

ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE D'ÉLECTRONIQUE,
INFORMATIQUE, TÉLÉCOMMUNICATIONS, MATHÉMATIQUE ET
MÉCANIQUE DE BORDEAUX



TP : Résolution de l'équation de Boltzmann 1D

COMPTE RENDU DU TP FORTRAN

BAMHAOUTE TAHA

24 janvier 2024

Table des matières

1	Introduction	2
2	Le Modèle	2
3	Transport sans collision	2
3.1	Discrétisation	2
3.2	Analyse	2
4	Transport avec collision	3
4.1	Discrétisation	3
4.2	Analyse	3
4.3	Grille de Vitesses	3
4.4	Schéma Numérique	3
4.5	Prise en compte des conditions aux limites	3
4.6	Positivité du schéma	4
5	Structure du Code	4
6	Résultats numériques :	5
6.1	Analyse des résultats	7
6.2	Temps de calcul	8
6.3	Schéma implicite	9
7	Conclusion	9

1 Introduction

Ce rapport présente l'application de la méthode des différences finies en une dimension pour résoudre une équation cinétique simplifiée de type BGK décrivant un gaz fictif. Nous introduisons le modèle mathématique, sa discrétisation en vitesse, espace et temps, ainsi que le traitement des conditions aux limites.

2 Le Modèle

L'équation considérée est donnée sous une forme adimensionnée :

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f), \quad (1)$$

ou x et v sont des scalaires, et les quantités macroscopiques sont définies par :

$$\begin{cases} \rho = \int_{\mathbb{R}} f dv, \\ \rho u = \int_{\mathbb{R}} v f dv, \\ E = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |v|^2 f dv. \end{cases}$$

La température et la pression sont définies comme :

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \frac{1}{2} \rho T, \\ p &= \rho T. \end{aligned}$$

La distribution maxwellienne $M[\rho, u, T]$ est donnée par :

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

Le temps de relaxation est exprimé par $\tau = \frac{\mu(T)}{p}$.

Les conditions aux limites sont imposées sur un domaine borné $[-1, 1]$:

$$f(t, x = -1, v > 0) = f_G, \quad (3)$$

$$f(t, x = 1, v < 0) = f_D. \quad (4)$$

3 Transport sans collision

Dans cette section, nous étudions le cas particulier de l'équation cinétique où le terme de collision est absent ($\varepsilon \rightarrow \infty$). L'équation se réduit alors à une équation de transport classique :

$$\partial_t f + v \partial_x f = 0. \quad (5)$$

La solution de cette équation est donnée par la propagation libre du signal dans l'espace des phases. Pour discrétiser cette équation, nous utilisons un schéma numérique décentré, selon le sens de propagation de v_j .

3.1 Discrétisation

En absence de collisions, le schéma numérique devient :

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + v_j^+ \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{\Delta x} = 0. \quad (6)$$

Les flux sortants sont directement imposés par les conditions aux limites. Les flux entrants dépendent de la distribution imposée f_G ou f_D .

3.2 Analyse

L'équation de transport sans collision est utile pour étudier le comportement d'une particule en l'absence d'interaction avec son environnement. La méthode numérique doit respecter les contraintes de stabilité, comme la condition de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL).

4 Transport avec collision

Lorsque le terme de collision est pris en compte (ε fini), l'équation devient :

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f). \quad (7)$$

Dans ce cas, la dynamique est dominée par un équilibre entre le transport et la relaxation vers une distribution maxwellienne.

4.1 Discrétisation

Le schéma numérique combiné pour ce cas est donné par :

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + v_j^+ \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{\Delta x} = \frac{1}{\varepsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j) - f_i^n). \quad (8)$$

4.2 Analyse

Dans ce régime, les collisions jouent un rôle crucial en forçant le système vers l'équilibre thermodynamique. Le choix de ε influence directement la transition entre les régimes libre et collisionnel.

4.3 Grille de Vitesses

L'espace \mathbb{R} des vitesses est borné dans un intervalle $[v_{\min}, v_{\max}]$, subdivisé en $n_v + 1$ points $v_j = j \Delta v$, où $\Delta v = \frac{v_{\max} - v_{\min}}{n_v}$. L'ensemble des points est appelé *grille de vitesses*.

4.4 Schéma Numérique

On utilise une schémas décentré upwind pour discrétiser l'équation :

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^n}{\Delta t} + v_j^+ \frac{f_i^n - f_{i-1}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1}^n - f_i^n}{\Delta x} = \frac{1}{\varepsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j) - f_i^n). \quad (9)$$

Ce qui devient :

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^n + \Delta t_n (v_j^+ \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x}) + \frac{\Delta t_n}{\varepsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j) - f_{i,j}^n), \quad (10)$$

avec $v_j^+ = \max(v_j, 0)$ et $v_j^- = \min(v_j, 0)$.

pour $i = 1$ à $n_x - 1$, où les quantités macroscopiques sont définies par

$$\rho_i^n = \sum_{j=0}^{nv} f_{i,j}^n \Delta v, \quad \rho_i^n u_i^n = \sum_{j=0}^{nv} v_j f_{i,j}^n \Delta v, \quad E_i^n = \sum_{j=0}^{nv} \frac{1}{2} |v_j|^2 f_{i,j}^n \Delta v,$$

et où la température et la pression sont définies par

$$E_i^n = \frac{1}{2} \rho_i^n |u_i^n|^2 + \frac{1}{2} \rho_i^n T_i^n, \quad p_i^n = \rho_i^n T_i^n,$$

On a montré dans le cours de la dernière séance que la formule de trapèze peut être réduit à la formule de rectangle à cause des valeurs de $f_{i,0}$ et $f_{i,nv}$

Le temps de relaxation vaut $\tau_i^n = \frac{\mu(T_i^n)}{p_i^n} = \frac{1}{\rho_i^n}$.

4.5 Prise en compte des conditions aux limites

Le schéma précédent est décentré ce qui nécessite la connaissance de $f_{i,j}^n$ aux noeuds de bords $i = 0$ et $i = n_x$. On pose alors les conditions aux limites suivantes

$$f_{0,j}^n = f_G(v_j), \quad \text{pour } j \text{ tel que } v_j > 0.$$

Si cette distribution est donnée par une loi de réflexion, on procède de la même façon. Par exemple, pour une réflexion spéculaire, on posera

$$f_{0,j}^n = f_{0,nv-j}^n, \quad \text{pour } j = \frac{nv}{2} \text{ à } nv$$

dans le cas où la grille de vitesse est symétrique par rapport à 0, avec un nombre de points impair.

4.6 Positivité du schéma

Le schéma préserve la positivité de la solution sous une condition CFL. En effet, le schéma est défini par :

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^n - \Delta t_n \left(\frac{v_j^+ f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x} + \frac{v_j^- f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + \Delta t_n \frac{1}{\epsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j) - f_{i,j}^n),$$

ce qui devient :

$$f_{i,j}^{n+1} = \left(1 - \Delta t_n \frac{|v_j|}{\Delta x} - \Delta t_n \frac{1}{\epsilon \tau_i^n} \right) f_{i,j}^n - \Delta t_n \frac{v_j^-}{\Delta x} f_{i+1,j}^n + \Delta t_n \frac{v_j^+}{\Delta x} f_{i-1,j}^n + \Delta t_n \frac{1}{\epsilon \tau_i^n} M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j),$$

Ainsi, $f_{i,j}^{n+1}$ est une combinaison linéaire de $f_{i,j}^n$, $f_{i+1,j}^n$, $f_{i-1,j}^n$ et $M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j)$. Tous les coefficients sont positifs, à l'exception du premier, qui impose que le pas de temps soit suffisamment petit. Par conséquent, la positivité de ce coefficient implique la condition suivante :

$$\Delta t_n \leq \left(\frac{|v_j|}{\Delta x} + \frac{1}{\epsilon \tau_i^n} \right)^{-1},$$

Cette condition doit être valable pour tout i et pour tout j , d'où la condition CFL suivante :

$$\Delta t_n \leq \left(\frac{1}{\Delta t_{\text{transp}}} + \frac{1}{\Delta t_{\text{coll}}} \right)^{-1}$$

où $\Delta t_{\text{transp}} = \frac{\Delta x}{\max_j |v_j|}$ et $\Delta t_{\text{coll}} = \min_i \epsilon \tau_i^n$.

Sans collision, la condition CFL devient :

$$\Delta t_n \leq \Delta t_{\text{transp}}$$

Le pas de temps Δt est constant, ce qui permet de le sortir de la boucle. En revanche, dans le schéma avec collision, Δt n'est plus constant et dépend du nombre de Knudsen.

5 Structure du Code

Le programme principal `bgk.f90` contient des sous-routines et des fonctions afin de structurer efficacement le code. Celui-ci est également parallélisé avec OpenMP en utilisant 4 processeurs pour réduire le temps de calcul. Pour compiler le code, il faut utiliser la commande suivante :

```
gfortran -O3 -fopenmp -o bgk bgk.f90
```

Après compilation, l'exécution du code avec `./bgk` dans le terminal affiche le temps de calcul et le nombre d'itérations pour différentes valeurs de ϵ .

Le code est structuré de la manière suivante :

- **Programme principal :**

- **bgk :** Le programme principal où sont définies les variables, les conditions aux limites, et qui appelle plusieurs sous-routines pour la simulation du modèle BGK.

- **Sous-routines :**

- **init_velocity :** Initialise les vitesses des particules (**v**) sur une plage définie par **vmin** et **vmax**.
 - **init_fn :** Initialise la fonction de distribution (**fn**) avec des valeurs basées sur la distribution de Maxwell pour les gaz à gauche et à droite.
 - **Maxwellienne :** Calcule la distribution de Maxwell pour une vitesse donnée à partir de la densité, de la vitesse et de la température.
 - **macro :** Calcule les grandeurs macroscopiques telles que la densité (ρ), la quantité de mouvement (ρu), la température (T), et l'énergie (E) à partir de la fonction de distribution **fn**.
 - **sans_collision :** Réalise une simulation sans collision, où la fonction de distribution est transportée sans l'effet de collision. Cette sous-routine utilise OpenMP pour la parallélisation des boucles et met à jour les grandeurs macroscopiques.
 - **avec_collision :** Réalise une simulation avec collision, où une relaxation est appliquée aux particules selon une règle basée sur ϵ . Le transport et la collision sont effectués dans une boucle itérative, et la mise à jour de la fonction de distribution (**fnpun**) est calculée en fonction de la densité locale et de ϵ . Cette sous-routine est également parallélisée avec OpenMP.

- `write_file_with_epsilon` La sous-routine `write_file_with_epsilon` permet d'écrire les données dans un fichier dont le nom contient la valeur de ϵ . Elle prend en entrée le nom de base du fichier, la valeur de ϵ , le numéro d'unité pour l'ouverture du fichier, ainsi que les données à écrire et les paramètres de discrétisation.

Fonctions et sous-routines OpenMP :

- Les directives OpenMP (`$!OMP`) sont utilisées dans plusieurs sous-routines pour la parallélisation des boucles, telles que :
 - `!OMP PARALLEL DO PRIVATE(i, j)` : indique qu'une boucle sera exécutée en parallèle, chaque itération étant effectuée indépendamment.
 - `!OMP END PARALLEL DO` : marque la fin de la section parallèle.

6 Résultats numériques :

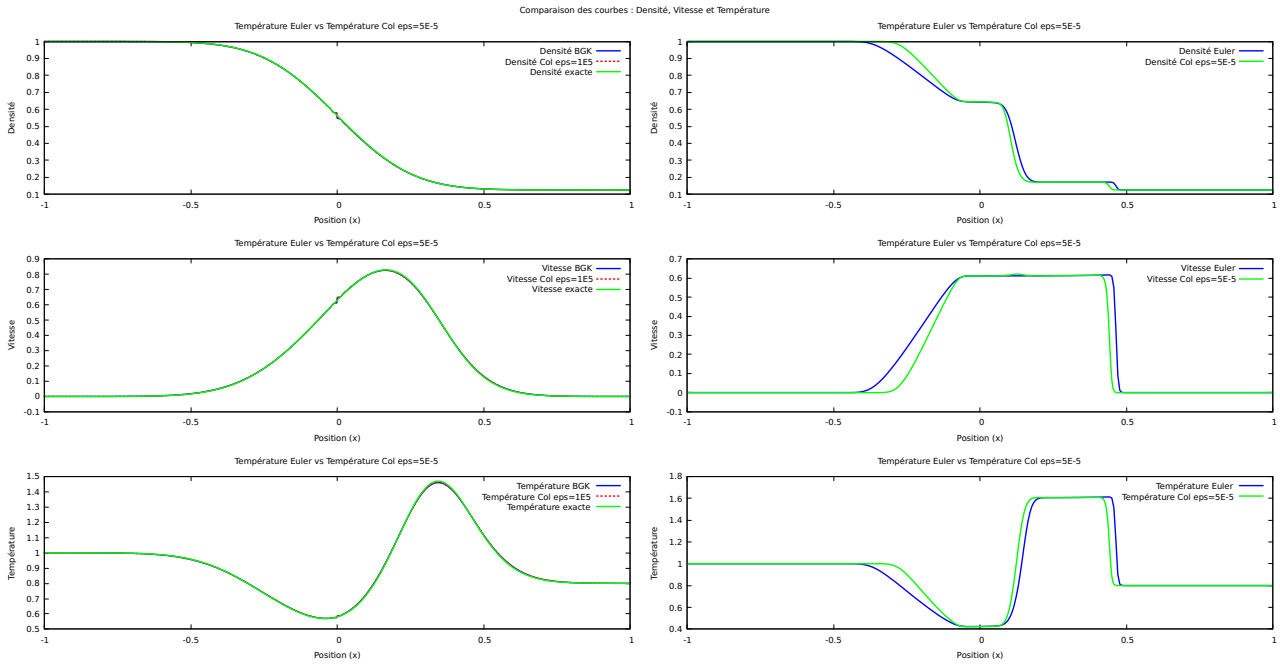


FIGURE 1 – Comparaison entre différentes valeurs macroscopiques pour les schémas sans collisions et avec collisions avec deux valeurs d'épsilon différentes et la solution exacte pour $n_v=300$ et $n_x=1500$.

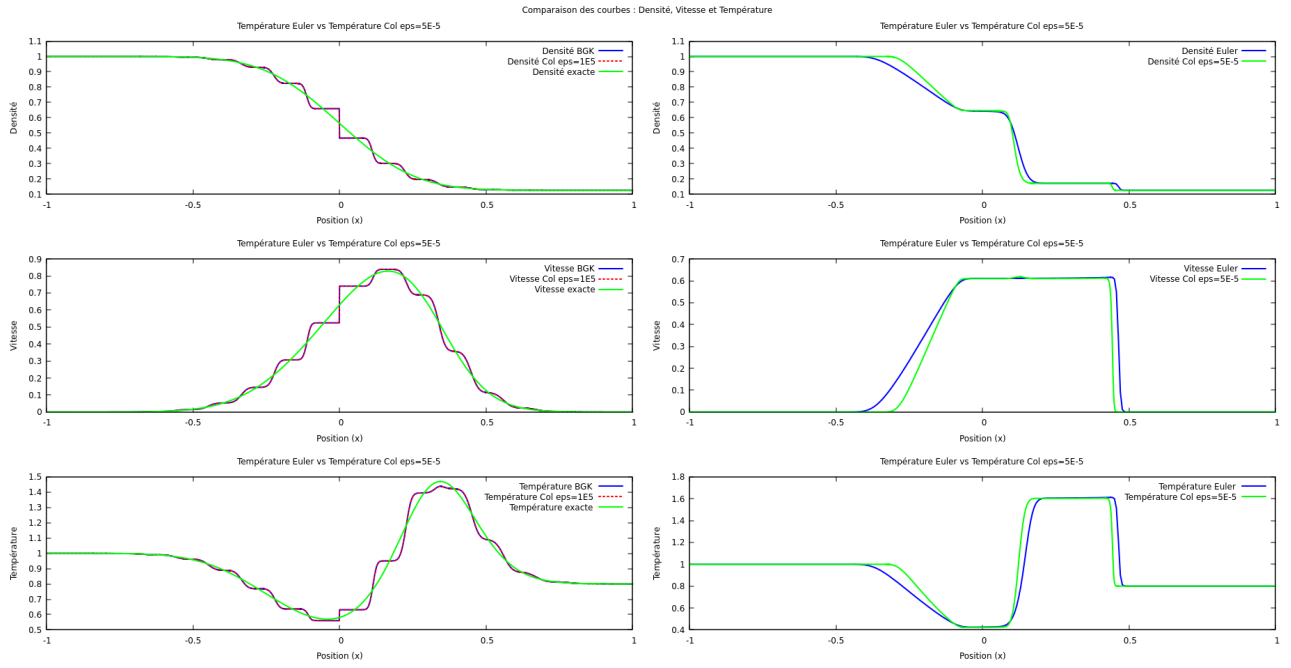


FIGURE 2 – Comparaison entre différentes valeurs macroscopiques pour les schémas sans collisions et avec collisions avec deux valeurs d'epsilon différentes et la solution exacte pour $n_v=50$ et $n_x=2000$.

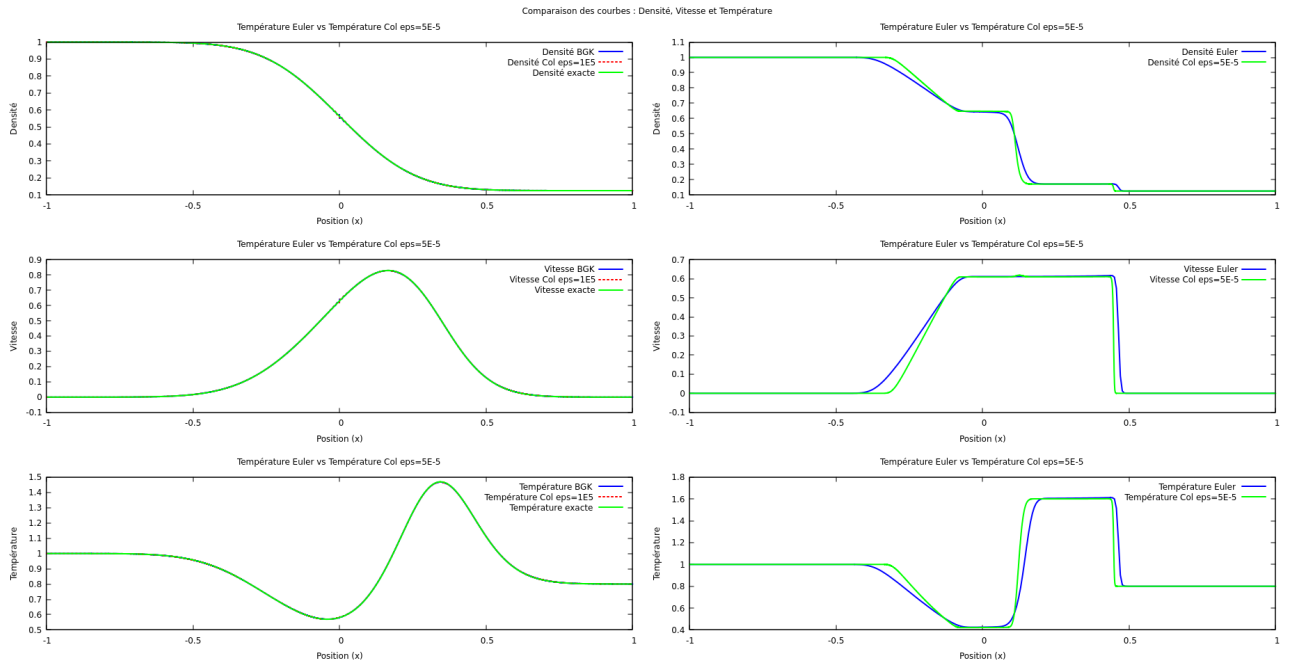


FIGURE 3 – Comparaison entre différentes valeurs macroscopiques pour les schémas sans collisions et avec collisions avec deux valeurs d'epsilon différentes et la solution exacte pour $n_v=500$ et $n_x=5000$.

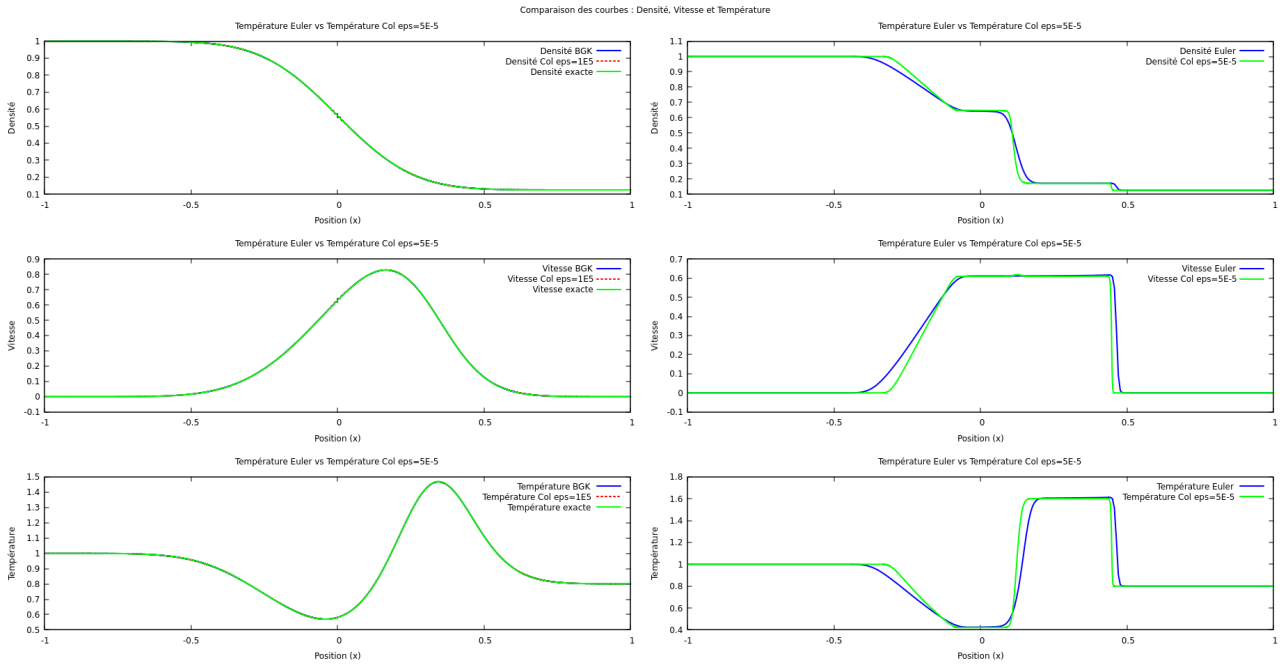
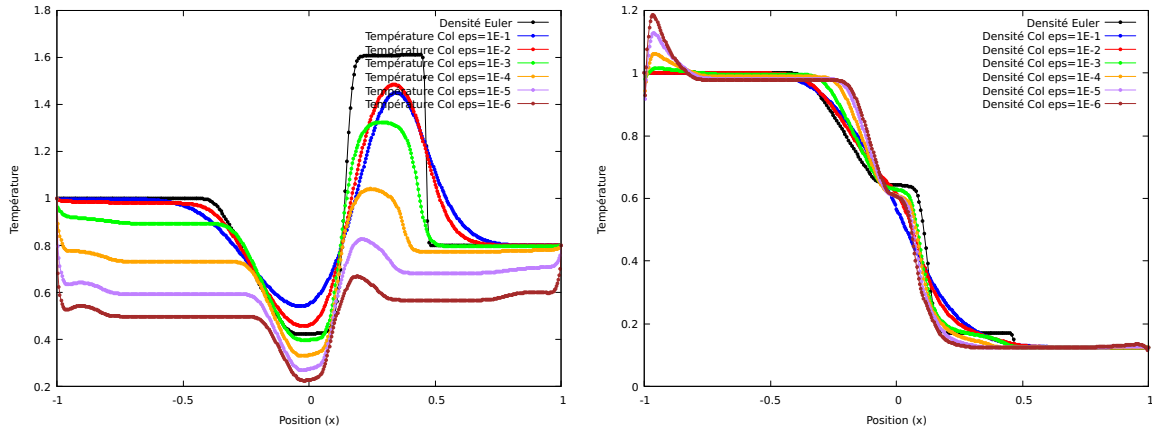


FIGURE 4 – Comparaison entre différentes valeurs macroscopiques pour les schémas sans collisions et avec collisions avec deux valeurs d'epsilon différentes et la solution exacte pour $n_v=500$ et $n_x=5000$.



((a)) Température avec grille de vitesse petite $v_{\min}=4\sqrt{T_g}$ ((b)) Densité avec grille de vitesse petite $v_{\min}=4\sqrt{T_g}$

FIGURE 5 – Comparaison avec un une grille un V_{\min} et V_{\max} petite

6.1 Analyse des résultats

Les différentes images montrent la comparaison entre la solution exacte et la solution approchée, avec et sans terme de collision, en utilisant deux valeurs d'epsilon. La première valeur d'epsilon est $\epsilon = 5 \times 10^{-5}$, utilisée pour comparer avec la méthode d'Euler, et la seconde valeur est $\epsilon = 10^5$, utilisée pour comparer avec le transport sans collision, tout en prenant également en compte la solution exacte.

On remarque que le code fonctionne bien dans les deux schémas, et que les solutions approchées s'approchent de plus en plus de la solution exacte. Cependant, il est important de noter que les résultats sont sensibles à la taille de la grille, en particulier les paramètres n_x (taille de la grille en x) et n_v (taille de la grille en vitesse v).

Pour un premier test de calcul, nous avons utilisé les valeurs v_{\min} et v_{\max} définies respectivement comme $4\sqrt{T_g}$ et $4\sqrt{T_d}$. Cependant, cette grille n'a pas fonctionné correctement pour un nombre de Knudsen très petit (Voir Figure 5). En effet, pour un nombre de Knudsen très grand, le terme de collision devient extrêmement petit et peut être négligé, ce qui nous ramène au schéma BGK du transport sans collision. En revanche, lorsque le nombre de Knudsen est très petit, le terme de collision devient significatif et il est essentiel de bien choisir la taille de la grille, c'est-à-dire v_{\min} , v_{\max} et n_v , pour obtenir une approximation précise de la solution.

Pour se rapprocher davantage de la solution d'Euler, nous avons choisi un facteur de 14 pour v_{\min} et v_{\max} au lieu de 4, afin de mieux ajuster la grille. Dans les images précédentes, nous pouvons aussi observer l'influence de

la discrétisation de la grille en n_x et n_v . En effet, pour un n_v relativement petit par rapport à n_x , comme dans la figure 2, on remarque que la courbe pour le cas du transport n'est pas lisse, mais présente des discontinuités dues à une combinaison de chocs et de détente. En revanche, lorsqu'on augmente n_v , comme dans la figure 1 pour $n_v = 300$, on observe que la fonction devient plus lisse. Cependant, un petit choc apparaît encore au niveau de $x = 0$ pour la densité et la vitesse.

Plus on raffine le maillage, comme dans la figure 3, plus la fonction devient lisse, ce qui témoigne de la meilleure approximation de la solution exacte. Cela confirme l'importance d'un maillage suffisamment fin pour obtenir des résultats précis dans le cas des équations de transport avec ou sans collision. Voir l'annexe pour plus d'images

6.2 Temps de calcul

$n_x =$	500				
$n_v =$	100				
nombre d'itération sans collision :	1751				
nombre d'itération avec collision epsilon=	0.10000000149011612	:	1755		
Temps d'exécution pour epsilon =	0.10000000149011612	:	7.4867439999999998	secondes	
nombre d'itération avec collision epsilon=	9.9999997764825821E-003	:	1801		
Temps d'exécution pour epsilon =	9.9999997764825821E-003	:	8.1908799999999999	secondes	
nombre d'itération avec collision epsilon=	1.0000000474974513E-003	:	2250		
Temps d'exécution pour epsilon =	1.0000000474974513E-003	:	10.033390000000001	secondes	
nombre d'itération avec collision epsilon=	9.9999997473787516E-005	:	6751		
Temps d'exécution pour epsilon =	9.9999997473787516E-005	:	29.2427909999999997	secondes	
nombre d'itération avec collision epsilon=	9.9999997473787516E-006	:	51751		
Temps d'exécution pour epsilon =	9.9999997473787516E-006	:	224.39541000000000	secondes	
nombre d'itération avec collision epsilon=	9.999999747524271E-007	:	501751		
Temps d'exécution pour epsilon =	9.999999747524271E-007	:	2681.4324219999999	secondes	

FIGURE 6 – Variation du temps de calcul pour différentes epsilon

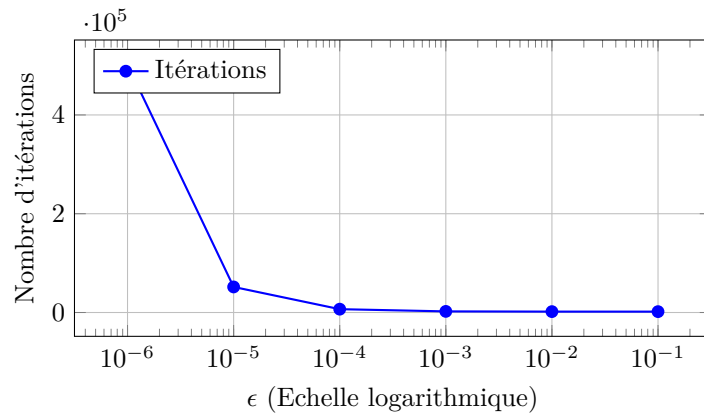


FIGURE 7 – Variation du nombre d'itérations en fonction de ϵ .

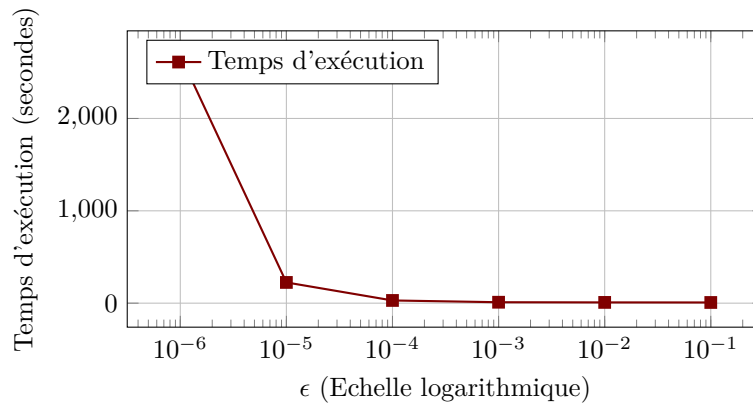
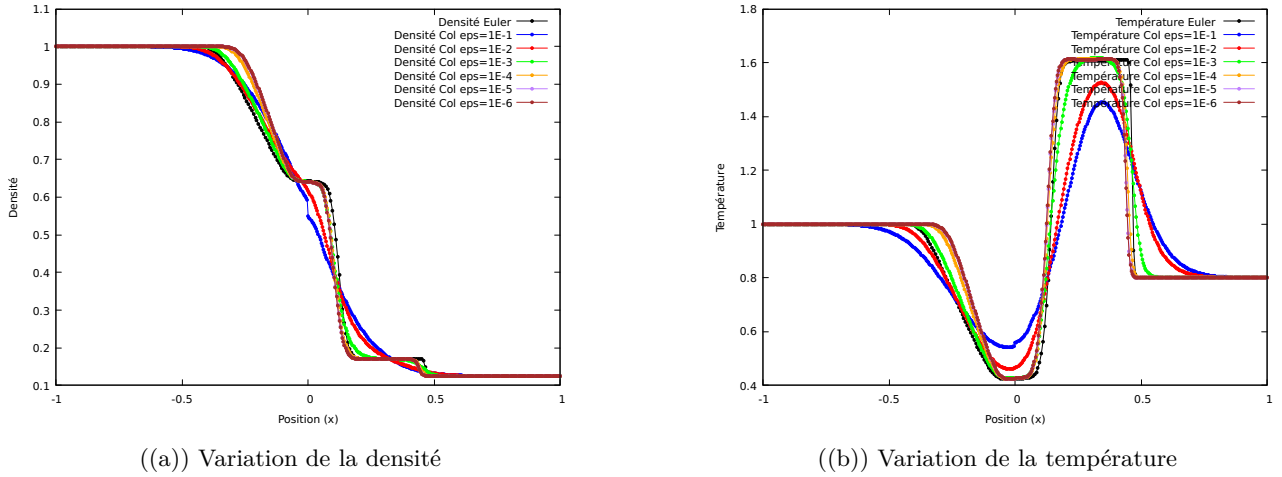


FIGURE 8 – Variation du temps d'exécution en fonction de ϵ .

FIGURE 9 – Comparaison pour différents ϵ

On remarque que, plus le nombre de Knudsen est petit, plus le nombre d'itérations et le temps de calcul augmentent, ce qui est bien cohérent on remarque aussi que le profil des deux variations est presque identique. En effet, notre condition CFL dépend du nombre de Knudsen, donc plus le nombre de Knudsen tend vers 0, plus le temps de calcul augmente. Par exemple, pour un nombre de Knudsen égal à 10^{-6} , le temps de calcul atteint 2681.43 secondes. Cela est valable pour un nombre $n = 500$ et un nombre $nv = 100$. Ainsi, plus on affine la grille en vitesse et en X , plus le temps de calcul augmente, à cause de la condition CFL qui préserve la positivité du schéma, dans les différentes simulation on a utilisé un cfl qui vaut 0.4 .

6.3 Schéma implicite

Pour résoudre le problème lié au temps de calcul, on peut utiliser un schéma implicite. En effet, ce schéma n'impose pas une condition CFL qui dépend du nombre de Knudsen. La méthode implicite consiste à inverser pour calculer f à l'itération $n + 1$. Par contre, on rencontre un problème dans le deuxième terme de la collision dans la fonction de Maxwell. On peut résoudre ce problème en calculant les quantités macroscopiques à chaque itération pour le terme sans transport et en utilisant ces conditions macroscopiques de densité et de température pour calculer la fonction avec le terme de collision.

$$f_{i,j}^{n+1} = f_{i,j}^n + \Delta t_n \left(v_j^+ \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta t_n}{\epsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^{n+1}, u_i^{n+1}, T_i^{n+1}](v_j) - f_{i,j}^{n+1}), \quad (11)$$

Donc, dans le code, on pose à chaque itération :

$$w_n = f_{i,j}^n + \Delta t_n \left(v_j^+ \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x} \right) \quad (12)$$

Puis, on applique la sous-routine macro sur w_n pour calculer les paramètres macroscopiques. Ensuite, on les utilise pour calculer f^{n+1} :

$$f_{i,j}^{n+1} = w_n + \frac{\Delta t_n}{\epsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^{n+1}, u_i^{n+1}, T_i^{n+1}](v_j) - f_{i,j}^{n+1}). \quad (13)$$

Le schéma implicite nécessite une condition CFL similaire à celle du transport, ce qui permet d'utiliser un pas de temps fixe. Cependant, le temps de calcul est supérieur à celui du schéma sans terme de collision, car ce schéma implique une application supplémentaire de la sous-routine `macro` à chaque itération.

L'intérêt principal de cette méthode réside dans le fait que, pour un ϵ très petit, tendant vers zéro, le temps de calcul reste quasiment constant. En effet, le pas de temps est fixe et ne dépend pas de la valeur de ϵ .

7 Conclusion

La méthode des différences finies s'est avérée efficace pour résoudre l'équation cinétique simplifiée en 1D, en modélisant aussi bien les régimes de transport avec collision que sans collision. La discrétisation en espace, temps et vitesse, couplée à une gestion rigoureuse des conditions aux limites, a permis d'obtenir des solutions précises et cohérentes avec les attentes théoriques.

Les simulations ont mis en évidence l'importance des paramètres de discrétisation, notamment la taille de la grille et le pas de temps, pour garantir une bonne précision et une convergence vers la solution exacte. En particulier, la sensibilité au nombre de Knudsen a souligné les limites des schémas explicites, surtout lorsque ϵ est très petit, rendant nécessaire l'utilisation d'un schéma implicite pour réduire le temps de calcul.

Le passage à un schéma implicite a permis de surmonter ces limitations, en offrant une approche plus stable et indépendante des contraintes de la condition CFL liée à ϵ . Bien que ce schéma augmente le coût par itération en raison du recalcul des grandeurs macroscopiques, il garantit des performances nettement améliorées pour des ϵ très petits.

En conclusion, cette étude met en lumière l'équilibre nécessaire entre précision numérique et coût de calcul dans la simulation de phénomènes cinétiques complexes. Elle ouvre la voie à des travaux futurs visant à optimiser davantage les algorithmes, notamment par l'utilisation de techniques avancées comme la méthode multigrille ou des solveurs parallélisés pour les systèmes linéaires issus des schémas implicites.

Annexes

Deuxième série d'images

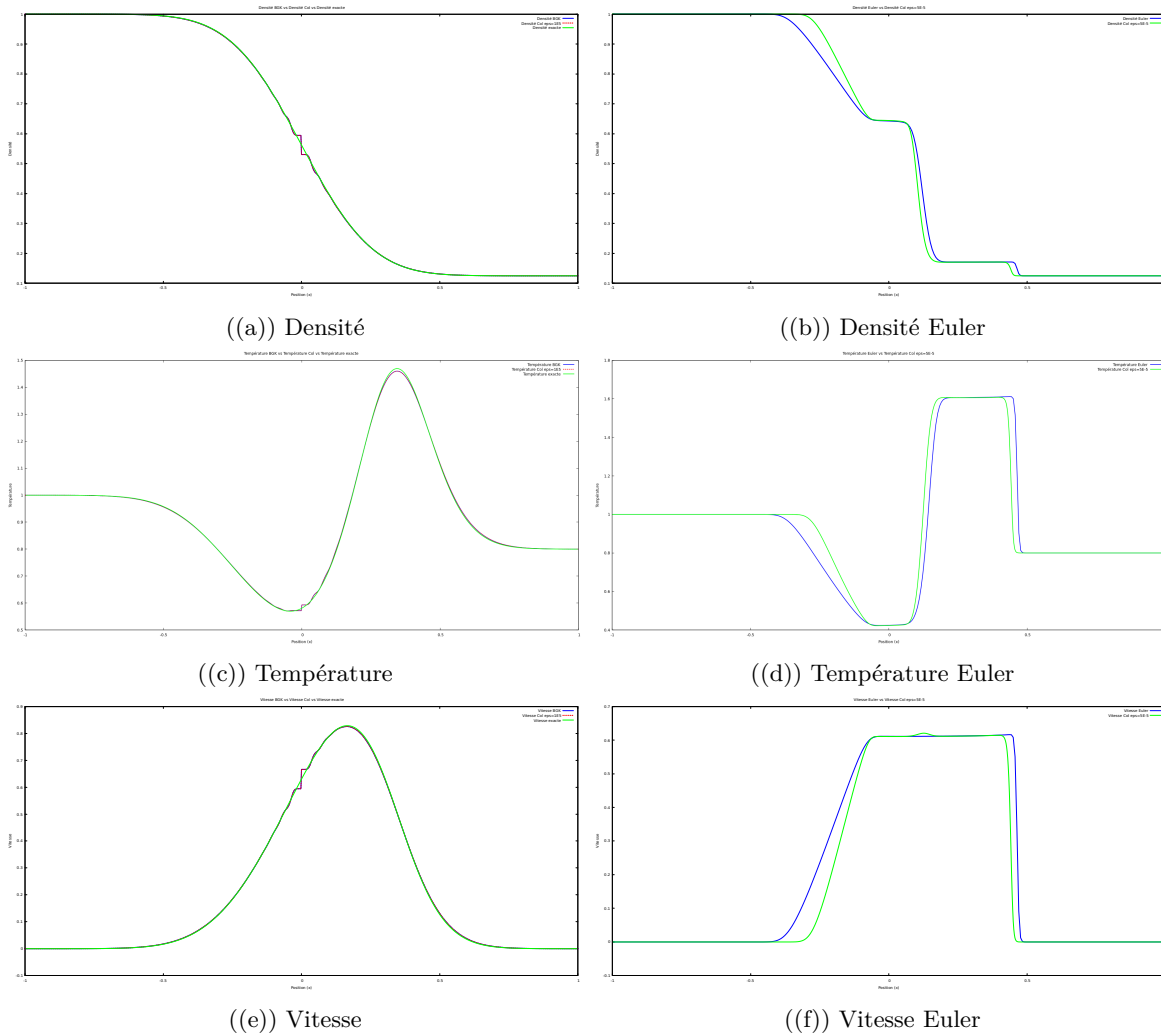


FIGURE 10 – Deuxième série d'images $n_x=500$; $n_v=200$