

# CANUM 2018 : mini-symposium

## « Schémas de Boltzmann sur réseau »

François Dubois<sup>ab</sup>, Benjamin Graille<sup>a</sup>

15 mars 2018

<sup>a</sup>*Département de Mathématiques d'Orsay, Bât. 307, F-91405 Orsay, France.*

<sup>b</sup>*Conservatoire National des Arts et Métiers, LMSSC laboratory, F-75003 Paris, France.*

Les différentes étapes de l'émergence des schémas de Boltzmann sur réseau relèvent de l'informatique, de la mécanique et de la physique. Nous pouvons noter ces dernières années de nouveaux succès de cette approche numérique : calcul sur des processeurs graphiques (Tölke, Obrecht), modèles pour les milieux poreux (Talon *et al.*), modèles pour l'aérodynamique et l'aéroacoustique (Sengissen *et al.*), dans le cadre du projet FUI "LaBS" auquel le Laboratoire de Mathématiques d'Orsay a participé.

La communauté « Boltzmann sur réseau » fait preuve d'une grande créativité pour enrichir la panoplie de schémas, avec les schémas entropiques (Karlin *et al.*), les schémas recentrés en vitesse (Geier *et al.*, Février *et al.*), la méthode de régularisation (Malespinas) ou les schémas vectoriels (Dubois, Graille). Enfin, des questions mathématiques fondamentales sont posées déjà pour les schémas existants devenus classiques. L'étude de la stabilité est le plus souvent limitée au cas linéaire et aux schémas les plus simples. L'analyse asymptotique formelle (Junk *et al.*) permet de faire le lien avec un système sous-jacent d'équations aux dérivées partielles. Elle doit être étendue à des modèles plus complexes, comme les équations de Navier-Stokes thermiques (prise en compte de la conservation de la masse, de l'impulsion et de l'énergie) pour des écoulements avec choc (aérodynamique) ou sans choc (thermique), les écoulements multi-phases, *etc.* De plus, elle révèle aussi des surprises comme un défaut de consistance pour la convergence à viscosité fixée (Dellacherie, Boghosian *et al.*).

Par ailleurs, de nombreux logiciels payants (PowerFLOW, ProLB) et libres (Palabos, OpenLB, pyLBM) sont développés afin de faciliter l'utilisation de cette méthode numérique innovante et efficace dans toutes les communautés impliquées dans les simulations numériques. En particulier, le module python pyLBM développée au sein de l'Institut de Mathématique d'Orsay permet d'utiliser et d'étudier une large classe de schémas de Boltzmann sur réseau avec en particulier une description et une analyse formelle du schéma, une optimisation efficace reposant sur des bibliothèques d'accélération de code (Cython, Pythran, mpi4py), une gestion souple de la géométrie en 2D et en 3D permettant de faire des simulations dans des domaines complexes.

### Interventions

Benjamin Graille : **Schémas de Boltzmann sur réseau et schémas de relaxation**

Loïc Gouarin : **pyLBM : un logiciel libre de Boltzmann sur réseau**

Filipa Caetano : **Convergence d'un schéma de Boltzmann sur réseau monodimensionnel à deux vitesses**

Clémentine Courtès : **Un schéma de relaxation implicite basé sur les méthodes Lattice-Boltzmann**

# Schémas de Boltzmann sur réseau et schémas de relaxation

Benjamin GRAILLE, Université Paris-Sud

Dans cet exposé, nous construirons des schémas de Boltzmann sur réseau pour simuler des lois de conservation hyperboliques en lien avec les schémas de relaxation.

Dans [5], une construction de schémas vectoriels à partir du schéma de Boltzmann à deux vitesses en dimension un d'espace a permis de simuler des lois de conservation scalaires. Les schémas obtenus sont diffusifs et la diffusion numérique peut être contrôlée dans la limite de stabilité.

Le schéma à deux vitesses est très agréable à manipuler car il est très simple mais il possède une propriété désagréable : les points d'indice pair et ceux d'indice impair ne communiquent pas, ce qui engendre une pixelisation de la solution. Nous montrerons alors comment construire des schémas vectoriels à partir de schémas plus utilisés dans la communauté : le schéma à trois vitesses en dimension un d'espace en particulier.

Nous montrerons un lien entre ces schémas et les systèmes de relaxation, en particulier celui proposé par Jin et Xin [3]. Ce système consiste à transformer la loi de conservation non linéaire en un système de taille double linéaire en ajoutant un terme source raide. Cette méthode a été largement utilisée pour construire des schémas aux volumes finis. Nous verrons ici une classe de schémas de Boltzmann qui peut être vue comme une discrétisation d'un système de relaxation.

Cette méthode peut se généraliser à des dimensions supérieures et nous présenterons des résultats numériques illustrant quelques schémas sur des systèmes classiques.

## Références

- [1] D. D'HUMIÈRES, *Generalized Lattice-Boltzmann Equations*, Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations, **159** pp. 450–458, AIAA Progress in astronomicals and aeronautics, 1992.
- [2] Y. H. QIAN, D. D'HUMIÈRES, P. LALLEMAND, *Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation*, Europhys. Lett., **17** pp. 479–484, 1992.
- [3] S. JIN and Z. XIN, *The Relaxation Schemes for Systems of Conservation Laws in Arbitrary Space Dimensions*, Comm. Pure Appl. Math, **48** pp. 235–277, 1995.
- [4] F. DUBOIS, *Equivalent partial differential equations of a lattice Boltzmann scheme*, Computers and Mathematics with Applications, **55** pp. 1441–1449, 2008.
- [5] B. GRAILLE, *Approximation of mono-dimensional hyperbolic systems: a lattice Boltzmann scheme as a relaxation method*, Journal of Computational Physics, **266** pp. 74–88, 2014.

# pyLBM : un logiciel libre de Boltzmann sur réseau

Loïc GOUARIN, Université Paris-Sud

pyLBM est un module Python permettant d'utiliser simplement différentes méthodes de Boltzmann sur réseau avec un formalisme très proche de celui proposé par D. D'Humières en dimension 1, 2 ou 3 d'espace. Il s'appuie sur le package SymPy pour décrire de manière formelle tous les paramètres de la simulation : les vitesses du schéma, les moments sous la forme de polynômes, les valeurs à l'équilibre de ces moments par des fonctions formelles, les conditions aux limites *etc.*

En ce qui concerne le domaine de calcul de la simulation, l'utilisateur peut créer des domaines complexes s'appuyant sur l'union de formes simples telles que des cercles, des triangles ou des parallélogrammes en dimension 2, ou leur équivalent en dimension 3.

Un code est ensuite généré en fonction de ces paramètres physiques et mathématiques. Il existe différents types de générateurs (NumPy, Cython, loo.py) permettant de tirer partie au mieux des performances de la machine. Le code est parallélisé en utilisant mpi4py.

Le logiciel est disponible à l'adresse suivante <http://www.math.u-psud.fr/pyLBM>.

Dans cette présentation, nous proposons de montrer quelques exemples du plus simple au plus compliqué d'utilisation de ce logiciel en insistant sur les points suivants :

- le formalisme est très proche du formalisme mathématique abstrait (il n'est pas nécessaire de rentrer dans les détails de l'algorithme pour effectuer une simulation),
- la grande variété des modèles physiques que la méthode de Boltzmann sur réseau permet de traiter,
- les outils formels du logiciel pour analyser les propriétés du schéma comme la consistance ou la stabilité,
- le traitement des conditions aux limites.

## Références

- [1] D. D'HUMIÈRES, *Generalized Lattice-Boltzmann Equations*, Rarefied Gas Dynamics: Theory and Simulations, **159** pp. 450–458, AIAA Progress in astronautics and aeronautics, 1992.
- [2] F. DUBOIS, *Equivalent partial differential equations of a lattice Boltzmann scheme*, Computers and Mathematics with Applications, **55** pp. 1441–1449, 2008.
- [3] B. GRAILLE, *Approximation of mono-dimensional hyperbolic systems: a lattice Boltzmann scheme as a relaxation method*, Journal of Computational Physics, **266** pp. 74–88, 2014.
- [4] Y. H. QIAN, D. D'HUMIÈRES, P. LALLEMAND, *Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation*, Europhys. Lett., **17** pp. 479–484, 1992.

# Convergence d'un schéma de Boltzmann sur réseau monodimensionnel à deux vitesses

**Filipa CAETANO**, Univ. Paris-Sud

**François DUBOIS**, CNAM et Univ. Paris-Sud

**Benjamin GRAILLE**, Univ. Paris-Sud

**Mots-clés** : schémas de Boltzmann sur réseau, lois de conservation scalaires, systèmes de relaxation.

Nous considérons un schéma de Boltzmann sur réseau monodimensionnel à deux vitesses que, d'après [1], nous interprétons comme un schéma de volumes finis approchant une loi de conservation scalaire. Nous faisons un lien entre ce schéma et les schémas de relaxation basés dans l'approximation des systèmes de lois de conservation par le système de relaxation de Jin et Xin ([2]). En utilisant des estimations de la norme  $L^\infty$  et de la variation total des solutions approchées, nous prouvons la convergence du schéma vers l'unique solution entropique de la loi de conservation scalaire, pour un intervalle de valeurs d'un paramètre du schéma correspondant à un rapport entre le pas de temps de la discrétisation et le paramètre de relaxation.

## Références

- [1] B. GRAILLE, *Approximation of mono-dimensional hyperbolic systems: a lattice Boltzmann scheme as a relaxation method*, J. Comput. Phys. 266, 74–88, 2014.
- [2] S. JIN et Z. XIN, *The relaxation schemes for systems of conservation laws in arbitrary space dimensions*, Comm. Pure Appl. Math 48, 235–277, 1995.

**Filipa CAETANO**, Univ. Paris-Sud, Laboratoire de Mathématiques, UMR 8628, Orsay, F-91405, France, CNRS, Orsay, F-91405

`filipa.caetano@math.u-psud.fr`

**François DUBOIS**, Conservatoire National des Arts et Métiers, Département de mathématiques, Paris, France, et Univ. Paris-Sud, Laboratoire de Mathématiques, UMR 8628, Orsay, F-91405, France, CNRS, Orsay, F-91405

`francois.dubois@math.u-psud.fr`

**Benjamin GRAILLE**, Univ. Paris-Sud, Laboratoire de Mathématiques, UMR 8628, Orsay, F-91405, France, CNRS, Orsay, F-91405

`benjamin.graille@math.u-psud.fr`

# Un schéma de relaxation implicite basé sur les méthodes Lattice-Boltzmann

**Clémentine COURTÈS**, IRMA, Université de Strasbourg

**Emmanuel FRANCK**, INRIA Nancy Grand-Est et IRMA, Université de Strasbourg

**Mots-clés** : schéma Lattice-Boltzmann, représentation cinétique BGK, modélisation bas Mach

Les méthodes de Lattice-Boltzmann servent à simuler des équations à l'échelle macroscopique à partir de la dynamique microscopique latente et sont par exemple très utilisées pour modéliser les écoulements de fluides complexes.

La discrétisation des modèles cinétiques sous-jacents au problème macroscopique étudié se fait classiquement au moyen d'un schéma de propagation-collision. À chaque pas de temps, deux étapes sont effectuées : une étape de transport (ou propagation) et une étape de relaxation (ou collision). Lors de l'étape de transport, les particules sont restreintes à se déplacer de nœuds en nœuds sur le réseau et les pas d'espace et de temps discrets sont donc fortement liés par une condition de type Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

Nous présentons dans cet exposé un schéma de relaxation cinétique généralisant ces méthodes Lattice-Boltzmann [1, 2]. Ce schéma permet par exemple de s'affranchir de condition CFL, d'impliciter l'étape de relaxation et de monter en ordre en temps assez facilement. Une application possible de ce schéma est la simulation de fluides à bas nombre de Mach.

## Références

- [1] D. COULETTE, E. FRANCK, P. HELLUY, A. RATNANI ET E. SONNENDRÜCKER, *Implicit time schemes for compressible fluid models based on relaxation methods*, working paper or preprint, hal-01514593, 2017.
- [2] D. COULETTE, E. FRANCK, P. HELLUY, M. MEHRENBERGER ET L. NAVORET, *Palindromic discontinuous Galerkin method for kinetic equations with stiff relaxation*, working paper or preprint, hal-01422922, 2016.

**Clémentine COURTÈS**, Université de Strasbourg, CNRS, IRMA UMR 7501, F-67000 Strasbourg, France  
courtes@math.unistra.fr

**Emmanuel FRANCK**, INRIA Nancy-Grand Est, équipe TONUS - TOKamaks and NUmerical Simulations et IRMA, UMR CNRS 7501, Université de Strasbourg, France  
emmanuel.franck@inria.fr