Schémas de Boltzmann sur réseau d'ordre quatre entropiquement stables pour les systèmes hyperboliques

Thomas Bellotti, Philippe Helluy, Laurent Navoret

IRMA, Université de Strasbourg

30 mai 2024

Mini-symposium "*Méthode de Lattice Boltzmann et applications en mécanique des fluides*"
46ème CANUM - Île de Ré

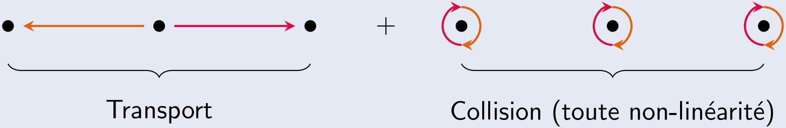
Qu'est-ce qu'on veut faire

Défi

Méthodes de Boltzmann sur réseau d'ordre au plus deux (par sur-relaxation à l'équilibre).

But [1].

- Ordre élevé : quatre en l'occurrence !
- Structure essentielle des méthodes de Boltzmann sur réseau



- Propriétés favorables en termes d'entropie.

1. B., Helluy, Navoret, Fourth-order entropy-stable lattice Boltzmann schemes for hyperbolic systems, *Soumis* (**2024**)

1 — Problème et cadre général

Problème continu et approximation par la relaxation

Système de M lois de conservation :

$$\partial_t \boldsymbol{u} + \sum_{j=1}^{d} \frac{\partial}{\partial x_j} \varphi^j(\boldsymbol{u}) = 0 \qquad \text{et} \qquad \nabla_{\boldsymbol{u}} \varphi^j \nabla_{\boldsymbol{u}} S = \nabla_{\boldsymbol{u}} G^j.$$

Équation de Boltzmann BGK à vitesse discrète [Bouchut, '**99**], [Aregba-Driollet, Natalini, '**00**] :

$$\partial_t \boldsymbol{f}_k + \sum_{j=1}^{d} V_k^j \frac{\partial \boldsymbol{f}_k}{\partial x_j} = -\frac{1}{\epsilon}(\boldsymbol{f}_k - \boldsymbol{f}_k^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{u})), \qquad k \in [\![1, q]\!] \qquad \left[\text{avec} \quad \boldsymbol{u} = \sum_{k=1}^{q} \boldsymbol{f}_k\right].$$

Contraintes : lien avec le système de lois de conservation

$$\boldsymbol{u} = \sum_{k=1}^{q} \boldsymbol{f}_k^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{u}), \qquad \varphi^j(\boldsymbol{u}) = \sum_{k=1}^{q} V_k^j \boldsymbol{f}_k^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{u}), \quad j \in [\![1, d]\!].$$

Cela donne : $\boldsymbol{f}_k \approx \boldsymbol{f}_k^{\mathrm{eq}}$ lorsque $\epsilon \to 0^+$.

Entropie et choix des vitesses discrètes

Entropie microscopique [Dubois, '13] :

$$\Sigma(\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k) = \sum_{k=1}^{q} s_k(\boldsymbol{f}_k),$$

où les entropies cinétiques $s_1, \dots, s_q : \mathbb{R}^M \to \mathbb{R}$ sont des fonctions convexes.
Lien avec l'entropie (de Lax) :

$$S(\boldsymbol{u}) = \min_{\boldsymbol{u}=\sum_{k=1}^{k=q} \boldsymbol{f}_k} \Sigma(\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_k) = \Sigma(\boldsymbol{f}_1^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{u}), \dots, \boldsymbol{f}_k^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{u})).$$

Choix de vitesses discrètes :

- $d = 1$. Deux vitesses : $q = 2$, donc $\mathrm{D}_1\mathrm{Q}_2^M$

$$V_1 = V > 0, \qquad V_2 = -V < 0$$

- $d = 2$. Quatre vitesses : $q = 4$, donc $\mathrm{D}_2\mathrm{Q}_4^M$.

$$\boldsymbol{V}_1 = (V, 0), \quad \boldsymbol{V}_2 = (0, V), \quad \boldsymbol{V}_3 = (-V, 0) \quad \boldsymbol{V}_4 = (0, -V).$$

  Les contraintes ne donnent pas tout.

2 — Construction du schéma d'ordre quatre

Plan d'attaque

Étape (I)

Schéma de Boltzmann
sur réseau standard

• ordre deux
• asymétrique en temps

$\xrightarrow[\text{symétrisation en temps}]{}$

Étape (II)

Schéma de Boltzmann
sur réseau symétrique (ψ)

• ordre deux
• symétrique en temps

$\Big\downarrow$ composition

Étape (III)

Schéma de Boltzmann
sur réseau d'ordre quatre (ϕ)

• ordre quatre
• symétrique en temps

On suit la démarche de [McLachlan, Quispel, '02] : symétrie.

(I) – Schéma de Boltzmann sur réseau standard

Discrétisation d'espace : $\Delta x \mathbb{Z}^d$, avec $\Delta x > 0$. Pas de temps : $\Delta t > 0$.

$$\underbrace{\partial_t \boldsymbol{f}_k + \sum_{j=1}^{d} V_k^j \frac{\partial \boldsymbol{f}_k}{\partial x_j}}_{\text{transport}} = \underbrace{-\frac{1}{\epsilon}(\boldsymbol{f}_k - \boldsymbol{f}_k^{\text{eq}}(\boldsymbol{u}))}_{\text{relaxation}}, \qquad k \in [\![1, q]\!].$$

- Transport : $\mathbf{T}(\Delta t)$. N'importe quel schéma consistant à un pas. Comme $\boldsymbol{V}_k = V\mathbb{Z}^d$, on choisit $V\Delta t/\Delta x = \kappa \in \mathbb{N}^*$.

$$\boldsymbol{f}_k(\Delta t, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{f}_k(0, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{V}_k \Delta t) = \boldsymbol{f}_k(0, \boldsymbol{x} - \underbrace{\kappa \frac{\boldsymbol{V}_k}{V}}_{\in \mathbb{Z}^d} \Delta x), \qquad \boldsymbol{x} \in \Delta x \mathbb{Z}^d.$$

- Relaxation : $\mathbf{R}_\omega$. Méthode des trapèzes (gardée explicite) [Dellar, '13].

$$\boldsymbol{f}_k(\Delta t) = \frac{2\epsilon - \Delta t}{2\epsilon + \Delta t} \boldsymbol{f}_k(0) + \frac{2\Delta t}{2\epsilon + \Delta t} \boldsymbol{f}_k^{\text{eq}}(\boldsymbol{u}(0)) \xrightarrow[\epsilon \to 0]{} -\boldsymbol{f}_k(0) + 2\boldsymbol{f}_k^{\text{eq}}(\boldsymbol{u}(0)).$$

Plus généralement, une relaxation indépendente de Δt :

$$\boldsymbol{f}_k(\Delta t) = (1 - \omega)\boldsymbol{f}_k(0) + \omega \boldsymbol{f}_k^{\text{eq}}(\boldsymbol{u}(0)), \qquad \text{avec} \qquad \omega \in]0, 2].$$

Remarque

- $\mathbf{R}_{\omega=2}$ *est une involution :* $\mathbf{R}_{\omega=2}\mathbf{R}_{\omega=2} = \mathbf{Id}$. *On indiquera* $\mathbf{R} := \mathbf{R}_{\omega=2}$.
  Réversible $\rightarrow \approx$ *conservation de l'entropie.*
- $\mathbf{R}_{\omega=1}$ *est une projection :* $\mathbf{R}_{\omega=1}\mathbf{R}_{\omega=1} = \mathbf{R}_{\omega=1}$.
  Irréversible $\rightarrow \approx$ *dissipation de l'entropie.*

$$\psi(\Delta t) = \mathbf{R}\mathbf{T}(\Delta t) \qquad (\text{ou} \quad \psi(\Delta t) = \mathbf{T}(\Delta t)\mathbf{R})$$

- Solveur d'ordre deux pour les lois de conservation [Dubois, '22] et [B., '23].
- Pas symétrique en temps $\rightarrow$ on ne peut pas procéder comme dans [McLachlan, Quispel, '02]. On aimerait

$$\psi(\Delta t)\psi(-\Delta t) = \mathbf{Id} \qquad \text{et} \qquad \psi(0) = \mathbf{Id}.$$

(II) – Schéma de Boltzmann sur réseau symétrique

- Formule de Strang [Strang, '68] :

$$\psi(\Delta t) = \mathbf{T}\Big(\frac{\Delta t}{2}\Big)\mathbf{R}\mathbf{T}\Big(\frac{\Delta t}{2}\Big) \qquad \rightarrow \qquad \psi(0) = \mathbf{R} \neq \mathbf{Id}.$$

- Deux formules de Strang juxtaposées :

$$\psi(\Delta t) = \mathbf{T}\Big(\frac{\Delta t}{4}\Big)\mathbf{R}\mathbf{T}\Big(\frac{\Delta t}{4}\Big)\mathbf{T}\Big(\frac{\Delta t}{4}\Big)\mathbf{R}\mathbf{T}\Big(\frac{\Delta t}{4}\Big),$$

Cela nous convient. Cependant, il reste d'ordre deux seulement.

(III) – Schéma de Boltzmann sur réseau d'ordre quatre

Soit

$$\boldsymbol{y}'(t) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{y}(t)), \qquad \text{donc} \qquad \boldsymbol{y}(t) = e^{t\boldsymbol{g}}\boldsymbol{y}(0).$$

Si $\boldsymbol{\psi}$ symétrique et d'ordre deux, alors $\exists \boldsymbol{d}$ tel que (cf. [McLachlan, Quispel, '**02**])

$$\boldsymbol{\psi}(\Delta t) = e^{\Delta t \boldsymbol{g} + \Delta t^3 \boldsymbol{d}} + \mathcal{O}(\Delta t^5).$$

On pose :

$$\boldsymbol{\phi}(\Delta t) = \boldsymbol{\psi}(\alpha \Delta t)^n \boldsymbol{\psi}(\beta \Delta t) \boldsymbol{\psi}(\alpha \Delta t)^n,$$

tel que

$$\boldsymbol{\phi}(\Delta t) = e^{\Delta t (2n\alpha + \beta)\boldsymbol{g} + \Delta t^3 (2n\alpha^3 + \beta^3)\boldsymbol{d}} + \mathcal{O}(\Delta t^5).$$

Pour gagner l'ordre quatre, on impose :

$$\begin{aligned} 2n\alpha + \beta &= 1, \\ 2n\alpha^3 + \beta^3 &= 0. \end{aligned}$$

(III) – Schéma de Boltzmann sur réseau d'ordre quatre

- Pour $n = 1, 2, 3$, on a toujours $\alpha, \beta \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$.
- Pour $n = 4$, on a $\alpha = 1/6 \in \mathbb{Q}$ et $\beta = -1/3 \in \mathbb{Q}$. Donc on va utiliser

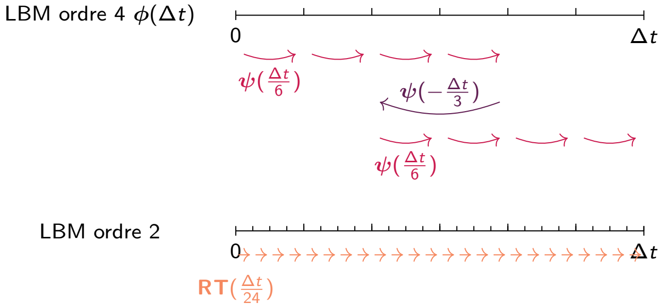
$$\phi(\Delta t) = \psi\left(\frac{\Delta t}{6}\right)^4 \psi\left(-\frac{\Delta t}{3}\right)\psi\left(\frac{\Delta t}{6}\right)^4 \qquad \text{avec} \qquad V\Delta t/(24\Delta x) = \kappa \in \mathbb{N}^*$$

Proposition (Stabilité L^2)

Soient $d = 1$, $M = 1$, et $\varphi(u) = au$. Considérons un schéma D_1Q_2. Alors, $\psi(\frac{\Delta t}{6})$, $\psi(-\frac{\Delta t}{3})$, et $\phi(\Delta t)$ sont L^2-stables sous condition

$$\frac{|a|}{V} = \frac{|a|\Delta t}{24\kappa\Delta x} < 1.$$

Des tests numériques préliminaires : ordre



- Burgers 1D.
- Domaine $[0, 1]$ (périodique).
- Donnée initiale
  $u(t = 0, x) = \sin(2\pi x)$
  Équilibre
  $\boldsymbol{f}_k(t = 0) = \boldsymbol{f}_k^{\text{eq}}(\boldsymbol{u}(t = 0))$.
- Vitesse cinétique $V = 1.2$ et $T = 1/10$.

	LBM ordre 2		LBM ordre 4	
Δx	Erreur L^2	Ordre	Erreur L^2	Ordre
2.000E-03	8.592E-05		3.370E-06	
1.250E-03	3.358E-05	2.00	1.552E-06	**1.65**
7.813E-04	1.404E-05	1.86	1.742E-07	**4.65**
4.883E-04	5.494E-06	2.00	3.365E-08	**3.50**
3.053E-04	2.160E-06	1.99	5.184E-09	**3.98**
1.908E-04	7.799E-07	2.17	8.688E-10	**3.80**
1.193E-04	3.057E-07	1.99	1.221E-10	**4.18**
7.454E-05	1.287E-07	1.84	2.109E-11	**3.74**

Des tests numériques préliminaires : ordre

- Saint-Venant 1D avec gravité $g = 1$.
- Domaine $[0, 1]$ (périodique).
- Donnée initiale $(h, u)(t = 0, x) = (1/2 + 1/5 \sin(2\pi x), 0)$ à l'équilibre.
- Vitesse cinétique $V = 1.2$ et $T = 5/16$.

$$\text{Err-Estim}_h = \sqrt{\sum_{k\in\mathbb{Z}} \Delta x |h_{\Delta x}(T, k\Delta x) - h_{\Delta x/2}(T, k\Delta x)|^2},$$

$$\text{Err-Estim}_u = \sqrt{\sum_{k\in\mathbb{Z}} \Delta x |u_{\Delta x}(T, k\Delta x) - u_{\Delta x/2}(T, k\Delta x)|^2},$$

	Hauteur h		Vitesse u	
Δx	Err-Estim$_h$	Ordre	Err-Estim$_u$	Ordre
7.8125E-03	5.8333E-06		2.9538E-05	
3.9063E-03	7.9483E-07	**2.88**	1.6474E-06	**4.16**
1.9531E-03	1.0703E-07	**2.89**	4.8759E-08	**5.08**
9.7656E-04	7.6700E-09	**3.80**	2.9001E-09	**4.07**
4.8828E-04	4.9440E-10	**3.96**	1.8273E-10	**3.99**
2.4414E-04	3.1134E-11	**3.99**	1.1456E-11	**4.00**
1.2207E-04	1.9495E-12	**4.00**	7.1665E-13	**4.00**
6.1035E-05	1.2202E-13	**4.00**	4.5492E-14	**3.98**

3 — Entropie

Stabilité entropique

Bilan d'entropie microscopique sur le transport :

$$\sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} \Sigma(\mathbf{T}(\Delta t)(\boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{x}), \dots, \boldsymbol{f}_q(\boldsymbol{x})))$$
$$= \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} \sum_{k=1}^{q} s_k(\boldsymbol{f}_k(\boldsymbol{x} - \kappa \frac{\boldsymbol{V}_k}{V}\Delta x)) = \sum_{k=1}^{q} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} s_k(\boldsymbol{f}_k(\boldsymbol{x} - \kappa \frac{\boldsymbol{V}_k}{V}\Delta x))$$
$$= \sum_{k=1}^{q} \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} s_k(\boldsymbol{f}_k(\boldsymbol{x})) = \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} \Sigma(\boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{x}), \dots, \boldsymbol{f}_q(\boldsymbol{x})).$$

Bilan d'entropie microscopique sur la collision :

$$\Sigma(\mathbf{R}_{\omega=2}(\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_q)) \neq \Sigma(\boldsymbol{f}_1, \dots, \boldsymbol{f}_q),$$

... sauf dans le cas linéaire $\varphi^j(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{A}^j\boldsymbol{u}$ avec l'entropie quadratique naturelle et des entropies cinétiques satisfaisant des relations de compatibilité avec celle-ci.

Stabilité entropique

On introduit le bilan d'entropie microscopique à travers la collision :

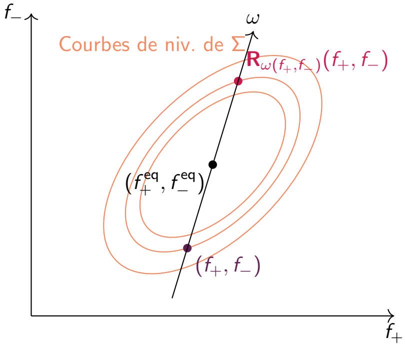
$$\Delta\Sigma_{(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q)}(\omega) = \Sigma(\mathbf{R}_\omega(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q)) - \Sigma(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q).$$

A chaque relaxation, pour tout $\boldsymbol{x} \in \Delta x \mathbb{Z}^d$ et donc chaque $\boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{x}),\dots,\boldsymbol{f}_q(\boldsymbol{x})$, on résout

Trouver $\quad \omega = \omega(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q) \quad$ tel que

$$\Delta\Sigma_{(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q)}(\omega) = 0,$$

et on relaxe avec $\mathbf{R}_{\omega(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q)}$.



Involution :

$$\mathbf{R}_{\omega(\mathbf{R}_{\omega(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q)}(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q))}\mathbf{R}_{\omega(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q)}(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q) = (\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q),$$

Stabilité entropique

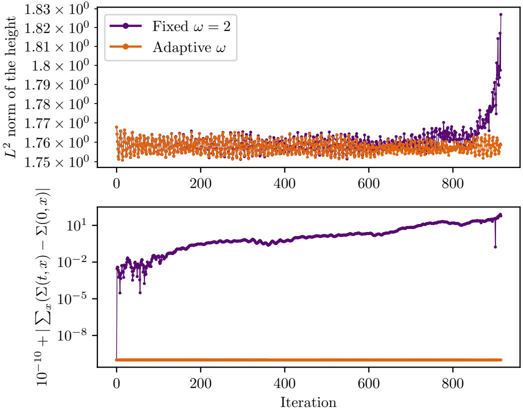
L'entropie de Lax diminue au cours des calculs :

$$
\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} S(\boldsymbol{u}(t,\boldsymbol{x})) &= \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} \min_{\boldsymbol{u}(t,\boldsymbol{x})=\sum_{k=1}^{k=q}\boldsymbol{f}_k} \Sigma(\boldsymbol{f}_1,\dots,\boldsymbol{f}_q) \\
&\leq \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} \Sigma(\boldsymbol{f}_1(t,\boldsymbol{x}),\dots,\boldsymbol{f}_q(t,\boldsymbol{x})) \\
&= \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} \Sigma(\boldsymbol{f}_1(0,\boldsymbol{x}),\dots,\boldsymbol{f}_q(0,\boldsymbol{x})) \\
&= \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} \Sigma(\boldsymbol{f}_1^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{u}(0,\boldsymbol{x})),\dots,\boldsymbol{f}_q^{\mathrm{eq}}(\boldsymbol{u}(0,\boldsymbol{x}))) = \sum_{\boldsymbol{x}\in\Delta x\mathbb{Z}^d} S(\boldsymbol{u}(0,\boldsymbol{x})),
\end{aligned}
$$

l'avant-dernière égalité suppose qu'on parte à l'équilibre.

Test numériques : conservation de l'entropie

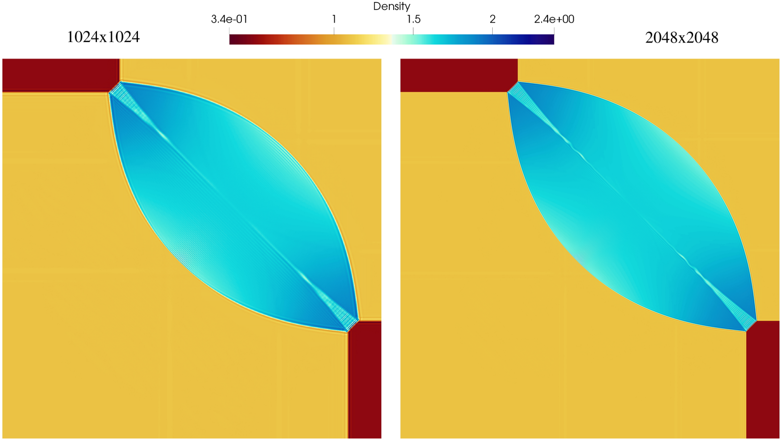
- Système de Saint-Venant 1D.
- Domaine $[0, 1]$ (périodique) et maillage de 100 points.
- Problème sur ω résolu par quasi-Newton.
- Données initiales $(h, u)(t = 0, x) = (2, 0)\chi_{x<1/2} + (3/2, 2)\chi_{x\geq 1/2}$ à l'équilibre.
- Vitesse cinétique $V = 6$.



Test numériques : Euler en 2D avec Riemann

Euler 2D avec la configuration 4 de [Lax, Liu, '98]. On utilise

$$\phi(\Delta t) = \left(\mathbf{R}_{\omega=1}\psi\left(\frac{\Delta t}{6}\right)\right)^4 \mathbf{R}_{\omega=1}\psi\left(-\frac{\Delta t}{3}\right)\left(\mathbf{R}_{\omega=1}\psi\left(\frac{\Delta t}{6}\right)\right)^4$$



Implémentation parallèle sur carte graphique en `OpenCL`.

Conclusions et perspectives

Conclusions :

- LBM d'ordre quatre pour tout système de loi de conservation.
  Brique de base d'ordre deux symétrique + composition avec poids rationnels.
- Bat largement le schéma LBM d'ordre deux même à résolution faible.
- Stabilisation en entropie par modulation du paramètre de relaxation.

Perspectives :

- Limitation (à priori et à posteriori).
- Positivité.
- Conditions aux limites.
- Ordre six.

Merci beaucoup de votre attention !