

Du splitting à une méthode IMEX à stabilité étendue

Josselin Massot, Marc Massot, Laurent Series

CMAP, Ecole Polytechnique

28 mai 2024

Problème de diffusion advection reaction

On cherche à résoudre l'équation :

$$\dot{u} = F_D(u) + F_R(u) + F_A(u)$$

pour simuler l'allumage d'une flamme avec chime complexe.

- F_D est un opérateur de diffusion (discrétisation de l'opérateur spatial différentiel d'ordre deux $\Delta(d\Phi) = \nabla \cdot (d\nabla\Phi)$)
- F_A un opérateur de reaction (termes très raides liés à la modélisation d'une cinétique chimique détaillée)
- F_R un opérateur d'advection (discrétisation de l'opérateur spatial différentiel d'ordre un $v \cdot \nabla\Phi$)

- Traiter le problème couplé de manière implicite :
[High order implicit time integration schemes on multiresolution adaptive grids for stiff PDE's, Duarte, Dobbins, Smooke 2016](#)
 - coût de calcul prohibitif (en particulier pour traiter les cas 3d)
- Utiliser une méthode de séparation d'opérateur avec des intégrateurs adaptés à chaque opérateur
[New resolution strategy for multiscale reaction waves using time operator splitting, space adaptive multiresolution, and dedicated high order implicit/explicit time integrators, Duarte et al. 2012](#)
 - erreur de couplage (CL) - inefficace si couplage aux échelles les plus fines (chimie complexe / transport détaillé)
- Utiliser une méthode IMEX avec des intégrateurs adaptés à chaque opérateur et des conditions de couplage à satisfaire
[PIROCK: A swiss-knife partitioned implicit–explicit orthogonal Runge–Kutta Chebyshev integrator for stiff diffusion–advection–reaction problems with or without noise, Abdulle, Vilmart, 2013](#)
 - la raideur de l'opérateur de convection peut contraindre la stabilité numérique dans des problèmes à convection dominante

Méthode explicite à domaine de stabilité étendue

Construction de la méthode Pirock

Stratégie envisagée

Méthode explicite à domaine de stabilité étendue

Construction de la méthode Pirock

Stratégie envisagée

Méthodes de Runge-Kutta classiques

On cherche à résoudre l'équation :

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t))$$

En intégrant l'équation différentielle entre t_n et $t_{n+1} = t_n + \Delta t$:

$$y_{n+1} - y_n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t)) \quad \text{avec } y_n = y(t_n) \text{ et } y_{n+1} = y(t_{n+1})$$

Pour approcher l'intégral, on va utiliser une formule de quadrature avec différents niveaux de précision.

Exemples

- Euler explicite : $y^{n+1} = y^n + \Delta t \lambda y^n$
- Méthode de Heun : $y^{n+1} = y^n + \Delta t/2 (k_1 + k_2)$
avec $k_1 = f(t_n, y_n)$ et $k_2 = f(t_n + \Delta t, y_n + \Delta t k_1)$

Domaine de stabilité des méthodes de Runge-Kutta classiques

On considère l'équation de Dalhquist $y' = \lambda y$ avec $\lambda \in \mathbb{C}$ sur laquelle on applique une méthode de Runge-Kutta ce qui donne :

$$y^{n+1} = R(z)y^n \quad \text{avec } z = \Delta t \lambda$$

La fonction $R(z)$ s'appelle fonction de stabilité et la condition $|R(z)| \leq 1$ garantit que y^k reste borné et conduit à la définition du domaine de stabilité de la méthode.

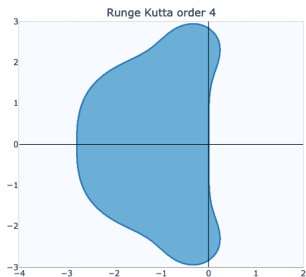
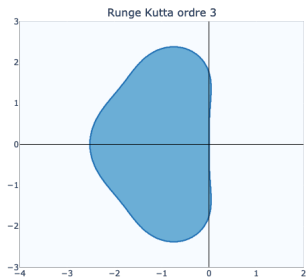
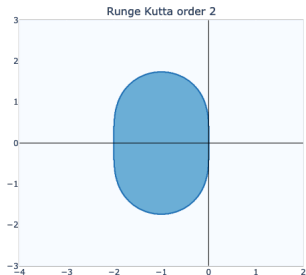
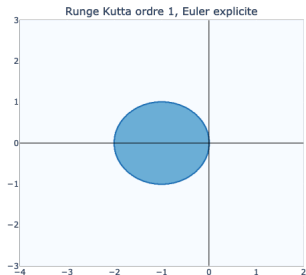
Euler explicite

$$y^{n+1} = y^n + \Delta t \lambda y^n = (1 + z)y^n = R(z)y^n$$

Le domaine de stabilité est donc :

$$\mathcal{D} = \{z \in \mathbb{C}; |z + 1| \leq 1\}$$

Domaine de stabilité des méthodes de Runge-Kutta classiques



Méthode à stabilité étendue : RKC d'ordre 1

On cherche à définir une méthode à partir de son domaine de stabilité :

$$R(z) = 1 + z + \mathcal{O}(\Delta z^2), \quad |R(z)| \leq 1 \quad \forall z \in [-l_s, 0]$$

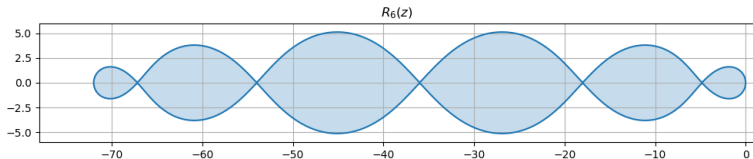
La première condition est nécessaire pour que la méthode ait une précision d'ordre un et la seconde condition assure un domaine de stabilité de taille l_s le long de l'axe des réels négatifs.

On note $T_s(\cdot)$ le polynôme de Tchebychev donné par :

$$T_0(z) = 1, \quad T_1(z) = z, \quad T_j(z) = 2zT_{j-1}(z) - T_{j-2}(z), \quad j \geq 2$$

alors la solution du problème précédent avec $l_s = -2s^2$ s'écrit :

$$R_s(z) = T_s \left(1 + \frac{z}{s^2} \right)$$



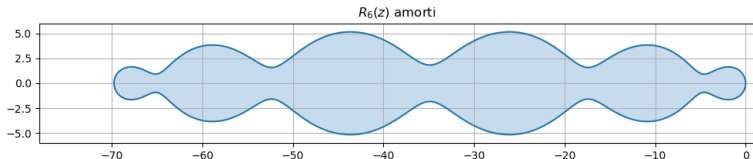
Méthode à stabilité étendue : RKC d'ordre 1

Pour résoudre $y' = f(y)$, on construit une méthode de Runge-Kutta correspondante en exploitant la relation de récurrence à trois termes des polynômes de Tchebychev :

$$g_0 = y_{n+1}, \quad g_1 = g_0 + \frac{\Delta t}{s^2} f(g_0),$$
$$g_i = \frac{2\Delta t}{s^2} f(g_{i-1}) + 2g_{i-1} - g_{i-2}, \quad i = 1, \dots, s, \quad y_{n+1} = g_s.$$

Pour éviter les points du domaine de stabilité qui ont une largeur nulle, on peut utiliser le domaine suivant :

$$R_s(z) = \frac{1}{T_s(\omega_0)} T_s(\omega_0 + \omega_1 z), \quad \omega_0 = 1 + \frac{1 - \eta}{s^2}, \quad \omega_1 = \frac{T_s(\omega_0)}{T_s'(\omega_0)}$$



Méthode ROCK 2

Pour ROCK2, on cherche à définir une méthode à partir de son domaine de stabilité :

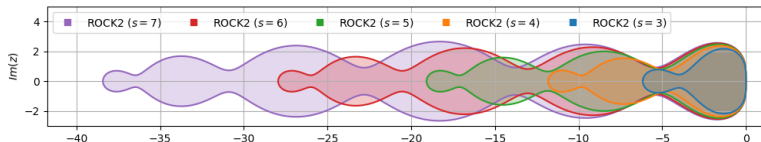
$$R(z) = 1 + z + \frac{z^2}{2} + \mathcal{O}(\Delta z^2), \quad |R(z)| \leq 1 \quad \forall z \in [-l_s, 0]$$

La première condition est nécessaire pour que la méthode ait une précision d'ordre deux et la seconde condition assure un domaine de stabilité de taille l_s le long de l'axe l'axe des réels négatifs.

On cherche à écrire la fonction de stabilité sous la forme d'un produit de 2 polynômes :

$$R_s(z) = w(z)P_{s-2}(z)$$

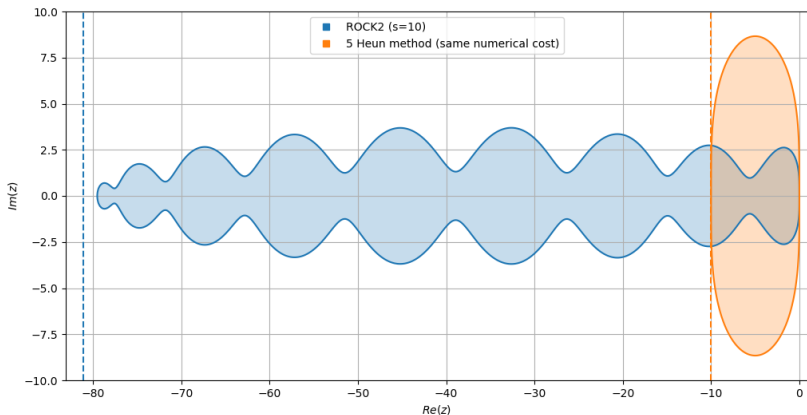
où R_s est de degré s , w de degré 2 (avec 2 racines complexes) et P_{s-2} un polynôme de degré $s - 2$ avec uniquement des racines réelles.



Notons que pour ROCK2, on a $l_s = 0.811s^2$

Méthode ROCK 2 vs méthode de Heun

Domaine de stabilité à coût computationnel équivalent :

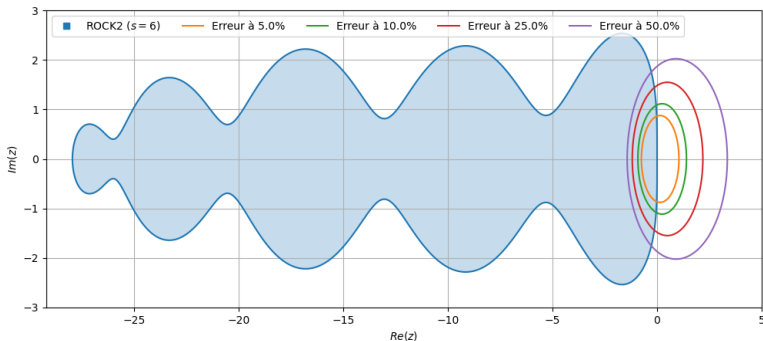


Méthode ROCK 2 et précision

Nous traçons maintenant l'erreur relative à 5%, 10%, 25% et 50% pour une valeur de s fixé. Pour cela on s'intéresse au domaine donné par :

$$\left| \frac{R_s(z) - e^z}{e^z} \right| \leq e\% \quad e = 5, 10, 25, 50$$

c'est-à-dire le domaine de \mathbb{C} où l'erreur relative de la méthode à s étages est inférieure à $e\%$.



Méthode ROCK 2 et pas de temps adaptatif

- On applique ROCK2 sur un pas de temps $\Delta t_n : y_n \rightarrow y_{n+1}$
- On estime une erreur locale :

$$err = |y_{n+1} - \hat{y}_{n+1}|$$

où \hat{y}_{n+1} est obtenue par une méthode emboîtée d'ordre 1 utilisant les étages de ROCK2 (pas de surcôt)

- On détermine un nouveau pas de temps tel que l'erreur est de l'ordre d'une tolérance donnée par l'utilisateur :

$$\Delta t_{opt} = \xi \Delta t \sqrt{\frac{tol}{err}} \quad \text{où } \xi \text{ est un facteur de sécurité}$$

Méthode ROCK 2 et pas de temps adaptatif

On considère l'équation de la chaleur dans le cas 1D :

$$\begin{cases} \partial_t u(x, t) - D \partial_{xx} u(x, t) = 0 & \text{dans } R \\ u(x, 0) = \delta_0(x), \end{cases}$$

où $\delta_0(x)$ désigne la fonction delta de Dirac à l'origine en $x = 0$.

	Rock2	Dopri5
Erreur	6.10^{-7}	8.10^{-7}
Nb. de pas de temps	526	5707
Nb. d'évaluations de fonction	3840	34244
Nb. d'étages max.	14	6

DOPRI5 est une méthode de Runge-Kutta explicite d'ordre 5 à 6 étages à pas de temps adaptatifs.

Méthode explicite à domaine de stabilité étendue

Construction de la méthode Pirock

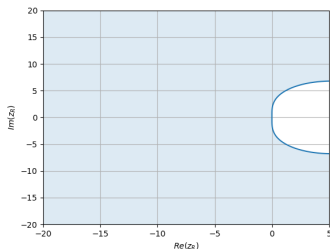
Stratégie envisagée

Méthode pour la réaction

Méthode SDIRK2 :

$$\begin{array}{c|cc} \lambda & \lambda & \\ \hline 1 - \lambda & 1 - 2\lambda & \lambda \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \quad \text{avec } \lambda = \frac{2 - \sqrt{2}}{2}$$

$$\begin{cases} y^{n+1} = y^n + \Delta t/2 (k_1 + k_2) \\ k_1 = y_n + \lambda \Delta t F_R(k_1) \\ k_2 = y_n + (1 - 2\lambda) \Delta t F_R(k_1) + \lambda \Delta t F_R(k_2) \end{cases}$$



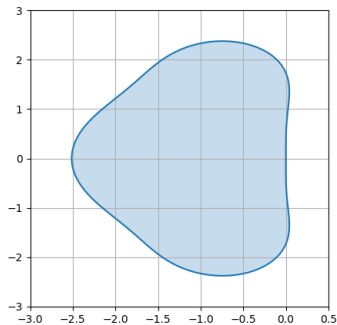
Il s'agit d'une méthode SDIRK d'ordre 2 avec d'excellentes propriétés d'amortissement (stiffly accurate et L-stable) (cf. Hairer et Wanner II)

Méthode pour la convection

Méthode RK(3,3) à 3 étages, d'ordre 3 :

0			
1/3	1/3		
2/3		2/3	
<hr/>			
	1/4	0	3/4

$$\begin{cases} y^{n+1} = y^n + \Delta t/4 k_1 + 3\Delta t/4 k_3 \\ k_1 = y_n + \Delta t/3 F_A(y_n) \\ k_3 = y_n + 2\Delta t/3 F_A(k_1) \end{cases}$$



Construction de la méthode PIROCK dans le cas de Heun

Méthode de Heun :

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, y_n) \\ k_2 = f(t_n + \Delta t, y_n + \Delta t k_1) \\ y^{n+1} = y^n + \Delta t/2 (k_1 + k_2) \end{cases}$$

Ces différents tableaux de Butcher, auxquels on ajoute des étages de couplage, permettent de construire une méthode IMEX Runge-Kutta additive qui s'écrit sous la forme :

$$u^{(i)} = u^n + \Delta t \sum_j a_{ij} F_D(u^{(i)}) + \Delta t \sum_j \bar{a}_{ij} F_R(u^{(i)}) + \Delta t \sum_j \hat{a}_{ij} F_A(u^{(i)}), \quad i = 1, \dots, s$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \sum_i b_i F_D(u^{(i)}) + \Delta t \sum_i \bar{b}_i F_R(u^{(i)}) + \Delta t \sum_i \hat{b}_i F_A(k_i)$$

Construction de la méthode IMEX dans le cas de Heun

$$u^{(1)} = u^n + \Delta t \delta F_D(u^n)$$

$$u^{(2)} = u^n + \Delta t \delta F_D(u^n) + \Delta t \gamma F_R(u^{(2)})$$

$$u^{(3)} = u^n + \Delta t (\beta F_D(u^{(2)}) + \delta F_D(u^n)) + \Delta t (\gamma F_R(u^{(3)}) + (1 - 2\gamma) F_R(u^{(2)})) + \Delta t F_A(u^{(2)})$$

$$u^{(4)} = u^n + \Delta t \delta F_D(u^n) + \Delta t (1 - 2\gamma) F_A(u^{(2)}) + \Delta t (1 - \gamma) F_R(u^{(2)})$$

$$u^{(5)} = u^n + \Delta t \delta F_D(u^n) + \frac{\Delta t F_A(u^{(2)})}{3}$$

$$u^{(6)} = u^n + \Delta t \left(\frac{2\beta F_D(u^{(2)})}{3} + \delta F_D(u^n) \right) + \Delta t \left(\frac{2\gamma F_R(u^{(3)})}{3} + \left(\frac{2}{3} - \gamma \right) F_R(u^{(2)}) \right) + \frac{2\Delta t F_A(u^{(5)})}{3}$$

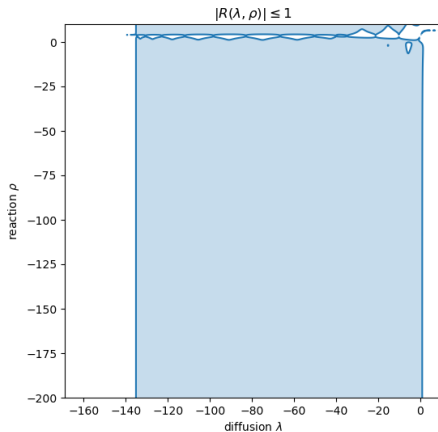
$$u^{(7)} = u^n + \Delta t F_D(u^n)$$

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t \left(\frac{F_A(u^{(2)})}{4} + \frac{3F_A(u^{(6)})}{4} \right) + \Delta t \left(\frac{F_R(u^{(2)})}{2} + \frac{F_R(u^{(3)})}{2} \right) \\ + \Delta t \left(\frac{F_D(u^{(7)})}{2} + \frac{F_D(u^n)}{2} - \frac{F_D(u^{(2)})}{2 - 4\gamma} + \frac{F_D(u^{(4)})}{2 - 4\gamma} \right)$$

Couplage reaction diffusion (avec ROCK2)

Le domaine de stabilité couplé (reaction et diffusion):

$$\mathcal{S} = \{(\lambda, \rho) \in \mathbb{R}^2, |R(\lambda, \rho)| \leq 1\}$$



Stabilité optimale pour le système couplé.

Méthode explicite à domaine de stabilité étendue

Construction de la méthode Pirock

Stratégie envisagée

Cas de l'allumage d'une flamme de diffusion (Thèse de Max Duarte, 2012):

$$\begin{cases} \partial_t Z + v_x \partial_x Z + v_y \partial_y Z - (\partial_x^2 Z + v_y \partial_y^2 Z) = 0 \\ \partial_t \theta + v_x \partial_x \theta + v_y \partial_y \theta - (\partial_x^2 \theta + v_y \partial_y^2 \theta) = F(Z, \theta) \end{cases}$$

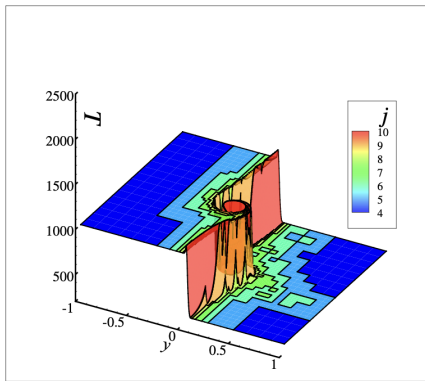
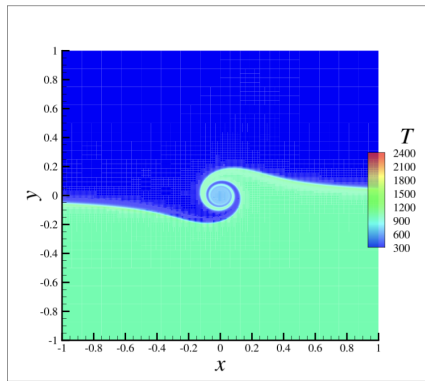
- Z fraction de mélange
- θ température réduite

Schéma de Strang (adaptation en temps et en espace):

$$S^{\Delta t} U_0 = \mathcal{R}^{\Delta t/2} \mathcal{D}^{\Delta t/2} \mathcal{C}^{\Delta t} \mathcal{R}^{\Delta t/2} \mathcal{R}^{\Delta t/2}$$

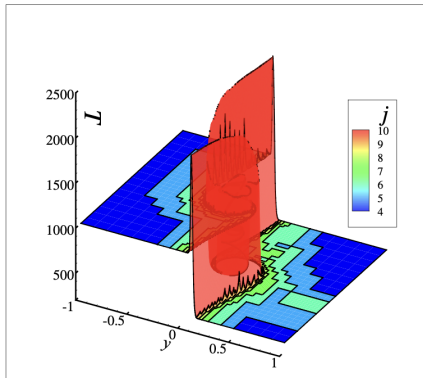
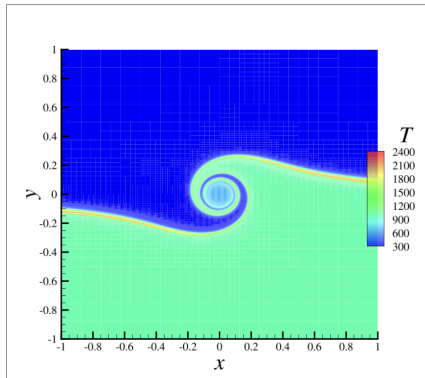
Splitting d'opérateur

Cas de l'allumage d'une flamme de diffusion (Thèse de Max Duarte, 2012):



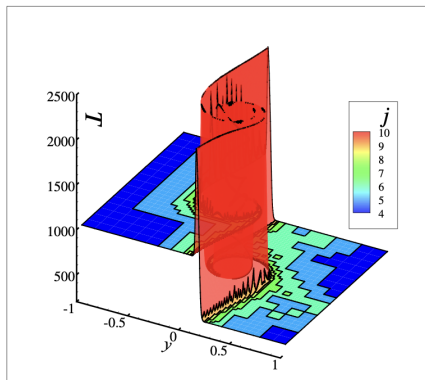
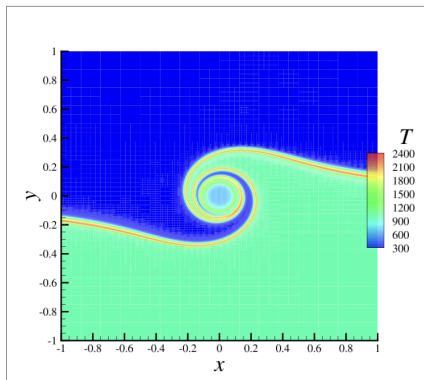
Splitting d'opérateur

Cas de l'allumage d'une flamme de diffusion (Thèse de Max Duarte, 2012):



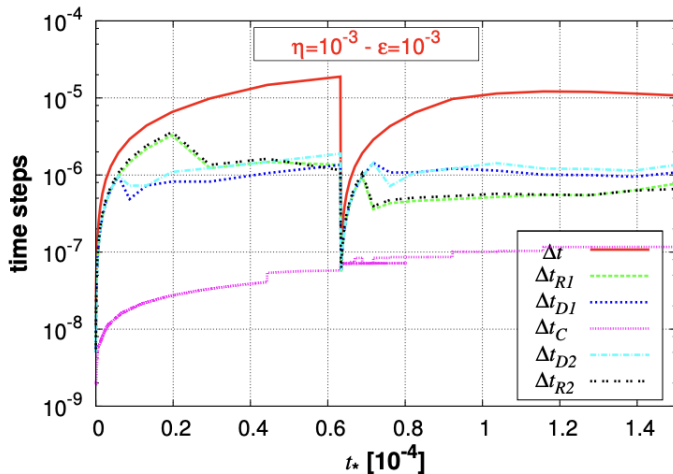
Splitting d'opérateur

Cas de l'allumage d'une flamme de diffusion (Thèse de Max Duarte, 2012):



Splitting d'opérateur

Cas de l'allumage d'une flamme de diffusion (Thèse de Max Duarte, 2012):



Splitting d'opérateur

- Pour une chimie simplifiée et une diffusion simple, la stratégie est optimale (facteur d'accélération de 100 par rapport à une grille uniforme et un pas de temps constant - contrôle d'erreur).
- En chimie complexe et transport détaillé, les opérateurs sont couplés aux plus petites échelles et l'efficacité du découplage n'est plus présente.
- La contrainte de stabilité sur la convection ne permet pas une utilisation optimale de la méthode PIROCK.

Pour un découplage optimal, on propose un splitting d'opérateur :

- traiter couplé les opérateurs de diffusion et de réaction (couplés aux plus petites échelles de temps et d'espace en chimie complexe et transport détaillé rendant le splitting inopérant) avec les avantages de la stabilité de PIROCK et le traitement parallèle du terme source comme pour le splitting
- traiter la convection avec un intégrateur adapté : schéma OSMP (cf. Daru, Tenaud 2003)

Implémentation en cours :

- utilisant la librairie PONIO pour les intégrateurs
- utilisant la librairie SAMURAI pour la multiresolution