \dots N1 - 1, \quad j = 0 \dots N2 - 1.$$

Pour avancer du temps $t_n = n\Delta t$ au temps $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ nous discrétisons séparément l'étape de transport

$$\partial_t f + v \cdot \nabla f = 0,$$

et l'étape de collision

$$\partial_t f = \frac{1}{\tau} (M_{\rho,u} - f).$$

L'étape de transport s'écrit très simplement

$$f(x^{i,j}, \xi^k, t_{n+1}) = f(x^{i,j} - \Delta t \xi^k, \xi^k, t_n).$$

Si $\sqrt{3}c\Delta t = \Delta x$, cette formule consiste simplement en des recopies avec décalages de la fonction de distribution du pas de temps précédent. À la fin de l'étape de transport, en chaque point de la grille, la fonction de distribution n'est plus à l'équilibre

$$f(x^{i,j}, \xi^k, t_{n+1}) \neq M_{\rho,u}(\xi^k).$$

L'étape de collision consiste alors à ramener en $x^{i,j}$ la fonction de distribution vers l'équilibre. Plus précisément, pour tout point de grille (i, j) nous calculons

$$\rho = \sum_{k=0}^{l-1} \omega_k fn[k][i][j], \quad u = \frac{1}{\rho} \sum_{k=0}^{l-1} \omega_k fn[k][i][j] \xi^k,$$

puis nous effectuons

$$fn[k][i][j] = M_{\rho,u}(\xi^k).$$

Détails : bords du domaine ? "bounce-back" ? collisions d'ordre 2 "Crank-Nicolson" ?

4 Optimisation de la méthode avec PyOpenCL (ou OpenMP)

5 Application : allées de von Karmann

Références

- [Dub07] Francois Dubois. Une introduction au schéma de boltzmann sur réseau.
In *ESAIM : Proceedings*, volume 18, pages 181–215. EDP Sciences, 2007.