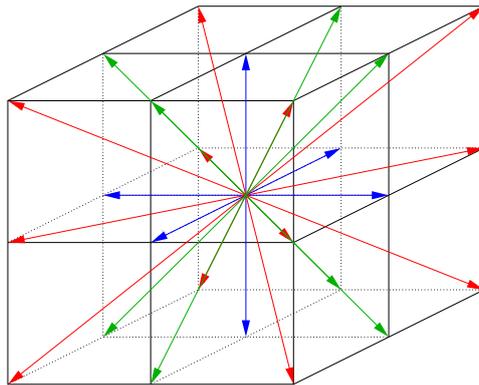


Transport de particules : modèles, simulations, et applications

Notes de cours
(version provisoire du 1^{er} novembre 2020)

Partie 2. Application aux écoulements incompressibles : la méthode Boltzmann sur réseau



Luc Mieussens

Bordeaux INP (ENSEIRB-MATMECA)
et
Institut de Mathématiques de Bordeaux

Deuxième partie

Application aux écoulements incompressibles : la méthode "Boltzmann sur réseau"

Table des matières

II Application aux écoulements incompressibles : la méthode "Boltzmann sur réseau"	3
1 Introduction	7
2 Équations de Stokes	9
3 Régime bas Mach : de Boltzmann à Stokes	11
3.1 Modèle BGK linéarisé	11
3.2 Adimensionnement	12
3.3 Analyse asymptotique	13
3.4 Retour aux variables dimensionnelles	18
4 Discrétisation en vitesse : le modèle D2Q9	23
5 Discrétisation en temps et espace : méthode de Boltzmann sur réseau	27
5.1 Discrétisation	27
5.2 Analyse	29
5.3 Résumé	32
5.4 Discussion	33
6 Mise en oeuvre	35
6.1 Simplifications	35
6.2 Version collision-transport	36
7 Extensions	37
8 TP : initiation à la méthode Boltzmann sur réseau	39
8.1 Écoulement de Couette	39
8.2 Écoulement autour d'un cylindre	42
Bibliographie	47

Chapitre 1

Introduction

La méthode “Boltzmann sur réseau” ou “Lattice Boltzmann” en anglais (notée LBM dans la suite de cette partie) est une méthode numérique pour simuler les écoulements de fluides incompressibles. Elle est basée sur une interprétation cinétique des équations de Navier-Stokes. Son principal avantage est qu’elle se programme *très* facilement. En outre, les codes basés sur cette méthode sont très bien adaptés au calcul sur des ordinateurs massivement parallèles.

Elle fait partie des méthodes dites à frontières immergées : le maillage utilisé est une grille cartésienne (éventuellement avec différents niveaux de raffinement), et toute paroi solide est prise en compte par son intersection avec les cellules carrées du maillage. Contrairement aux méthodes usuelles basées sur des discrétisations des équations de la mécanique des fluides, la méthode LBM n’est pas basée sur une technique volumes finis ou éléments finis.

Cette méthode fait l’objet d’une littérature abondante, et elle a conduit à la mise au point de plusieurs grands codes de calcul. Parmi ceux-ci, mentionnons ProLB, développé par un consortium dont font partie Renault et Airbus. Malheureusement, il n’est pas facile de trouver des références accessibles pour comprendre les fondements de LBM. On pourra consulter par curiosité l’article [5] dans lequel a été introduite la méthode présentée ici, mais il fait 5 pages seulement ! Une référence plus claire est [3] : bien qu’il manque quelques détails importants, un certain nombre d’éléments donnés ici proviennent de cet article. Nous avons aussi utilisé l’article complet [4] (assez technique) sur l’analyse asymptotique des schémas LBM. Nous mentionnons enfin les travaux de F. Dubois [2] et S. Dellacherie [1] qui proposent d’autres interprétations de la méthode LBM.

Pour terminer cette introduction, nous donnons un bref aperçu de la façon dont nous construisons la méthode LBM dans ce chapitre. Précisons tout d’abord que dans un souci de simplicité, nous nous restreignons ici à une méthode LBM pour la simulation d’une version simplifiée des équations de Navier-Stokes incompressibles que sont les équations de Stokes. Celles-ci sont brièvement présentées dans le chapitre 2. Ensuite, nous montrons dans le chapitre 3 que la vitesse macroscopique associée à l’équation BGK converge vers la solution des équations de Stokes quand le nombre de Knudsen et le nombre de Mach tendent vers 0. Dans le chapitre 4, nous montrons que l’on peut remplacer l’équation BGK par une équation à vitesses discrètes (le modèle D2Q9) qui est lui aussi asymptotiquement équivalent aux équations de Stokes, et bien plus simple à résoudre que le modèle BGK continu. Enfin, nous verrons dans le chapitre 5 que cette équation peut être discrétisée en temps et en espace de

façon astucieuse, afin d'obtenir un schéma consistant avec les équations de Stokes. C'est ce schéma qui constitue la méthode LBM, qui sera ensuite mise en oeuvre dans le TP proposé dans le chapitre 8.

Chapitre 2

Équations de Stokes

Le champ de vitesse d'un écoulement lent et incompressible peut être modélisé par les équations de Stokes qui s'écrivent

$$\begin{aligned}\nabla_x \cdot u &= 0 \\ \rho \partial_t u + \nabla_x p &= \mu \Delta_x u,\end{aligned}\tag{2.1}$$

où ρ est la masse volumique du fluide, supposée constante, et p est sa pression. En divisant la deuxième équation par ρ et en définissant la *viscosité cinématique* $\nu = \mu/\rho$, on a l'expression équivalente

$$\begin{aligned}\nabla_x \cdot u &= 0 \\ \partial_t u + \nabla_x P &= \nu \Delta_x u,\end{aligned}\tag{2.2}$$

où $P = p/\rho$. Cette dernière variable est souvent appelée pression, comme nous le ferons par la suite, bien que ce terme ait la dimension d'une énergie par unité de masse.

On utilise souvent la version adimensionnée de ces équations. Elle s'obtient ainsi : on se donne une longueur caractéristique x_* , une vitesse macroscopique de référence u_* (comme la vitesse d'une paroi par exemple), et on en déduit un temps de référence macroscopique $t_* = x_*/u_*$. On choisit en outre la pression caractéristique $p_* = \rho u_*^2$, ce qui induit la valeur de P caractéristique $P_* = u_*^2$. On définit ensuite les variables adimensionnées $x' = x/x_*$, $u' = u/u_*$, $t' = t/t_*$, et $P' = P/P_*$, et l'on trouve les équations

$$\begin{aligned}\nabla_{x'} \cdot u' &= 0 \\ \partial_{t'} u' + \nabla_{x'} P' &= \frac{1}{\text{Re}} \Delta_{x'} u',\end{aligned}\tag{2.3}$$

où Re est le *nombre de Reynolds* défini par

$$\text{Re} = \frac{u_* x_*}{\nu}.\tag{2.4}$$

Chapitre 3

Régime bas Mach : de Boltzmann à Stokes

Considérons l'équation BGK de la théorie cinétique des gaz (voir partie 1, section 9.2) :

$$\partial_t F + v \cdot \nabla_x F = \frac{1}{\tau} (M[\rho, u, T] - F), \quad (3.1)$$

où v est la variable de vitesse que nous considérerons dans un espace de dimension d non précisée pour le moment. Rappelons que la maxwellienne $M[\rho, u, T]$ est définie par

$$M[\rho, u, T](v) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2RT}\right),$$

où ρ , u , et T sont liés aux moments d'ordre 0, 1, et 2 de F par rapport à v . En particulier, on a

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} F dv \quad \text{et} \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}^d} v F dv.$$

Nous avons déjà vu que lorsque le nombre de Knudsen est suffisamment petit, les quantités macroscopiques associées à cette équation satisfont les équations de Navier-Stokes de la dynamique des gaz compressibles (voir la partie 1, section 1.2).

Il est connu que sous certaines hypothèses (écoulement isotherme et à nombre de Mach faible), les équations de Navier-Stokes conduisent aux équations de Stokes (2.2). Dans cette section, nous allons montrer que sous les mêmes hypothèses, l'équation BGK (3.1) conduit elle aussi, dans une certaine limite asymptotique, aux équations de Stokes (2.2).

3.1 Modèle BGK linéarisé

Dans un premier temps, supposons donc que la température T est une constante donnée, et que le nombre de Mach $\text{Ma} = \frac{\|u\|}{\sqrt{RT}}$ est très petit. Ce nombre mesure le rapport entre la vitesse macroscopique du fluide et la vitesse du son (ou vitesse d'agitation thermique des molécules). Par un simple développement de Taylor, ces hypothèses permettent de linéariser la maxwellienne pour obtenir

$$M[\rho, u, T] = M[1, 0, T] \rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT}\right) + O(\text{Ma}^2).$$

On néglige alors le terme en $O(\text{Ma}^2)$ pour aboutir au modèle BGK linéarisé suivant :

$$\partial_t F + v \cdot \nabla_x F = \frac{1}{\tau} \left(M[1, 0, T] \rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT} \right) - F \right). \quad (3.2)$$

Pour simplifier encore le modèle, on préfère changer d'inconnue en utilisant la distribution f définie par la relation

$$F = M[1, 0, T]f,$$

de sorte que ρ et ρu soient définis par

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} F dv = \int_{\mathbb{R}^d} f M[1, 0, T] dv \quad \text{et} \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}^d} v f M[1, 0, T] dv. \quad (3.3)$$

L'équation satisfaite par f est alors

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\tau} (f_{eq} - f), \quad (3.4)$$

où f_{eq} est la distribution d'équilibre linéarisée définie par

$$f_{eq} = \rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT} \right). \quad (3.5)$$

Enfin, l'analyse asymptotique menée partie 1 chapitre 10 a montré que la viscosité des équations de Navier-Stokes et le temps de relaxation τ de l'équation BGK sont liés par la relation $\mu = \tau p = \tau \rho RT$, ce qui donne $\nu = \tau RT$. Les deux quantités ν et T étant supposées constantes ici, nous supposons donc que τ lui-même est constant dans la suite, et nous chercherons à vérifier que la relation $\nu = \tau RT$ est bien satisfaite dans ce nouveau cadre.

Exercice 3.1. Montrer la maxwellienne linéarisée possède les mêmes moments d'ordre 0 et 1 que f , mais pas celui d'ordre 2. Quelles sont alors les lois de conservation associées à (3.4) ?

3.2 Adimensionnement

Tous les outils utilisés ici ont déjà été vus partie 1, section 10.3, mais l'adimensionnement que nous utilisons est légèrement différent : il utilise en effet deux échelles de vitesses. On se donne une longueur caractéristique x_* , une vitesse macroscopique de référence u_* (comme la vitesse d'une paroi par exemple), et on en déduit un temps de référence macroscopique $t_* = x_*/u_*$. On se donne aussi une vitesse microscopique de référence $v_* = \sqrt{RT}$ (la vitesse thermique). La vitesse thermique est souvent notée c_s dans la littérature LBM, et appelée vitesse du son dans le gaz, bien que la véritable vitesse du son soit $5c_s/3$ (voir partie 1, chapitre 5). On choisit en outre une valeur caractéristique de la distribution $f_* = \rho_*$. En définissant les variables adimensionnées $(\prime) = (\prime)/(\prime)_*$, on trouve la version adimensionnée de (3.4) :

$$\partial_{t'} f' + \frac{1}{\text{Ma}} v' \cdot \nabla_{x'} f' = \frac{1}{\text{Kn Ma}} (f'_{eq} - f'), \quad (3.6)$$

où Kn est le nombre de Knudsen, qui a été défini partie 1, section 2.4 et Ma est le nombre de Mach. Ces deux nombres sans dimension sont définis ici par

$$\text{Kn} = l/x_* = \tau c_s/x_* \quad \text{et} \quad \text{Ma} = u_*/c_s. \quad (3.7)$$

La distribution d'équilibre adimensionnée f'_{eq} est définie par

$$f'_{eq} = \rho' + \text{Ma} \rho' u' \cdot v', \quad (3.8)$$

et ρ' et u' sont définies par $\rho' = \rho/\rho_*$ et $u' = u/u_*$, mais peuvent aussi être définies par la densité et vitesse associées à f' . En effet, injectons les relations précédentes et la relation $f' = f/f_*$ dans (3.3) pour trouver

$$\rho_* \rho' = \int_{\mathbb{R}^d} f_* f' M[1, 0, T] dv \quad \text{et} \quad \rho_* u_* \rho' u' = \int_{\mathbb{R}^d} v f_* f' M[1, 0, T] dv.$$

Ensuite, le changement de variables $v \mapsto v' = v/v_*$ donne $M[1, 0, T](v) dv = M_0(v') dv'$ et $v M[1, 0, T](v) dv = v_* v' M_0(v') dv'$, ou nous notons M_0 la maxwellienne absolue définie par

$$M_0(v') = M[1, 0, 1](v') = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|v'|^2}{2}\right).$$

Rappelons enfin que $f_* = \rho_*$ pour trouver

$$\rho' = \int_{\mathbb{R}^d} f' M_0 dv' \quad \text{et} \quad \text{Ma} \rho' u' = \int_{\mathbb{R}^d} v' f' M_0 dv'. \quad (3.9)$$

La maxwellienne absolue apparaît maintenant comme un poids pour définir les moments de f' . Pour simplifier les notations qui vont suivre, nous noterons désormais $\langle \phi M_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(v') M_0(v') dv'$ pour toute fonction ϕ de v' . Ainsi, (3.9) peut s'écrire

$$\rho' = \langle f' M_0 \rangle \quad \text{et} \quad \rho' u' = \frac{1}{\text{Ma}} \langle v' f' M_0 \rangle. \quad (3.10)$$

3.3 Analyse asymptotique

Supposons maintenant que le nombre de Knudsen et le nombre de Mach sont tous deux petits (régime fluide et incompressible), et du même ordre : pour clarifier cette hypothèse fondamentale pour la suite, nous introduisons un petit paramètre ε et nous supposons $\text{Kn} = \text{Ma} = \varepsilon$. Par ailleurs, pour simplifier les notations dans la longue analyse qui va suivre, nous ne noterons plus les variables adimensionnées avec des primes ' : cette notation ne sera utilisée à nouveau que lorsque nous reviendrons aux variables dimensionnelles.

Avec cette hypothèse et ces notations, l'équation BGK linéarisée s'écrit

$$\partial_t f + \frac{1}{\varepsilon} v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon^2} (f_{eq} - f), \quad (3.11)$$

avec

$$f_{eq} = \rho + \varepsilon \rho u \cdot v, \quad (3.12)$$

et ρ et u sont définis par

$$\rho = \langle f M_0 \rangle \quad \text{et} \quad \rho u = \frac{1}{\varepsilon} \langle v f M_0 \rangle. \quad (3.13)$$

L'analyse asymptotique adéquate ici, comme pour toutes les équations cinétiques linéaires écrites avec cet adimensionnement (on parle d'échelle de *diffusion*), est celle du développement de Hilbert que nous présentons maintenant.

On va chercher une solution approchée de (3.11) sous la forme du développement en série

$$f = f_0 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \varepsilon^3 f_3 \dots \quad (3.14)$$

Tout d'abord, remarquons que si ce développement est possible, cela signifie que f tend vers f_0 quand ε tend vers 0. Or on voit facilement que (3.11) et (3.12) impliquent $f = \rho + O(\varepsilon)$, et donc que f tend vers la limite de sa densité que nous noterons ρ_0 . Ainsi, le premier terme de ce développement est nécessairement $f_0 = \rho_0$.

L'idée consiste ensuite à introduire ce développement dans (3.11) et à construire les différents termes f_k du développement de sorte que tous les facteurs des différentes puissances de ε s'annulent, du moins jusqu'à un certain ordre. Commençons par calculer le développement de f_{eq} en puissances de ε induit par (3.14). Naturellement, la définition (3.13) de ρ donne

$$\rho = \langle f M_0 \rangle = \left\langle \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k f_k M_0 \right\rangle = \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \langle f_k M_0 \rangle = \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \rho_k,$$

où l'on note $\rho_k = \langle f_k M_0 \rangle$. Ensuite, on note $U = \rho u$, et la relation (3.13) donne

$$U = \frac{1}{\varepsilon} \langle v f M_0 \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \left\langle v \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k f_k M_0 \right\rangle = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \langle v f_k M_0 \rangle = \frac{1}{\varepsilon} U_0 + U_1 + \varepsilon U_2 + \dots,$$

où l'on note $U_k = \langle v f_k M_0 \rangle$. Nous avons déjà remarqué que $f_0 = \rho_0$, ce qui implique $U_0 = \langle v \rho_0 M_0 \rangle = \langle v M_0 \rangle \rho_0 = 0$. Ainsi, la distribution d'équilibre f_{eq} peut s'écrire

$$\begin{aligned} f_{eq} &= \rho_0 + \varepsilon(\rho_1 + U_1 \cdot v) + \varepsilon^2(\rho_2 + U_2 \cdot v) + \dots \\ &= f_{eq,0} + \varepsilon f_{eq,1} + \varepsilon^2 f_{eq,2} + \dots, \end{aligned} \quad (3.15)$$

où $f_{eq,0} = \rho_0$ et $f_{eq,k} = \rho_k + U_k \cdot v$ pour tout $k \geq 1$.

Propriété 3.1. *Pour tout k , les distributions f_k et $f_{eq,k}$ ont mêmes moments d'ordre 0 et 1 :*

$$\langle f_k M_0 \rangle = \langle f_{eq,k} M_0 \rangle = \rho_k \quad \text{et} \quad \langle v f_k M_0 \rangle = \langle v f_{eq,k} M_0 \rangle = U_k.$$

Démonstration. Il suffit de remplacer $f_{eq,k}$ par sa définition dans les relations précédentes, et d'utiliser les intégrales gaussiennes :

$$\langle M_0 \rangle = 1, \quad \langle v M_0 \rangle = 0, \quad \langle v \otimes v M_0 \rangle = I, \quad (3.16)$$

qui sont démontrées dans l'annexe de la partie 1. \square

Nous sommes maintenant prêts pour identifier les différents termes f_k du développement de Hilbert : en injectant (3.14) et (3.15) dans (3.11) et en rassemblant les termes du même ordre en ε , on trouve

$$\begin{aligned} &\varepsilon^{-1} v \cdot \nabla_x f_0 + \varepsilon^0 (\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1) + \varepsilon (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2) + O(\varepsilon^2) \\ &= \varepsilon^{-2} (f_{eq,0} - f_0) + \varepsilon^{-1} (f_{eq,1} - f_1) + \varepsilon^0 (f_{eq,2} - f_2) + \varepsilon^1 (f_{eq,3} - f_3) + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

On cherche donc s'il est possible de construire f_0, f_1, f_2 , etc. pour que les facteurs de $\varepsilon^2, \varepsilon^{-1}, \varepsilon^0$, et ε s'annulent.

Termes en ε^{-2} . Ce terme est nul, puisque

$$f_0 = f_{eq,0} = \rho_0, \quad (3.17)$$

mais il faut noter que ρ_0 reste à déterminer.

Termes en ε^{-1} . On trouve

$$v \cdot \nabla_x f_0 = f_{eq,1} - f_1. \quad (3.18)$$

Comme $\langle (f_{eq,1} - f_1)M_0 \rangle = 0$ et $\langle v(f_{eq,1} - f_1)M_0 \rangle = 0$ (voir la propriété 3.1), cette équation admet une solution f_1 seulement si le membre de gauche satisfait les relations $\langle v \cdot \nabla_x f_0 M_0 \rangle = 0$ et $\langle v(v \cdot \nabla_x f_0)M_0 \rangle = 0$.

La première relation donne

$$0 = \langle v \cdot \nabla_x \rho_0 M_0 \rangle = \langle v M_0 \rangle \cdot \nabla_x \rho_0,$$

qui est nécessairement vérifiée puisque par parité de M_0 on a $\langle v M_0 \rangle = 0$. La deuxième donne

$$0 = \langle v(v \cdot \nabla_x \rho_0)M_0 \rangle = \langle v \otimes v M_0 \rangle \nabla_x \rho_0 = \nabla_x \rho_0$$

d'après (3.16). Ainsi, l'existence de f_1 impose une contrainte à ρ_0 qui doit être indépendant de x . Donc ρ_0 ne dépend que de t , et le plus simple est alors de choisir ρ_0 comme une constante : nous avons ainsi $\nabla_x \rho_0 = 0$ et $\partial_t \rho_0 = 0$. Plus précisément, puisque ρ_0 est adimensionnée, il est raisonnable de choisir $\rho_0 = 1$.

Enfin, nous pouvons alors déduire de (3.18), (3.17) et du résultat précédent l'expression suivante de f_1 :

$$\begin{aligned} f_1 &= f_{eq,1} - v \cdot \nabla_x \rho_0 \\ &= \rho_1 + U_1 \cdot v, \end{aligned} \quad (3.19)$$

où ρ_1 et U_1 restent à déterminer.

Termes en ε^0 . On trouve

$$\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1 = f_{eq,2} - f_2. \quad (3.20)$$

Nous utilisons à nouveau la propriété 3.1 qui assure que f_2 et $f_{eq,2}$ ont mêmes moments d'ordre 0 et 1 : cela montre que f_2 ne peut exister que si le membre de gauche de (3.20) satisfait les relations

$$\langle (\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1)M_0 \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle v(\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1)M_0 \rangle = 0.$$

Dans la première relation, on utilise le fait que ρ_0 est une constante ainsi que la relation (3.19) pour trouver

$$\begin{aligned} 0 &= \langle v \cdot \nabla_x f_1 M_0 \rangle = \nabla_x \cdot \langle v f_1 M_0 \rangle = \nabla_x \cdot \langle v(\rho_1 + U_1 \cdot v)M_0 \rangle \\ &= \nabla_x \cdot (\langle v M_0 \rangle \rho_1 + \langle v \otimes v M_0 \rangle U_1) = \nabla_x \cdot U_1, \end{aligned}$$

d'après (3.16). On trouve ainsi que U_1 est nécessairement à divergence nulle :

$$\nabla_x \cdot U_1 = 0. \quad (3.21)$$

Nous utilisons les mêmes arguments dans la deuxième relation, mais en utilisant cette fois la notation indicielle et la convention d'Einstein (qui veut que tout indice répété est supposé être sommé). Nous avons alors

$$\begin{aligned} 0 &= \langle v(v \cdot \nabla_x f_1) M_0 \rangle = \partial_{x_j} \langle v_i v_j f_1 M_0 \rangle = \partial_{x_j} \langle v_i v_j (\rho_1 + U_1 \cdot v) M_0 \rangle \\ &= \partial_{x_j} (\langle v_i v_j M_0 \rangle \rho_1 + \langle v_i v_j v_k M_0 \rangle U_{1,k}) = \partial_{x_j} \rho_1, \end{aligned}$$

où l'on a utilisé une autre intégrale gaussienne

$$\langle v_i v_j v_k M_0 \rangle = 0,$$

qui résulte d'un simple argument de parité de M_0 . On a donc trouvé la même relation pour ρ_1 que pour ρ_0 , et l'on choisira là aussi ρ_1 égal à une constante, qu'il est naturel de prendre égale à 0, puisque ρ_1 représente une perturbation de la densité.

Enfin, nous concluons cette étape avec l'expression correspondante de f_2 : puisque $f_0 = \rho_0$ et $f_1 = \rho_1 + U_1 \cdot v$ avec ρ_0 et ρ_1 constantes, il vient

$$\begin{aligned} f_2 &= f_{eq,2} - (\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1) \\ &= \rho_2 + U_2 \cdot v - v \cdot \nabla_x (U_1 \cdot v), \end{aligned} \quad (3.22)$$

où ρ_2 et U_2 restent à déterminer.

Termes en ε^1 . On suit exactement le même raisonnement qu'à l'étape précédente. On trouve

$$\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2 = f_{eq,3} - f_3. \quad (3.23)$$

Les contraintes de moments égaux pour $f_{eq,3}$ et f_3 donnent les deux relations

$$\langle (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2) M_0 \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle v (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2) M_0 \rangle = 0.$$

En remplaçant f_1 et f_2 par leurs expressions données dans (3.19) et (3.22), la première relation donne facilement $\nabla_x \cdot U_2 = 0$. La deuxième relation donne, en notation indicielle,

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_t \langle v_i f_1 M_0 \rangle + \partial_{x_j} \langle v_i v_j f_2 M_0 \rangle \\ &= \partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 - \partial_{x_j} \langle v_i v_j (v_k \partial_{x_k} (U_{1,l} v_l)) M_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Le dernier terme fait donc intervenir une intégrale gaussienne d'ordre 4 qui s'écrit

$$\partial_{x_j} \langle v_i v_j (v_k \partial_{x_k} (U_{1,l} v_l)) M_0 \rangle = \partial_{x_j} \langle v_i v_j v_k (\partial_{x_k} U_{1,l}) v_l M_0 \rangle.$$

On utilise ensuite la formule établie en annexe de la partie 1 pour obtenir

$$\langle v_i v_j v_k \partial_{x_k} U_{1,l} v_l M_0 \rangle = \partial_{x_j} U_{1,i} + \partial_{x_i} U_{1,j} + \delta_{ij} \partial_{x_k} U_{1,k}.$$

Ainsi, le dernier terme de (3.24) s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_{x_j} \langle v_i v_j (v_k \partial_{x_k} (U_{1,l} v_l)) M_0 \rangle &= \partial_{x_j} \partial_{x_j} U_{1,i} + \partial_{x_j} \partial_{x_i} U_{1,j} + \partial_{x_j} \delta_{ij} \partial_{x_k} U_{1,k} \\ &= \Delta_x U_1 + \nabla_x (\nabla_x \cdot U_1) + \nabla_x (\nabla_x \cdot U_1) = \Delta_x U_1, \end{aligned} \quad (3.25)$$

puisque $\nabla_x \cdot U_1 = 0$. Enfin, les relations (3.25) et (3.24) précédentes donnent

$$\partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 = \Delta U_1. \quad (3.26)$$

Nous pouvons aussi en déduire l'expression $f_3 = f_{eq,3} - (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2)$ qu'il n'est pas nécessaire de développer ici.

Résumé. Rappelons que nous souhaitons définir les distributions f_k pour que le développement de Hilbert (3.14) soit solution de l'équation (3.11). Nous avons obtenu les relations suivantes :

$$\begin{aligned} f_0 &= \rho_0 \\ f_1 &= \rho_1 + U_1 \cdot v \\ f_2 &= \rho_2 + U_2 \cdot v - v \cdot \nabla_x (U_1 \cdot v) \\ f_3 &= f_{eq,3} - (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2), \end{aligned}$$

où ρ_0 et ρ_1 sont deux constantes quelconques, ρ_2 et U_1 sont solutions du système de Stokes

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot U_1 &= 0 \\ \partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 &= \Delta U_1, \end{aligned}$$

U_2 vérifie $\nabla_x \cdot U_2 = 0$, et ρ_3 et U_3 sont indéterminés. Cela nous permet de définir la fonction $f_\varepsilon = f_0 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \varepsilon^3 f_3$, appelée développement de Hilbert à l'ordre 3. Nous vérifions maintenant a posteriori dans quelle mesure f_ε satisfait l'équation (3.11) : d'après la construction précédente, on a

$$\partial_t f_\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} v \cdot \nabla_x f_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} (f_{eq,\varepsilon} - f_\varepsilon) = O(\varepsilon^2).$$

Donc f_ε satisfait l'équation (3.11) à l'ordre deux près par rapport à ε . Si f_ε et f vérifient en outre la même donnée initiale et les mêmes conditions aux limites (à $O(\varepsilon^2)$ au moins), alors il semble clair que f_ε et f sont égales à $O(\varepsilon^2)$ près (ce qui peut se montrer rigoureusement), et nous avons donc construit une approximation de f .

En ce qui concerne la donnée initiale, nous pouvons constater que le choix des constantes $\rho_0 = 1$ et $\rho_1 = 0$ permet d'avoir une bonne approximation de la donnée initiale $f(t = 0)$. Supposons en effet que la donnée initiale soit à l'équilibre, c.-à-d.

$$f(t = 0, x, v) = f_{eq}(t = 0, x, v) = \rho(t = 0) + \varepsilon U(t = 0) \cdot v,$$

où $\rho(t = 0)$ et $U(t = 0)$ sont deux constantes données. Si la densité de référence ρ_* est donnée par la densité initiale, on a donc, en variables adimensionnées $\rho(t = 0) = 1$. Par ailleurs, à l'instant initial, notre approximation vaut $f_\varepsilon(t = 0) = \rho_0 + \varepsilon \rho_1 + \varepsilon U_1(t = 0) \cdot v + O(\varepsilon^2)$.

Avec le choix des constantes ρ_0 et ρ_1 fait ci-dessus, si en plus nous imposons à U_1 la valeur initiale $U_1(t=0) = U(t=0)$, alors on a $f_\varepsilon(t=0) = \rho(t=0) + \varepsilon U(t=0) \cdot v + O(\varepsilon^2) = f(t=0) + O(\varepsilon^2)$, et l'ordre d'approximation est bien préservé à l'instant initial.

Il reste enfin à définir les fonctions U_2 , ρ_3 et U_3 . L'analyse précédente n'impose rien sur ces fonctions (hormis $\nabla_x \cdot U_2 = 0$), et rien ne nous empêche de poser tout simplement $U_2 = 0$, $\rho_3 = 0$ et $U_3 = 0$ en tout temps et tout point de l'espace.

En résumé, la fonction $f_\varepsilon = \rho_0 + \varepsilon U_1 \cdot v + \varepsilon^2(\rho_2 - v \cdot \nabla_x(U_1 \cdot v)) - \varepsilon^3(\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2)$ est solution de l'équation BGK linéarisée (3.11) à $O(\varepsilon^2)$ près si $\rho_0 = \rho(t=0)$ et si (U_2, ρ_2) est solution du problème de Stokes

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot U_1 &= 0 \\ \partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 &= \Delta U_1, \end{aligned} \tag{3.27}$$

avec la donnée initiale $U_1(t=0) = U(t=0)$.

Que peut-on en déduire sur la limite de f quand ε tend vers 0? Pour la densité, nous avons

$$\begin{aligned} \rho &= \langle f M_0 \rangle = \langle f_\varepsilon M_0 \rangle + O(\varepsilon^2) \\ &= \rho_0 + O(\varepsilon^2) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho_0. \end{aligned}$$

Pour l'impulsion, nous avons

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{\varepsilon} \langle v f M_0 \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \langle v (f_\varepsilon + O(\varepsilon^2)) M_0 \rangle \\ &= U_1 + O(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} U_1. \end{aligned}$$

En conclusion, nous avons bien montré que l'impulsion de la solution de l'équation BGK linéarisée (3.11) converge, quand ε tend vers 0, vers la solution du problème de Stokes, où ρ_2 joue le rôle de pression.

Remarque 3.1. Il est possible de mener cette même analyse un ordre plus loin : on peut alors construire une approximation d'ordre trois qui permet de montrer que la perturbation de ρ autour de sa limite ρ_0 converge vers ρ_2 , c'est-à-dire :

$$\frac{(\rho - \rho_0)}{\varepsilon^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho_2.$$

Remarque 3.2. Nous n'avons pas parlé ici du problème d'approximation dû aux conditions aux limites. Cela est beaucoup plus délicat et sera abordé uniquement d'un point de vue numérique dans la section 6.

3.4 Retour aux variables dimensionnelles

Il est intéressant pour la suite de réinterpréter le résultat de la section précédente en variables dimensionnelles : le but de cette section est essentiellement d'établir une relation entre le temps de relaxation de l'équation BGK linéarisée (3.4) et la viscosité cinématique des équations de Stokes.

Nous sommes partis de la solution f de l'équation BGK linéarisée (3.4) et des variables macroscopiques

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} f M[1, 0, T] dv \quad \text{et} \quad u = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^d} v f M[1, 0, T] dv.$$

Nous avons défini la distribution adimensionnée f' solution de (3.11), avec les variables macroscopiques correspondantes

$$\rho' = \langle f' M_0 \rangle \quad \text{et} \quad u' = \frac{1}{\rho' \varepsilon} \langle v' f' M_0 \rangle.$$

Par construction, les variables macroscopiques dimensionnelles et adimensionnées sont liées par

$$\rho = \rho_* \rho' \quad \text{et} \quad u = u_* u'. \quad (3.28)$$

Nous avons ensuite montré que ρ' et u' admettent les limites suivantes quand ε tend vers 0 :

$$\rho' \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho'_0 \quad \text{et} \quad u' = U'/\rho' \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u'_1 = U'_1/\rho'_0. \quad (3.29)$$

En divisant par ρ'_0 les équations de Stokes (3.27) satisfaites par U'_1 , on trouve que u'_1 est solution des équations

$$\begin{aligned} \nabla_{x'} \cdot u'_1 &= 0 \\ \partial_{t'} u'_1 + \nabla_{x'} P'_2 &= \Delta_{x'} u'_1, \end{aligned} \quad (3.30)$$

avec la pression adimensionnée $P'_2 = \rho'_2/\rho'_0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\rho'/\rho'_0 - 1}{\varepsilon^2}$. Ces équations ne sont autres que les équations de Stokes adimensionnées (2.3) avec le nombre de Reynolds $\text{Re} = 1$ (voir la remarque 3.4 au sujet de cette relation en fin de chapitre).

Nous cherchons à présent à calculer les limites des quantités macroscopiques non adimensionnées ρ et u . D'après (3.28) et (3.29), on a

$$\rho \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho_0 = \rho_* \rho'_0 \quad \text{et} \quad u \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u_1 = u_* u'_1. \quad (3.31)$$

On obtient l'équation sur u_1 en revenant aux variables dimensionnelles dans (3.30) :

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot u_1 &= 0 \\ \partial_t u_1 + \nabla_x P_2 &= \frac{x_*^2}{t_*} \Delta_x u_1, \end{aligned} \quad (3.32)$$

avec la pression non adimensionnée $P_2 = u_*^2 P'_2$. On voit donc que la vitesse macroscopique de l'équation BGK linéarisée tend vers une solution des équations de Stokes avec la viscosité cinématique

$$\nu = \frac{x_*^2}{t_*}$$

Une expression de ν en fonction du temps de relaxation τ s'obtient en remarquant que l'hypothèse $\text{Kn} = \text{Ma}$ implique que la vitesse de référence u_* dépend de τ , x_* et c_s : en effet

$$\text{Kn} = \text{Ma} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\tau c_s}{x_*} = \frac{u_*}{c_s} \quad \Leftrightarrow \quad u_* = \frac{\tau c_s^2}{x_*}. \quad (3.33)$$

Ainsi, le temps caractéristique t_* vaut $t_* = x_*/u_* = x_*^2/(\tau c_s^2)$, et on a donc l'expression de la viscosité cinématique de Stokes en fonction du temps de relaxation de BGK :

$$\nu = c_s^2 \tau.$$

La conclusion de cette longue analyse est la suivante : on peut approcher la solution u des équations de Stokes (2.2) par la vitesse $u = \int_{\mathbb{R}^d} v f M[1, 0, T] dv / \int_{\mathbb{R}^d} f M[1, 0, T] dv$, où f est solution de l'équation BGK linéarisée (3.4), sous les conditions suivantes :

$$\tau = \nu/c_s^2, \quad (3.34)$$

et

$$\text{Ma} = u/c_s \ll 1 \quad \text{et} \quad \text{Kn} = \nu/(c_s x_*) \ll 1,$$

où la température T de la maxwellienne $M[1, 0, T]$ est telle que $c_s = \sqrt{RT}$. L'idée de base des méthodes LBM est d'approcher numériquement l'équation BGK linéarisée (3.4) pour obtenir une approximation des équations de Stokes (précise à $O(\text{Ma}^2)$ près). Nous expliquons dans la suite les techniques d'approximation qui permettent d'obtenir une méthode simple et rapide.

Complément sur la pression. La présentation précédente explique comment approcher la vitesse u des équations de Stokes par la résolution de l'équation BGK linéarisée, mais nous n'avons pas expliqué comment obtenir une approximation de la pression. Pour cela revenons à la définition de la pression non adimensionnée P_2 qui apparaît dans les équations limites de Stokes (3.32) : l'analyse précédente donne $P_2 = u_*^2 P'_2$, et rappelons que $P'_2 = \rho'_2/\rho'_0$. Comme on a choisi $\rho'_0 = 1$ (voir page 15), alors $P'_2 = \rho'_2$. En outre, rappelons que la densité adimensionnée vérifie le développement $\rho' = 1 + \varepsilon^2 \rho'_2 + O(\varepsilon^3)$ (où l'on tient compte du fait que ρ'_0 et ρ'_1 ont été choisies égales à 1 et 0, respectivement). Par conséquent, $\rho'_2 = \frac{\rho' - 1}{\varepsilon^2} + O(\varepsilon)$, et l'on peut donc approcher la pression adimensionnée P'_2 par

$$P'_2 \approx \frac{\rho' - 1}{\varepsilon^2},$$

en commettant une erreur d'ordre 1 par rapport à ε . Comme P'_2 est en fait définie à une constante près (si le couple (u'_1, P'_2) est solution des équations de Stokes, alors $(u'_1, P'_2 + cte)$ aussi, quelle que soit la constante), alors on peut supprimer la constante dans la relation précédente pour obtenir une autre approximation :

$$P'_2 \approx \frac{\rho'}{\varepsilon^2}.$$

Par conséquent, la pression non adimensionnée s'approche par

$$P_2 = u_*^2 P'_2 \approx u_*^2 \frac{\rho'}{\varepsilon^2}.$$

Remplaçons maintenant la densité adimensionnée ρ' par ρ/ρ_* pour obtenir l'approximation

$$P_2 \approx u_*^2 \frac{\rho}{\varepsilon^2 \rho_*},$$

Enfin, rappelons que $\varepsilon = \text{Kn} = \text{Ma} = u_*/c_s$, ce qui donne

$$P_2 \approx c_s^2 \rho / \rho_*,$$

et la pression dynamique correspondante $p_2 = \rho_* P_2$, qui s'exprime en pascal, vaut

$$p_2 \approx c_s^2 \rho,$$

où ρ est la densité associée à f , solution de l'équation BGK linéarisée (3.4).

Remarque 3.3. La relation $\tau = \nu/c_s^2$ s'écrit aussi $\tau = \mu/(\rho RT)$ (car $\nu = \mu/\rho$ et $c_s = \sqrt{RT}$), et on retrouve ainsi la relation obtenue par le développement de Chapman-Enskog de l'équation BGK non linéaire (voir partie 1, chapitre 10).

Remarque 3.4. On peut se demander pourquoi l'équation de Stokes (adimensionnée) obtenue comme limite de l'équation BGK linéarisée fait apparaître un nombre de Reynolds égal à 1. Une première explication se trouve dans la relation connue sous le nom de relation de von Karman qui s'écrit

$$\text{Ma} = \text{Kn Re}, \tag{3.35}$$

à une constante multiplicative près, selon la façon dont on définit le nombre de Knudsen et le nombre de Mach. En effet, on a d'une part $\text{Ma} = u_*/c_s$, et d'autre part $\text{Kn} = \lambda/x_* = c_s \tau/x_*$ et $\text{Re} = u_* x_*/\nu$. Il suffit alors de rappeler la relation $\tau = \nu/c_s^2$ pour conclure. Par conséquent, il est maintenant clair que l'hypothèse $\text{Ma} = \text{Kn}$ implique $\text{Re} = 1$.

Mais comment se fait-il que l'adimensionnement des équations de Stokes du chapitre 2 donne alors un nombre de Reynolds quelconque $\text{Re} = u_* x_*/\nu_*$? Tout simplement car dans cet adimensionnement, la vitesse macroscopique de référence est arbitraire, alors que dans notre analyse asymptotique de l'équation BGK, l'hypothèse $\text{Ma} = \text{Kn}$ impose la vitesse de référence $u_* = \tau c_s^2/x_*$.

Chapitre 4

Discrétisation en vitesse : le modèle D2Q9

Dans cette section, nous montrons comment discrétiser correctement l'équation BGK linéarisée (3.4) par rapport à la variable de vitesse avec un nombre de vitesses minimal. Supposons connue une grille de vitesses de points v_q . On définit ainsi $f_q(t, x)$ une approximation de $f(t, x, v_q)$ solution de l'équation BGK linéarisée discrète

$$\partial_t f_q + v_q \cdot \nabla_x f_q = \frac{1}{\tau} (f_{eq,q} - f_q), \quad (4.1)$$

où $f_{eq,q}$ est la distribution d'équilibre linéarisée discrète définie par

$$f_{eq,q} = \rho \left(1 + \frac{u \cdot v_q}{c_s^2} \right), \quad (4.2)$$

et où les moments ρ et ρu sont obtenus par une formule de quadrature appliquées aux relations (3.3) :

$$\rho = \sum_q f_q \omega_q \quad \text{et} \quad \rho u = \sum_q v_q f_q \omega_q. \quad (4.3)$$

Les coefficients ω_q sont les poids de la formule de quadrature.

Est-il possible qu'un tel modèle puisse lui aussi être asymptotiquement équivalent aux équations de Stokes ? La réponse est oui : en suivant pas à pas l'analyse asymptotique faite section 3.3, on peut voir que toutes les étapes sont encore valables en remplaçant les intégrales adimensionnées $\langle \phi M_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(v') M_0(v') dv'$ par les formules de quadratures $\sum_q \phi(v'_q) \omega_q$, à

la condition que celles-ci satisfasse exactement les relations

$$\begin{aligned}
\sum_q \omega_q &= \langle M_0 \rangle = 1 \\
\sum_q v'_q \omega_q &= \langle v' M_0 \rangle = 0 \\
\sum_q v'_{i,q} v'_{j,q} \omega_q &= \langle v'_i v'_j M_0 \rangle = \delta_{ij} \\
\sum_q v'_{i,q} v'_{j,q} v'_{k,q} \omega_q &= \langle v'_j v'_j v'_k M_0 \rangle = 0 \\
\sum_q v'_{i,q} v'_{j,q} v'_{k,q} v'_{l,q} \omega_q &= \langle v'_j v'_j v'_k v'_l M_0 \rangle = \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}.
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Ces relations constituent des contraintes sur la formule de quadrature, et donc sur les poids et les points qui sont choisis.

À partir de maintenant, nous nous restreindrons aux écoulements bidimensionnels, et nous supposons donc $d = 2$. En supposant la grille de vitesse cartésienne et centrée en 0, il est possible de réduire fortement le nombre des contraintes ci-dessus : comme toutes les fonctions à intégrer sont des produits tensoriels de fonctions à une variable, on peut se ramener à la détermination d'une formule de quadrature à d'ordre 4. Nous cherchons donc les $(n + 1)$ points ζ_q et les $(n + 1)$ poids λ_q tels que la formule

$$\sum_{q=0}^n \phi(\zeta_q) \lambda_q \quad \text{approche} \quad \int_{\mathbb{R}} \phi(\zeta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}\right) d\zeta$$

pour toute fonction ϕ , de sorte que la formule soit exacte pour tous les polynômes en ζ de degré inférieur ou égal à 4. Autrement dit, il faut que la formule satisfasse

$$\sum_{q=0}^n \zeta_q^k \lambda_q = \int_{\mathbb{R}} \zeta^k \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}\right) d\zeta$$

pour k de 0 à 4. La solution est bien connue : il s'agit de la formule de Gauss-Hermite à 3 points, dont les points et les poids sont $(\zeta_0, \zeta_1, \zeta_2) = (-\sqrt{3}, 0, \sqrt{3})$ et $(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2) = (\frac{1}{6}, \frac{4}{6}, \frac{1}{6})$. Par construction, cette formule est en fait d'ordre 5.

La formule bidimensionnelle associée s'obtient en tensorisant la formule précédente, et l'on trouve une formule à 9 points, qui sont habituellement numérotés de 0 à 8 comme indiqué dans la figure 4.1.

Ces points sont

$$v'_q = \sqrt{3} \begin{cases} 0 & \text{pour } q = 0 \\ (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1) & \text{pour } q = 1, 2, 3, 4 \\ (1, 1), (-1, 1), (-1, 0), (-1, -1), (1, -1) & \text{pour } q = 5, 6, 7, 8 \end{cases} ,$$

alors que les poids sont

$$\omega_q = \begin{cases} 4/9 & \text{pour } q = 0 \\ 1/9 & \text{pour } q = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36 & \text{pour } q = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

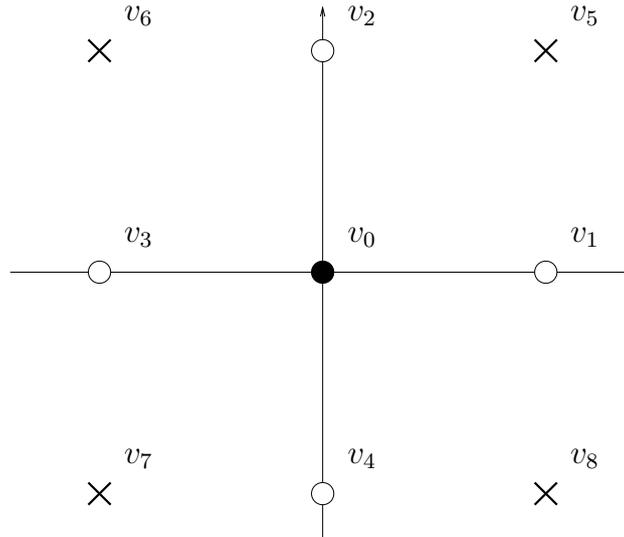


FIGURE 4.1 – Vitesses discrètes du modèle D2Q9

En variables non adimensionnées, les vitesses discrètes correspondantes s'obtiennent en multipliant les vitesses adimensionnées par c_s , et l'on trouve

$$v_q = c_s \sqrt{3} \begin{cases} 0 & \text{pour } q = 0 \\ (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1) & \text{pour } q = 1, 2, 3, 4 \\ (1, 1), (-1, 1), (-1, 0), (-1, -1), (1, -1) & \text{pour } q = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

alors que les poids sont inchangés.

Exercice 4.1. Vérifier que la formule de quadrature $\sum_q \phi(v'_q) \omega_q$ D2Q9 obtenue ci-dessus satisfait bien les contraintes (4.4).

Chapitre 5

Discrétisation en temps et espace : méthode de Boltzmann sur réseau

5.1 Discrétisation

La discrétisation en temps et en espace du modèle (4.1) se fait par une approche lagrangienne. Ce modèle s'écrit de façon équivalente

$$\frac{d}{dt}f_q(t, x + v_q t) = \frac{1}{\tau}(f_{eq,q}(t, x + v_q t) - f_q(t, x + v_q t)),$$

et après intégration entre t et $t + \Delta t$, on trouve

$$f_q(t + \Delta t, x + v_q(t + \Delta t)) = f_q(t, x + v_q t) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\tau}(f_{eq,q}(s, x + v_q s) - f_q(t, x + v_q s)) ds.$$

Après la translation $x \mapsto x - v_q t$, on obtient

$$f_q(t + \Delta t, x + v_q \Delta t) = f_q(t, x) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\tau}(f_{eq,q}(s, x - v_q(t - s)) - f_q(t, x - v_q(t - s))) ds.$$

En approchant l'intégrale par la formule du rectangle à gauche, on trouve l'approximation

$$f_q(t + \Delta t, x + v_q \Delta t) \approx f_q(t, x) + \Delta t \frac{1}{\tau}(f_{eq,q}(t, x) - f_q(t, x)). \quad (5.1)$$

La seconde idée majeure des méthodes LBM est alors de se donner une grille cartésienne en espace à pas constant Δx , telle que pour tout point x de la grille, le point $x + v_q \Delta t$ soit encore un point de la grille. L'approximation ci-dessus permet ainsi de faire évoluer les valeurs de f_q sur la grille sans aucune interpolation, ce qui donne une grande rapidité à la méthode.

Plus précisément, notons $x_{i,j} = (i\Delta x, j\Delta x)$ un point de la grille. On souhaite que pour tout couple (i, j) et pour tout entier q , il existe un autre couple (i', j') tel que l'on ait $x_{i,j} + v_q \Delta t = x_{i',j'}$. Pour simplifier ce problème, on va même demander que le point $x_{i',j'}$ soit un point immédiatement voisin de $x_{i,j}$. En tenant compte du fait que les vitesses v_q

sont toutes disposées comme sur la figure 4.1, on voit facilement que cela est possible si, et seulement si, Δt et Δx sont liés par la relation

$$\Delta x = c\Delta t \quad (5.2)$$

où $c = c_s\sqrt{3}$ est appelée vitesse du son du réseau. Il suffit par exemple de considérer la vitesse $v_1 = c_s\sqrt{3}(1, 0)$: cette vitesse étant horizontale dirigée vers la droite, on souhaite alors que $x_{i,j} + v_1\Delta t = x_{i+1,j}$, ce qui équivaut à $i\Delta x + c_s\sqrt{3}\Delta t = (i+1)\Delta x$. Cela donne bien la relation annoncée, et on peut vérifier qu'il en est de même avec les 6 autres vitesses non nulles.

Pour finir, on définit donc $f_{i,j,q}^n$ l'approximation de $f_q(n\Delta t, x_{i,j})$ en remplaçant la formule approchée (5.1) par la relation exacte

$$f_{i_q,j_q,q}^{n+1} = f_{i,j,q}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,q}^n - f_{i,j,q}^n), \quad (5.3)$$

où $(i_q, j_q) = (i, j) + v_q/(c_s\sqrt{3})$ est le couple d'indices du point de la grille $x_{i,j} + v_q\Delta t$. Mais il est plus clair d'écrire directement les 9 relations correspondantes :

$$\begin{aligned} f_{i,j,0}^{n+1} &= f_{i,j,0}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,0}^n - f_{i,j,0}^n), \\ f_{i+1,j,1}^{n+1} &= f_{i,j,1}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,1}^n - f_{i,j,1}^n), \\ f_{i,j+1,2}^{n+1} &= f_{i,j,2}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,2}^n - f_{i,j,2}^n), \\ f_{i-1,j,3}^{n+1} &= f_{i,j,3}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,3}^n - f_{i,j,3}^n), \\ f_{i,j-1,4}^{n+1} &= f_{i,j,4}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,4}^n - f_{i,j,4}^n), \\ f_{i+1,j+1,5}^{n+1} &= f_{i,j,5}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,5}^n - f_{i,j,5}^n), \\ f_{i-1,j+1,6}^{n+1} &= f_{i,j,6}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,6}^n - f_{i,j,6}^n), \\ f_{i-1,j-1,7}^{n+1} &= f_{i,j,7}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,7}^n - f_{i,j,7}^n), \\ f_{i+1,j-1,8}^{n+1} &= f_{i,j,8}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,8}^n - f_{i,j,8}^n), \end{aligned}$$

où la fonction d'équilibre vaut

$$f_{eq,i,j,q}^n = \rho_{i,j}^n \left(1 + \frac{u_{i,j}^n \cdot v_q}{c_s^2}\right),$$

et les moments valent

$$\rho_{i,j}^n = \sum_{q=0}^9 f_{i,j,q}^n \omega_q \quad \text{et} \quad \rho_{i,j}^n u_{i,j}^n = \sum_{q=0}^9 v_q f_{i,j,q}^n \omega_q. \quad (5.4)$$

Cette méthode s'interprète donc comme une méthode particulière sur réseau : on fait se déplacer des particules de noeuds en noeuds, et on tient compte d'une interaction entre ces particules par le terme de relaxation. Grâce à l'utilisation de ce réseau, la phase de transport est faite par de simples translation de tableau, contrairement à la plupart des méthodes usuelles qui nécessitent toujours une part d'interpolation (différences finies, volumes finis, éléments finis). C'est principalement cet aspect qui donne une grande rapidité à la méthode.

Cependant, le fait d'avoir discrétisé le temps et l'espace nécessite de revoir la relation (3.34) : celle-ci doit en effet être modifiée pour tenir compte de la diffusion numérique engendrée par le schéma, comme nous le montrons ci-dessous.

5.2 Analyse

Comme pour l'analyse de convergence de l'équation BGK vers les équations de Stokes, nous commençons par une adimensionnalisation, en utilisant les mêmes grandeurs caractéristiques. Le pas de la grille cartésienne adimensionnée est $\Delta x' = \Delta x/x_*$, le pas de temps est $\Delta t' = \Delta t/t_*$ où nous rappelons que $t_* = x_*/u_*$, avec u_* la vitesse caractéristique. Les vitesses discrètes adimensionnées sont $v'_q = v_q/c_s$. Nous noterons $f'_{i,j,q} = f_{i,j,q}/\rho_*$ la distribution adimensionnée : celle-ci est censée approcher $f'(n\Delta t', i\Delta x', j\Delta x', v'_q)$. Enfin, notons que les grandeurs macroscopiques adimensionnées sont

$$\rho'_{i,j} = \sum_{q=0}^9 f'_{i,j,q} \omega_q \quad \text{et} \quad \varepsilon \rho'_{i,j} u'_{i,j} = \sum_{q=0}^9 v'_q f'_{i,j,q} \omega_q.$$

Avec ces nouvelles variables, le schéma s'écrit

$$f'_{i_q,j_q,q}{}^{m+1} = f'_{i,j,q}{}^m + \Delta t' \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq,i,j,q}{}^n - f'_{i,j,q}{}^n), \quad (5.5)$$

où (i_q, j_q) est le couple d'indices du point de la grille $x'_{i,j} + v'_q \frac{\Delta t'}{\varepsilon}$.

Nous devons ensuite faire une analyse de consistance de ce schéma. Nous considérons tout d'abord une fonction f' qui vérifie la relation (5.5) de façon exacte en tout point de discrétisation, soit

$$f'(t' + \Delta t', x' + v' \frac{\Delta t'}{\varepsilon}, v') = f'(t', x', v') + \Delta t' \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq}(t', x', v') - f(t', x', v')).$$

Nous faisons ensuite un développement de Taylor de cette relation autour du point (t', x') en supposant $\Delta t'$ et $\Delta x'$ petits. Pour rendre ce développement plus lisible, faisons apparaître $\Delta x'$ en notant que d'après (5.2) et l'adimensionnement choisi, on a

$$\Delta t' = \frac{\Delta t}{t_*} = \frac{\Delta x/c}{t_*} = \frac{\Delta x/c}{x_*/u_*} = \frac{u_*}{c_s} \frac{\Delta x'}{\sqrt{3}} = \text{Ma} \frac{\Delta x'}{\sqrt{3}} = \varepsilon \frac{\Delta x'}{c'},$$

où $c' = \sqrt{3}$ est la vitesse du son du réseau adimensionnée. On a alors

$$f'(t' + \Delta t', x' + v' \frac{\Delta x'}{c'}, v') = f'(t', x', v') + \Delta t' \frac{1}{\varepsilon^2 \tau'} (f'_{eq}(t', x', v') - f(t', x', v')).$$

En divisant par $\Delta t'$ et en développant le premier terme de cette relation à l'ordre 4, nous obtenons alors :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Delta t'} \left(f' + \Delta t' \partial_{v'} f' + \frac{\Delta t'^2}{2} \partial_{v'v'} f' + \frac{\Delta t'^3}{6} \partial_{v'v'v'} f' \right. \\
& + \Delta x' \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{\Delta x'^2}{2} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \frac{\Delta x'^3}{6} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + \Delta t' \Delta x' \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{v'} f' \\
& + \frac{\Delta t'^2 \Delta x' v'}{2 c'} \cdot \partial_{v'v'} \nabla_{x'} f' + \frac{\Delta t' \Delta x'^2}{2} D_{x'}^2 \partial_{v'} f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& \left. + O(\Delta t'^4) + O(\Delta t'^3 \Delta x') + O(\Delta t'^2 \Delta x'^2) + O(\Delta t' \Delta x'^3) + O(\Delta x'^4) - f' \right) \\
& = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f').
\end{aligned}$$

Dans ce développement, nous avons noté $D_{x'}^2$ et $D_{x'}^3$ les dérivées d'ordre 2 et 3 par rapport à x , de sorte que pour toute fonction ϕ de x , le développement de Taylor de ϕ à l'ordre 4 s'écrit $\phi(x+h) = \phi(x) + \nabla_x \phi(x) \cdot h + D_x^2 \phi(x)(h, h) + D_x^3 \phi(x)(h, h, h) + O(h^4)$. D'après la remarque précédente, nous pouvons remplacer tous les termes en $\Delta x'/\Delta t'$ par c'/ε , et nous trouvons

$$\begin{aligned}
& \partial_{v'} f' + \frac{\Delta t'}{2} \partial_{v'v'} f' + \frac{\Delta t'^2}{6} \partial_{v'v'v'} f' \\
& + \frac{v'}{\varepsilon} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{c' \Delta x'}{2\varepsilon} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \frac{\Delta x'^2 c'}{6\varepsilon} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + \Delta x' \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{v'} f' \\
& + \frac{\Delta t' \Delta x' v'}{2 c'} \cdot \partial_{v'v'} \nabla_{x'} f' + \frac{\Delta x'^2}{2} D_{x'}^2 \partial_{v'} f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + O(\Delta t'^3) + O(\Delta t'^2 \Delta x') + O(\Delta t' \Delta x'^2) + O(\Delta x'^3) + O(\Delta x'^3 c'/\varepsilon) \\
& = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f').
\end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à faire le développement de Hilbert sur cette relation pour vérifier que l'on obtient bien les équations de Stokes quand ε tend vers 0. Il y a cependant un point délicat à prendre en compte : dans cette analyse, on doit considérer la relation $\Delta t' = \varepsilon \Delta x'/c'$ qui montre que $\Delta t'$, $\Delta x'$ et ε sont liés. On ne peut donc faire tendre ε vers 0 en considérant $\Delta t'$ et $\Delta x'$ comme des paramètres constants. Nous avons déjà fait cette remarque pour éliminer les termes en $\Delta x'/\Delta t'$ dans le développement de Taylor précédent, mais il faut aller plus loin. En fait, il est naturel de supposer que $\Delta x' = \varepsilon$. En effet, cela est équivalent à $\Delta x = \varepsilon x_*$, c'est-à-dire que le pas de la grille est de l'ordre du libre parcours moyen : on a discrétisé l'équation BGK à l'échelle cinétique. Ainsi, la relation $\Delta t' = \varepsilon \Delta x'/c'$ implique $\Delta t' = \varepsilon^2/c'$.

Le développement de Taylor précédent s'écrit maintenant

$$\begin{aligned}
& \partial_{v'} f' + \frac{\varepsilon^2}{2c'} \partial_{v'v'} f' + \frac{\varepsilon^4}{6c'^2} \partial_{v'v'v'} f' \\
& + \frac{v'}{\varepsilon} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \frac{\varepsilon c'}{6} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + \varepsilon \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{v'} f' \\
& + \frac{\varepsilon^3}{2c'} \frac{v'}{c'} \cdot \partial_{v'v'} \nabla_{x'} f' + \frac{\varepsilon^2}{2} D_{x'}^2 \partial_{v'} f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + O(\varepsilon^6) + O(\varepsilon^5) + O(\varepsilon^4) + O(\varepsilon^3) + O(\varepsilon^2) \\
& = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f').
\end{aligned}$$

Finalement, il s'agit d'un développement à l'ordre deux en ε seulement, et nous avons donc

$$\begin{aligned}
& \partial_{v'} f' + \frac{v'}{\varepsilon} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + \frac{\varepsilon c'}{6} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \varepsilon \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{v'} f' + O(\varepsilon^2) \\
& = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f').
\end{aligned}$$

Nous pouvons à présent reprendre les différentes étapes du développement de Hilbert détaillées section 3.3. On voit facilement que les résultats ne changent que pour la dernière étape, c'est-à-dire celle concernant les termes en ε^1 . Ces termes donnent la relation (3.23) avec un terme en plus :

$$\partial_{v'} f'_1 + v' \cdot \nabla_{x'} f'_2 + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) = f'_{eq,3} - f'_3. \quad (5.6)$$

Les contraintes de moments égaux pour $f'_{eq,3}$ et f'_3 donnent les deux relations

$$\begin{aligned}
& \left\langle \left(\partial_{v'} f'_1 + v \cdot \nabla_{x'} f'_2 + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \right) M_0 \right\rangle = 0, \\
& \langle v (\partial_{v'} f'_1 + v \cdot \nabla_{x'} f'_2 + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right)) M_0 \rangle = 0.
\end{aligned}$$

Sachant que $f'_1 = \rho'_1 + U'_1 \cdot v$ avec ρ'_1 constant et $\nabla_{x'} \cdot U'_1 = 0$ et que $f'_2 = \rho'_2 + U'_2 \cdot v - v \cdot \nabla_{x'} (U'_1 \cdot v)$, on peut réduire ces deux relations. La première donne toujours $\nabla_{x'} \cdot U'_2 = 0$. Pour la deuxième, on peut réutiliser les calculs déjà fait pour trouver

$$\partial_{v'} U'_1 + \nabla_{x'} \rho'_2 - \Delta_{x'} U'_1 + \langle v' \left(\frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) M_0 \right) \rangle = 0.$$

On retrouve donc l'équation d'évolution de Stokes de la vitesse, mais avec un terme supplémentaire, due à la discrétisation en temps et en espace. Pour calculer ce terme, passons en

notation indicielle pour trouver

$$\begin{aligned}
\langle v(\frac{c'}{2}D_{x'}^2 f_1'(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'})M_0) \rangle &= \frac{1}{2c'} \langle v'_i \partial_{x'_k} \partial_{x'_l} f_1' v'_k v'_l M_0 \rangle \\
&= \frac{1}{2c'} \langle v'_i \partial_{x'_k} \partial_{x'_l} (U'_1 \cdot v') v'_k v'_l M_0 \rangle \\
&= \frac{1}{2c'} \langle v'_i \partial_{x'_k} \partial_{x'_l} U'_{j,1} v'_j v'_k v'_l M_0 \rangle \\
&= \frac{1}{2c'} \langle v'_i v'_j v'_k v'_l M_0 \rangle \partial_{x'_k} \partial_{x'_l} U'_{j,1} \\
&= \frac{1}{2c'} \Delta_{x'} U'_1,
\end{aligned}$$

en utilisant à nouveau la formule établie dans l'annexe de la partie 1 . Ainsi, le terme supplémentaire ne fait que modifier les équations de Stokes à travers la valeur de la viscosité :

$$\partial_t U'_1 + \nabla_{x'} \rho'_2 = (1 - \frac{1}{2c'}) \Delta_{x'} U'_1.$$

Nous revenons ensuite aux variables dimensionnelles (voir la section 3.4) pour trouver les équations

$$\begin{aligned}
\nabla_x \cdot u_1 &= 0 \\
\partial_t u_1 + \nabla_x P_2 &= \nu \Delta_x u_1,
\end{aligned}$$

où la viscosité vaut $\nu = \frac{x_*^2}{t_*} (1 - \frac{1}{2c'})$. Pour retrouver la forme habituellement donnée dans la littérature LBM, rappelons tout d'abord la relation $\frac{x_*^2}{t_*} = c_s^2 \tau$ déjà obtenue section 3.4. Ainsi, la viscosité s'écrit $\nu = c_s^2 (\tau - \frac{\tau}{2c'})$. Par rapport aux équations de Stokes obtenues comme limite asymptotique du modèle BGK linéarisé (voir section 3.4), la viscosité est donc modifiée par le facteur $\frac{\tau}{2c'}$. Ce facteur peut être ré-écrit différemment en remarquant que l'hypothèse $\Delta x' = \varepsilon$ et la relation de réseau $\Delta x = c \Delta t$ impliquent $\frac{c \Delta t}{x_*} = \frac{\tau c_s}{x_*}$, et donc $c \Delta t = \tau c_s$, ce qui s'écrit encore $\Delta t = \frac{\tau}{c}$. Par conséquent, la viscosité s'écrit maintenant $\nu = c_s^2 (\tau - \frac{\Delta t}{2})$.

En conclusion, nous avons donc montré que le schéma LBM D2Q9 (5.3) est consistant avec les équations de Stokes

$$\begin{aligned}
\nabla_x \cdot u_1 &= 0 \\
\partial_t u_1 + \nabla_x P_2 &= \nu \Delta_x u_1,
\end{aligned}$$

où la viscosité est donc

$$\nu = c_s^2 (\tau - \frac{\Delta t}{2}) \tag{5.7}$$

au lieu de $\nu = c_s^2 \tau$ pour le modèle D2Q9 continu.

5.3 Résumé

Toute cette discussion a permis de montrer que pour résoudre les équations de Stokes (2.2), on peut donc utiliser le schéma LBM-D2Q9 (5.3). Les différents paramètres du schéma peuvent tous se déterminer ainsi :

- on fixe tout d’abord Δx , en fonction du nombre de mailles que l’on souhaite dans le domaine ;
- on choisit ensuite un pas de temps Δt : on prendra en général un pas de temps de la forme $\Delta t = \alpha \frac{\Delta x^2}{2\nu}$, avec α un coefficient plus petit que 1, comme pour les schémas explicites usuels, mais qu’il faut ici ajuster pour que le schéma reste stable ;
- ensuite on pose $c = \Delta x / \Delta t$ la “vitesse du son” du réseau, puis on pose $c_s = c / \sqrt{3}$;
- on définit enfin τ par (5.7), soit $\tau = \frac{\nu}{c_s^2} + \frac{\Delta t}{2}$.

On peut ainsi définir la distribution d’équilibre et le schéma (5.3) dans son ensemble. Le schéma permet alors de calculer en tout point du maillage la distribution f , ses moments $\rho = \sum f_q \omega_q$ et $\rho u = \sum v_q f_q \omega_q$. Finalement, la vitesse u_S et la pression dynamique p_S des équations de Stokes s’approchent par u et $c_s^2 \rho$ calculées par le schéma.

5.4 Discussion

Discutons tout d’abord des avantages de cette méthode. Tout d’abord, c’est une méthode explicite. Les méthodes usuelles nécessitent en général l’utilisation d’un solveur de Poisson pour assurer la contrainte de divergence nulle : ceci est souvent l’étape la plus coûteuse en temps calcul. Avec la méthode LBM, il n’y a pas de solveur de Poisson : le calcul se fait très localement, et se prête donc bien à une parallélisation massive. En outre, l’approximation lagrangienne sur un réseau permet de résoudre la phase de transport par un décalage de tableau : le transport par la vitesse v_1 par exemple se fait en décalant le tableau f d’une colonne vers la droite. Il n’a donc pas de calcul en nombre flottant pour cette opération, et elle est alors extrêmement rapide. Un autre avantage est la facilité d’adapter la méthode LBM à d’autres modèles de mécanique des fluides : il suffit d’interpréter ceux-ci de façon cinétique, et on voit qu’en général, il suffit de modifier la fonction d’équilibre pour simuler le modèle voulu (voir à ce sujet le chapitre 7). Une limite importante reste malgré tout celle du nombre de Mach : les méthodes LBM usuelles sont limitées aux écoulements incompressibles et isothermes, mais des extensions ont été récemment proposées pour remédier à cela.

En ce qui concerne les inconvénients de la méthode, le plus évident est qu’il s’agit d’une méthode explicite, donc limitée à des pas de temps petits. L’analyse de la stabilité de LBM est assez peu claire (de nombreux auteurs travaillent encore sur le sujet) : on ne connaît ainsi pas de condition CFL au sens usuel. Cependant, il est raisonnable de prendre Δt de l’ordre de Δx^2 , comme dans toute méthode explicite. Si Δx est petit, une simulation peut donc nécessiter un nombre de pas de temps considérable : le calcul d’un écoulement avec couche limite peut ainsi être assez difficile avec une telle méthode.

Chapitre 6

Mise en oeuvre

Nous donnons ici quelques détails pour l'implémentation effective de la méthode LBM. Nous renvoyons au TP correspondant (voir chapitre 8) pour d'autres détails, en particulier pour la définition de la donnée initiale et le traitement des conditions aux limites.

6.1 Simplifications

En pratique, la méthode LBM n'est pas tout à fait programmée dans sa forme décrite chapitre 5. Tout d'abord, il est d'usage dans la communauté LBM d'utiliser des variables adimensionnées, ce que nous ne ferons pas ici. Ensuite, quelques petites astuces de reformulation permettent de diminuer encore le coût de calcul.

La principale astuce consiste à remarquer que le calcul de ρ et u par la formule (5.4) nécessite le produit par les poids ω_q pour chaque q , i , et j , à chaque pas de temps. Le temps calcul induit peut être éliminé en introduisant la distribution $g_{i,j,q}^n = f_{i,j,q}^n \omega_q$. Ainsi, en multipliant (5.3) par ω_q , on trouve le schéma

$$\begin{aligned} g_{i,j,0}^{n+1} &= g_{i,j,0}^n + \eta(g_{eq,i,j,0}^n - g_{i,j,0}^n), \\ g_{i+1,j,1}^{n+1} &= g_{i,j,1}^n + \eta(g_{eq,i,j,1}^n - g_{i,j,1}^n), \\ g_{i-1,j,3}^{n+1} &= g_{i,j,3}^n + \eta(g_{eq,i,j,3}^n - g_{i,j,3}^n), \\ g_{i,j-1,4}^{n+1} &= g_{i,j,4}^n + \eta(g_{eq,i,j,4}^n - g_{i,j,4}^n), \\ g_{i+1,j+1,5}^{n+1} &= g_{i,j,5}^n + \eta(g_{eq,i,j,5}^n - g_{i,j,5}^n), \\ g_{i-1,j+1,6}^{n+1} &= g_{i,j,6}^n + \eta(g_{eq,i,j,6}^n - g_{i,j,6}^n), \\ g_{i-1,j-1,7}^{n+1} &= g_{i,j,7}^n + \eta(g_{eq,i,j,7}^n - g_{i,j,7}^n), \\ g_{i+1,j-1,8}^{n+1} &= g_{i,j,8}^n + \eta(g_{eq,i,j,8}^n - g_{i,j,8}^n), \end{aligned} \tag{6.1}$$

où la fonction d'équilibre vaut

$$g_{eq,i,j,q}^n = \omega_q \rho_{i,j}^n \left(1 + \frac{u_{i,j}^n \cdot v_q}{c_s^2}\right),$$

et les moments valent

$$\rho_{i,j}^n = \sum_{q=0}^8 g_{i,j,q}^n \quad \text{et} \quad \rho_{i,j}^n u_{i,j}^n = \sum_{q=0}^8 v_q g_{i,j,q}^n \quad (6.2)$$

et $\eta = \Delta t / \tau$.

En outre, on peut éviter l'utilisation systématique de $\sqrt{3}$ en posant

$$c_q = \frac{v_q}{c_s \sqrt{3}}.$$

Les composantes des « vitesses » c_q valent donc 0 ou ± 1 . La distribution d'équilibre s'écrit alors

$$g_{eq,i,j,q}^n = \omega_q \rho_{i,j}^n (1 + 3 \tilde{u}_{i,j}^n \cdot c_q),$$

où $\tilde{u}_{i,j}^n = \frac{u_{i,j}^n}{c_s \sqrt{3}}$ qui peut être calculée directement avec

$$\rho_{i,j}^n \tilde{u}_{i,j}^n = \sum_{q=0}^8 c_q g_{i,j,q}^n.$$

6.2 Version collision-transport

En général, le calcul de g^{n+1} se fait en deux étapes successives :

- tout d'abord, on calcule le second membre de (6.1), que l'on stocke dans g^n : c'est l'étape de collision, purement locale, qui peut être massivement parallélisée ;
- ensuite, on applique le schéma (6.1) en utilisant g^n qui contient maintenant le second membre : c'est l'étape de transport.

Pour clarifier cela, nous écrivons ci-dessous ces deux étapes pour la vitesse v_1 :

Collision.

$$g_{i,j,1}^n \leftarrow g_{i,j,1}^n + \eta (g_{eq,i,j,1}^n - g_{i,j,1}^n).$$

Transport.

$$g_{i+1,j,1}^{n+1} = g_{i,j,1}^n.$$

Chapitre 7

Extensions

Un des intérêts de la méthode LBM est sa grande souplesse : il est relativement aisé d'étendre la méthode à d'autres modèles physiques, pour peu que l'on puisse leur trouver une interprétation cinétique. Dans cette section, nous mentionnons quelques exemples qui peuvent être traités en exercice.

Exercice 7.1. Il n'est pas très difficile d'étendre la méthode présentée ici pour simuler les équations de Navier-Stokes incompressibles. Il suffit pour cela de savoir qu'on peut les obtenir en repartant de la linéarisation de l'équation BGK (3.1) menée jusqu'à l'ordre deux par rapport à Ma . La fonction d'équilibre associée est alors

$$M[\rho, u, T] = M[1, 0, T]\rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT} + \frac{(u \cdot v)^2}{2(RT)^2} - \frac{\|u\|^2}{2RT} \right) + O(Ma^3).$$

L'objectif de cet exercice est alors de suivre pas à pas toute l'analyse précédente pour aboutir à la méthode LBM correspondante. Noter que la plupart des calculs sont inchangés.

Exercice 7.2. Étendre le schéma LBM pour résoudre les équations de Stokes (ou Navier-Stokes incompressibles) pour des écoulements 3D. Il faudra pour cela reprendre l'analyse des chapitres précédents en commençant par étendre le modèle D2Q9 vu chapitre 4 au cas 3D. Il faut donc construire un modèle D3Qn (avec n à déterminer), puis construire le schéma LBM associé, et enfin l'analyser.

Exercice 7.3. Proposer une extension de la méthode présentée dans cette partie au cas d'un fluide soumis à la gravité. Pour cela, donner tout d'abord les équations de Stokes correspondantes. Ensuite, rajouter un terme de force à l'équation BGK (voir pour cela la partie 4 consacrée aux sprays). Approcher ensuite ce terme en remplaçant la distribution par la maxwellienne associée. Constater que cela rajoute un terme source à l'équation BGK linéarisée et suivre l'analyse faite dans ce chapitre pour aboutir au résultat.

Exercice 7.4. S'inspirer de la partie 3 sur le transfert radiatif pour construire une méthode LBM pour approcher l'équation de la chaleur. On pourra consulter [1] à ce sujet, mais la méthode est présentée de façon légèrement différente.

Chapitre 8

TP : initiation à la méthode Boltzmann sur réseau

Le but de ce TP est de programmer la méthode de Boltzmann sur réseau présentée dans les chapitres précédents, afin de de simuler deux problèmes classiques de mécanique des fluides. Certains détails indispensables à la simulation, comme le traitement des conditions aux limites, sont donnés dans le TP.

8.1 Écoulement de Couette

Le but de cette partie est de résoudre le problème de Couette plan. On considère un fluide visqueux contenu entre deux plaques planes d'axe Ox , séparées d'une largeur H . La plaque supérieure est animée d'une vitesse horizontale u_w , alors que la plaque inférieure est fixe (voir figure 8.1). Au bout d'un certain temps, l'écoulement atteint un régime stationnaire. Si la vitesse u_w est faible, l'écoulement est bien décrit par les équations de Stokes suivantes :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot u &= 0, \\ \nabla p &= \mu \Delta u,\end{aligned}$$

avec $x \in \mathbb{R}$, $y \in [-H/2, H/2]$, et les conditions aux limites $u(x, -H/2) = (0, 0)$ et $u(x, H/2) = (u_w, 0)$.

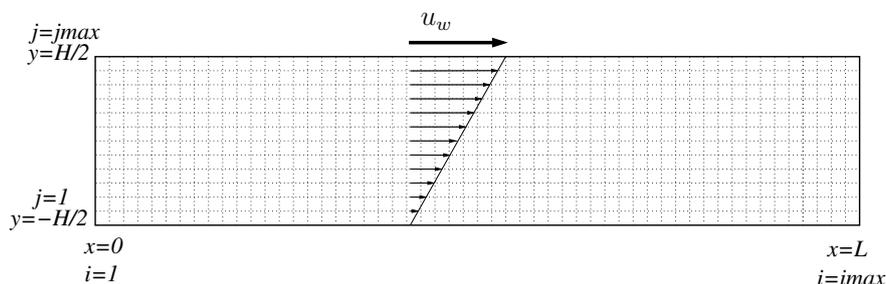


FIGURE 8.1 – Écoulement de Couette : géométrie, maillage, profil de vitesse.

En raison de l'unicité de la solution de ce problème, on peut montrer que celle-ci est indépendante de x , que u_y est partout nulle (l'écoulement est donc horizontal), et que le

problème de Stokes se ramène aux équations

$$\mu \partial_{yy} u_x = 0 \quad \text{et} \quad \partial_y p = 0.$$

Il est maintenant facile de résoudre le problème et l'on trouve

$$u_x(y) = u_w \frac{y + H/2}{H} \quad \text{et} \quad p = cte.$$

L'écoulement présente donc un profil de vitesse horizontal et linéaire, alors que la pression est constante (cette constante n'est cependant pas définie de façon unique).

Nous allons maintenant résoudre ce problème avec la méthode de Boltzmann sur réseau D2Q9 vue en cours : l'écoulement sera donc simulé en 2D, de façon instationnaire. Avec un nombre d'itérations suffisamment grand, la solution numérique devrait tendre vers une bonne approximation de la solution stationnaire exacte. Dans ce TP, les valeurs physiques correspondent à celle de l'écoulement d'une huile du type huile d'olive à pression atmosphérique, à température de 20°C, dans un canal de largeur $H = 10$ cm, avec une vitesse de plaque 1 cm/s.

8.1.1 Prise en main du code

1. Téléchargez l'archive [archive.tar.gz](#) contenant :
 - trois fichiers de données `data_couette.txt`, `data_cylindre.txt`, et `maillage.dat` ;
 - trois modules `mod_precision.f90`, `mod_sorties.f90`, et `mod_ns.f90` ;
 - un makefile `Makefile` ;
 - un squelette de code du programme principal `lbm.f90` dans lequel vous devrez travailler.
2. Ouvrez tous ces fichiers et essayez de comprendre ce qu'ils contiennent.
3. Vous pouvez constater que ce code utilise les simplifications données dans le chapitre 6. Vérifiez sur le papier que ce code correspond bien au schéma donné dans ce chapitre (notez bien que la vitesse adimensionnée macroscopique $\tilde{u} = u/c_d$ reste notée u après adimensionnement dans le code).

8.1.2 Implémentation

Codez les étapes de collision, de transport, et de calcul des quantités macroscopiques dans le programme (voir le chapitre 6).

Attention : tout au long de l'écriture de votre programme, on conseille de compiler sans optimisation, avec l'option `-fbounds-check`, afin de détecter immédiatement les dépassements de tableau. Ce n'est qu'à la fin du TP que vous pourrez compiler en mode optimisé `-O3`.

8.1.3 Conditions aux limites

Tout d'abord, expliquez (par un travail sur le papier) pourquoi seules les mailles (i, j) des bords du domaine sont celles pour lesquelles l'étape de transport ne définit pas complètement

$g_{q,i,j}^{n+1}$: pour chacun de ces bords (dénommés Est, Ouest, Sud, Nord), indiquez quelles sont les valeurs de q pour lesquelles $g_{q,i,j}^{n+1}$ n'a pas été définie.

Pour mettre à jour ces valeurs, on va utiliser les conditions aux limites.

Bords ouest et est

Ces bords sont des frontières artificielles : pour reproduire un écoulement invariant dans la direction x qui aurait lieu dans un domaine infini dans cette même direction, il suffit d'imposer des conditions aux limites périodiques sur ces bords. Concrètement, les valeurs inconnues de g^{n+1} au bord ouest (donc celles pour $i = 1$ et j entre 1 et $jmax$, et pour $q = 1, 5, 8$), sont prises égales à celles, connues, de g^{n+1} au bord est (donc en $i = imax$, j entre 1 et $jmax$, et $q = 1, 5, 8$).

Trouvez la relation du même type pour définir les valeurs inconnues au bord est, puis programmez les conditions aux limites en ces deux bords.

Bord sud

Ce bord est une paroi solide fixe : la seule condition physique est celle de non glissement qui indique que la vitesse sur ce bord doit être nulle.

Une des forces de la méthode de Boltzmann sur réseau est de pouvoir très facilement garantir cette propriété par la condition dite de « rebond » (ou « bounce back » en anglais) : on considère que les particules heurtant la paroi sont ré-émises avec une vitesse opposée (ne pas confondre avec la réflexion spéculaire qui inverse uniquement la composante normale de la vitesse). Ainsi, pour le bord sud par exemple, on imposera

$$g_{2,i,1}^{n+1} = g_{4,i,1}^{n+1} \quad g_{5,i,1}^{n+1} = g_{7,i,1}^{n+1} \quad g_{6,i,1}^{n+1} = g_{8,i,1}^{n+1}.$$

Avant de passer au codage de cette condition, vérifiez sur le papier que la relation $u_{y,i,1}^{n+1} = 0$ est bien assurée, mais pas la relation $u_{x,i,1}^{n+1} = 0$. En pratique, cela fonctionnera très bien quand même.

Codez ensuite cette condition pour toutes les mailles du bord sud.

Bord nord

Ce bord est aussi une paroi solide, mais qui se déplace à la vitesse u_w . Cela peut être simulé avec la condition aux limites de Zou-He, qui permet d'imposer simplement une des composantes de la vitesse ou bien la densité au bord. Cette condition est déjà codée dans le programme : on commence par définir une densité de bord (notée `rhoZH` dans le code), puis on définit les valeurs inconnues de la distribution en utilisant cette densité, la vitesse de paroi u_w , et les valeurs connues de la distribution.

8.1.4 Test du programme

Premier test

Compilez votre programme, puis observez les résultats et répondez aux questions suivantes :

1. le schéma converge-t-il vers une solution stationnaire ? En combien d'itérations ?
2. le résultat est-il proche de la solution exacte ?
3. la solution est-elle bien 1D ? Pour cela, visualisez le champ de vitesse 2D avec paraview.

Sensibilité des paramètres

Il est important de connaître la sensibilité de la méthode LBM aux divers paramètres du calcul. Faites les tests indiqués ci-dessous et commentez les résultats que vous obtenez :

1. augmentez progressivement la valeur de u_w ;
2. augmentez le nombre de mailles j_{max} ;
3. augmentez la valeur du coefficient alpha.

8.2 Écoulement autour d'un cylindre

On veut simuler à présent l'écoulement plan d'un fluide autour d'un obstacle fixe immergé dans le fluide : le domaine de calcul est un canal rectangulaire dans lequel entre le fluide par la frontière ouest (avec un profil de vitesse parabolique). Le fluide rencontre alors un cylindre immergé au milieu du canal, puis sort par la frontière est.

Lorsque la vitesse est suffisamment petite, l'écoulement atteint rapidement un régime stationnaire, solution des équations de Stokes, symétrique par rapport à l'axe du canal. Quand la vitesse augmente, si l'on tient compte des non-linéarités du modèle de Navier-Stokes, deux poches de recirculations apparaissent en aval du cylindre, mais l'écoulement reste stationnaire et symétrique. Avec une vitesse encore plus grande, ces poches se détachent et créent une succession de tourbillons alternés dans le sillage du cylindre. Ce phénomène est appelé « allées de Von Karmann ». L'écoulement n'est alors plus symétrique, ni stationnaire.

La géométrie du problème 2D et les paramètres de discrétisation sont donnés dans la figure ci-dessous. Le canal est de largeur $H = 10$ cm et de longueur $L = 50$ cm, et l'axe Ox passe par son milieu. Le cylindre (représenté par un disque en 2D) est de rayon $R = H/10$ cm et est placé en $(c_x, c_y) = (L/5, 0)$.

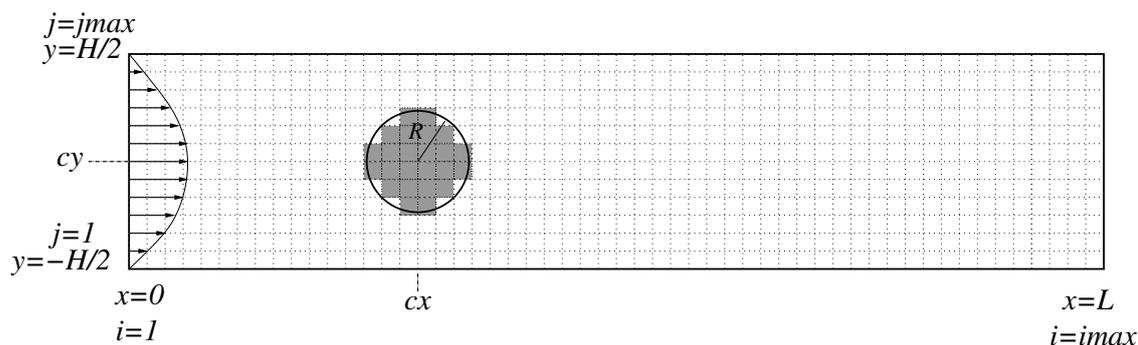


FIGURE 8.2 – Écoulement autour d'un cylindre : géométrie et paramètres de discrétisation

Nous allons voir que le code précédent permet, moyennant très peu de modifications, de simuler cet écoulement.

8.2.1 Obstacle

Ici, nous allons garder le même maillage cartésien, qui va donc remplir l'obstacle, contrairement aux approches plus classiques où le maillage épouse la frontière de l'obstacle (approche « body fitted »). Pour faire la différence entre le fluide et l'intérieur de l'obstacle, on va se donner un tableau « masque » d'entiers noté `obst` tel que `obst(i, j) = 1` si le noeud (i, j) est extérieur au disque (on dira que le noeud est *fluide*), et `obst(i, j) = 0` si le noeud est intérieur au disque (on dira que le noeud est *solide*). De cette façon, le disque est approché par une géométrie « en lego », ce qui est assez grossier quand le maillage n'est pas fin, mais cela sera suffisant ici. Cette approche a l'avantage de ne pas nécessiter de logiciel de maillage, et convient parfaitement aux méthodes de Boltzmann sur réseau.

1. décommentez les lignes de code définissant le tableau de masque qui permet de prendre en compte le cylindre ;
2. modifiez les lignes de lecture des données pour lire le fichier `data_cylindre.txt` ;
3. rajoutez un test dans le bloc des collisions : elles ne doivent être faites que dans le fluide (test sur la valeur de `obstacle(i, j)`) ;
4. modifiez le code pour faire une seule itération en temps, et une seule sortie fichier, puis visualisez le domaine de calcul et l'obstacle avec `paraview`.

8.2.2 Conditions aux limites

Bords nord et sud

Ces bords sont des parois solides immobiles. Pour le bord sud, reprenez la condition aux limites de rebond utilisée dans le cas-test de Couette. Adaptez cette CL pour le bord nord.

Bord ouest

En ce bord, on souhaite imposer un profil de vitesse parabolique (profil de Poiseuille), soit

$$u_x(y) = \left(\frac{2}{H}\right)^2 u_w \left(\left(\frac{H}{2}\right)^2 - y^2 \right), \quad \text{et} \quad u_y = 0.$$

Pour cela, on utilise la condition aux limites de Zou-He qui s'écrit pour tout j (avec $i = 1$) :

$$\begin{aligned} v_e &= \left(\frac{2}{H}\right)^2 u_w \left(\left(\frac{H}{2}\right)^2 - y_j^2 \right), \\ \rho_e &= (g_{0,i,j}^{n+1} + g_{2,i,j}^{n+1} + g_{4,i,j}^{n+1} + 2(g_{3,i,j}^{n+1} + g_{6,i,j}^{n+1} + g_{7,i,j}^{n+1}))/ (1 - v_e), \\ g_{1,i,j}^{n+1} &= g_{3,i,j}^{n+1} + \frac{2}{3} \rho_e v_e, \\ g_{5,i,j}^{n+1} &= g_{7,i,j}^{n+1} + \rho_e v_e / 6 - (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1}) / 2, \\ g_{8,i,j}^{n+1} &= g_{6,i,j}^{n+1} + \rho_e v_e / 6 + (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1}) / 2. \end{aligned}$$

Notez bien que cette CL est définie seulement si v_e n'est pas égale à 1, de qui implique que la vitesse d'entrée adimensionnée u_w soit inférieure à 1. Cela peut nécessiter de réduire le pas de temps via le paramètre α (voir la section 8.2.5).

Programmez cette CL dans le code. Attention à la fraction $\frac{2}{3}$ qui doit être codée en réel et pas en entier !

Bord est

Au bord est, on va imposer la densité initiale, ce qui peut là encore se faire avec la CL de Zou-He, qui s'écrit pour tout j (avec $i = i_{max}$) :

$$\begin{aligned}\rho_e &= \rho_s, \\ v_e &= -1 + (g_{0,i,j}^{n+1} + g_{2,i,j}^{n+1} + g_{4,i,j}^{n+1} + 2(g_{1,i,j}^{n+1} + g_{5,i,j}^{n+1} + g_{8,i,j}^{n+1})) / \rho_e, \\ g_{3,i,j}^{n+1} &= g_{1,i,j}^{n+1} - \frac{2}{3}\rho_e v_e, \\ g_{6,i,j}^{n+1} &= g_{8,i,j}^{n+1} - \frac{\rho_e v_e}{6} - (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1})/2, \\ g_{7,i,j}^{n+1} &= g_{5,i,j}^{n+1} - \frac{\rho_e v_e}{6} + (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1})/2.\end{aligned}$$

Programmez cette CL dans le code.

CL sur l'obstacle

Ces bords se traitent différemment. Tout d'abord, il faut remarquer que dans l'étape de transport, les mailles qui ont pour voisines des mailles solides du disque ont été affectées par le transport de g^n venant de ces mailles solides. Comment est donc définie la distribution dans ces mailles ? Il suffit en fait de la définir conformément aux conditions aux limites de non glissement à la paroi.

On peut interpréter la phase de transport ainsi : les noeuds solides ont reçu des particules des noeuds fluides. Pour annuler la vitesse (ou de façon équivalente, le flux de masse) à la paroi, qui est située à l'interface entre les noeuds fluides et solides, il suffit alors d'inverser les vitesses de ces particules. Autrement dit, on va modifier les distributions des noeuds solides avec la même technique de rebond que celle utilisée sur les parois sud et nord, mais ici pour toutes les vitesses. On va alors utiliser l'algorithme suivant :

```
boucle en i,j
  si obst(i,j)=0 alors
    c1(0:8) = gn(0:8,i,j)
    gnp1(0,i,j) = c1(0)
    gnp1(1,i,j) = c1(3)
    gnp1(2,i,j) = c1(4)
    gnp1(3,i,j) = c1(1)
    gnp1(4,i,j) = c1(2)
    gnp1(5,i,j) = c1(7)
    gnp1(6,i,j) = c1(8)
    gnp1(7,i,j) = c1(5)
```

```
gnp1(8,i,j) = cl(6)
```

Codez alors cet algorithme.

8.2.3 Premier test

Lancez votre code pour un premier test, avec un temps maximum de simulation de 3000 s et une sortie toutes les 100 itérations (diminuez la fréquence des sorties si vous n'avez pas assez d'espace disque). Observez les résultats avec paraview en visualisant la norme du champ de vitesse, et éventuellement le champ de vecteurs. Commentez.

Vous pouvez faire varier légèrement le nombre de mailles pour voir son influence.

8.2.4 Adaptation du code pour simuler Navier-Stokes

Pour pouvoir simuler un écoulement avec une vitesse d'entrée plus grande, il faut modifier le code afin de prendre en compte les effets non-linéaires. Pour cela, il suffit de refaire l'analyse donnée en cours, en remplaçant le développement limité de la Maxwellienne d'ordre 1 par un développement à l'ordre 2. En suivant pas à pas tous les calculs, on trouve que la distribution d'équilibre du code doit être remplacée par

$$g_{eq,q}(\rho, u) = \omega_q \rho \left(1 + 3u \cdot c_q + \frac{9}{2}(u \cdot c_q)^2 - \frac{3}{2}\|u\|^2 \right).$$

Remplacez alors la distribution d'équilibre du code (dans les blocs initialisation et relaxation) par cette nouvelle distribution et relancez le code avec les mêmes paramètres que précédemment : vous devriez constater que la solution obtenue semble peu différente.

8.2.5 Tests à plus grande vitesse

En augmentant progressivement la vitesse d'entrée (passer de 2×10^{-4} à 4×10^{-4} , puis enfin à puis à 0.004 m.s^{-1}), observez l'apparition d'un poche de recirculation. Pour observer le détachement de tourbillons et l'apparition de l'allée de von Karman, il faut augmenter le temps de simulation à 4000 s. Attention, l'augmentation de la vitesse nécessite de diminuer le coefficient CFL α .

8.2.6 Autres calculs

Ensuite, amusez-vous ! : faite varier les paramètres pour observer le comportement de la méthode, changez la taille du canal, insérez d'autres obstacles, que vous pouvez même faire bouger. Il suffit de modifier le test permettant de remplir le tableau `obst`, ce qui est très facile. C'est cette simplicité qui a rendu la méthode aussi populaire, en particulier pour les calculs d'écoulements en milieux poreux.

Bibliographie

- [1] S. Dellacherie. Construction and properties of lbm algorithms for the 1d convection-diffusion equation. https://sites.google.com/site/stephanedellacherie/expose/beamer_LBM_cachan_avril_2013.pdf.
- [2] F. Dubois. Une introduction au schéma de Boltzmann sur réseau. *ESAIM : PROCEEDINGS*, 18 :181–215, 2007.
- [3] X. He and L.-S. Luo. Theory of the lattice Boltzmann method : from the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical review E*, 56(6), 1997.
- [4] M. Junk, A. Klar, and L.-S. Luo. Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, 210 :676–704, 2005.
- [5] Y. H. Qian, D. D’Humières, and P. Lallemand. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhys. Lett.*, 17(6) :479–484, 1992.