

Stabilité non linéaire d'un schéma de Boltzmann sur réseau grâce à une optimisation globale

F. Dubois^{†,§}, C. Saint-Jean*, M. M. Tekitek*



CANUM, 27 au 31 mai 2024

30 mai 2024 - Ile de Ré



La méthode de Boltzmann sur réseau.

D2Q9 pour modéliser les fluides

Contexte : Stabilité non linéaire - Cas test Minion

Exploration des paramètres libres du D2Q9 MRT

Recherche de paramètres stables par optimization globale

Conclusions et perspectives



Equation de Boltzmann :

- Une vision intermédiaire entre le macroscopique et le microscopique, nommée **mésoscopique**.
- La densité de masse $f(x, v, t)$ permet de décrire la masse autour du point x et de la vitesse v :

$$dm = f(x, v, t)dx dv.$$

Les moments de f :

$$\begin{aligned} \text{densité :} \quad \rho(x, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} f(x, v, t)dv, \\ \text{vitesse :} \quad (\rho u)(x, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} v f^{eq}(x, v, t)dv, \\ \text{énergie :} \quad (\rho E)(x, t) &= \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|v|^2 f^{eq}(x, v, t)dv. \end{aligned}$$



L'évolution dynamique (l'équation de Boltzmann) :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f = Q(f), \quad x \text{ in } \mathbb{R}^3, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad t > 0.$$

Deux étapes fondamentales :

- Le transport des particules microscopiques (sans le terme $Q(f)$), c'est une simple équation d'advection avec la vitesse v .

$$\frac{\partial f}{\partial t}(x, v, t) + v \cdot \nabla_x f(x, v, t) = 0.$$

- La collision représentée par le terme $Q(f)$.



L'opérateur de collision $Q(f)$:

- Conserve la masse, l'impulsion et l'énergie.
- Le noyau de collision $Q(f)$

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f) dv = 0, \quad \int_{\mathbb{R}^3} v Q(f) dv = 0, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|v|^2}{2} Q(f) dv = 0,$$

- L'équilibre thermodynamique qui satisfait à l'annulation globale des collisions :

$$Q(f^{eq}) = 0,$$

où f^{eq} suit une loi de Gauss (ou de Maxwell Boltzmann).

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} J = 0, \\ \frac{\partial J_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} v_j v_k f(x, v, t) dv \right\} = 0, \quad 1 \leq j \leq 3, \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div} \left\{ \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 v f(x, v, t) dv \right\} = 0. \end{array} \right.$$

- méthode de Chapman-Enskog :
développement de f autour de l'équilibre .

⇒ les équations de Navier-Stokes.



- L'espace de configuration \mathbb{R}^3 est maillé.
- Espace des phases, discrétisé en un ensemble fini de q vitesses discrètes au lieu de $v \in \mathbb{R}^3$.

Ainsi l'équation de Boltzmann devient :

$$\frac{\partial f_j}{\partial t} + v_j \cdot \nabla_x f_j = Q_j(f), \quad 0 \leq j \leq q - 1,$$

où $f = (f_0, \dots, f_{q-1}) \in \mathbb{R}^q$.



Un système "Boltzmann à vitesses discrètes" modèle DdQq. (un schéma en dimension d et avec q vitesses discrètes.

- Espace discrétisé par un maillage de carrés réguliers de pas Δx .
- Le temps discrétisé par un pas fixe Δt .
- $\lambda = \frac{\Delta x}{\Delta t}$ l'échelle de vitesse constante.
- Espace des vitesses discrétisé en q vitesses $v_j = \lambda e_j, 0 \leq j \leq q - 1$.

L'évolution discrète :

$$f_i(x, t + \Delta t) = f_i^*(x - v_i \Delta t, t), \quad 0 \leq i \leq q - 1$$

où l'exposant * désigne les quantités après collision.



- Advection : $f_i(x, t + \Delta t) = f_i(x - v_i \Delta t, t)$, avec $x - v_i \Delta t$ un sommet.
Equation d'advection : $\frac{\partial f}{\partial t} + v_i \frac{\partial f}{\partial x} = 0$,
La méthode des caractéristiques est exacte.
- Collision : représentée par le terme $Q_i(f)$, **locale** en espace.
- Approximation Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) :

$$Q_i(f) = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{\text{eq}})$$

avec $\tau > 0$ constante de temps très petite à l'échelle macroscopique, et f_i^{eq} et l'approximation de la distribution d'équilibre.



- Approximation MRT (Multiple time relaxation) : Etape décrite dans l'espace des "moments" m (combinaisons linéaires des f) d'Humières (1992).

$$m_k = \sum_j M_{kj} f_j.$$

où la matrice $M = (M_{kj})_{1 \leq k, j \leq q}$ est inversible.

Moments conservés :

$$m_0^* = m_0, m_1^* = m_1, \dots, m_N^* = m_N.$$

Moments non-conservés : $\frac{dm_k}{dt} + \frac{1}{\tau_k} (m_k - m_k^{eq}) = 0, \quad k \geq N + 1.$

Relaxent vers m_k^{eq} avec la constante τ_k . Euler explicite :

$$m_k^* = (1 - s_k) m_k + s_k m_k^{eq}, \quad k \geq N + 1.$$

$s_k = \frac{\Delta t}{\tau_k} < 2$ pour la stabilité. m_k^{eq} fonction des moments conservés.



L'évolution de la population f_i :

$$f_i(x, t + \Delta t) = f_i^*(x - v_i \Delta t, t), \quad 0 \leq i \leq 8$$

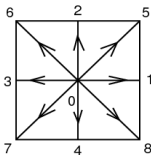
où * décrit les quantités après la collision.

• Moments conservés :

$$m_0 = \rho = \sum_{i=0}^8 f_i \text{ (densité)}$$

$$m_1 = j_x = \rho u = \sum_{j=0}^8 v_j^1 f_j = \lambda(f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8),$$

$$m_2 = j_y = \rho v = \sum_{j=0}^8 v_j^2 f_j = \lambda(f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8).$$





- Relaxation des moments : $m_j^* = m_j - s_j(m_j - m_j^{eq})$

	m_j	m_j^{eq}	coeff. de relaxation
énergie	e	$\alpha\rho + \frac{\gamma_3}{\lambda^2}(j_x^2 + j_y^2)$	s_3
carré de l'énergie	ϵ	$\beta\rho + \frac{\gamma_4}{\lambda^2}(j_x^2 + j_y^2)$	s_4
flux d'énergie	q_x	$c_1 \frac{j_x}{\lambda}$	s_5
flux d'énergie	q_y	$c_2 \frac{j_y}{\lambda}$	s_5
tenseur des contraintes	p_{xx}	$\frac{\gamma_7}{\lambda^2}(j_x^2 - j_y^2)$	s_7
tenseur des contraintes	p_{xy}	$\frac{\gamma_8}{\lambda^2}j_x j_y$	s_8



- Cas linéaire

$$c_1 = c_2 = -1, \gamma_3 = \gamma_4 = \gamma_7 = \gamma_8 = 0$$

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y & = O(\Delta t^2), \\ \partial_t j_x + c_0^2 \partial_x \rho - \zeta (\partial_x^2 j_x + \partial_{xy} j_y) - \nu (\partial_x^2 j_x + \partial_y^2 j_x) & = O(\Delta t^2), \\ \partial_t j_y + c_0^2 \partial_y \rho - \zeta (\partial_{yx} j_x + \partial_y^2 j_y) - \nu (\partial_x^2 j_y + \partial_y^2 j_y) & = O(\Delta t^2). \end{cases}$$

$$c_0^2 = \lambda^2 \frac{4 + \alpha_3}{6},$$

viscosité isotrope : $c_1 = c_2 = -1$ et $s_7 = s_8$.

$$\zeta = -\alpha_3 \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right),$$

$$\nu = \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right).$$



- Cas non linéaire (Navier-Stokes)

$$\gamma_3 = 3, \gamma_7 = 1 \text{ et } \gamma_8 = 1$$

$$\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y = O(\Delta t^2),$$

$$\begin{aligned} \partial_t j_x + \partial_x j_x^2 + \partial_y (j_x j_y) + c_0^2 \partial_x \rho &- \zeta (\partial_x^2 j_x + \partial_{xy} j_y) - \\ &- \nu (\partial_x^2 j_x + \partial_y^2 j_x) = O(\Delta t^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \partial_t j_y + \partial_x (j_x j_y) + \partial_y j_y^2 + c_0^2 \partial_y \rho &- \zeta (\partial_{yx} j_x + \partial_y^2 j_y) - \\ &- \nu (\partial_x^2 j_y + \partial_y^2 j_y) = O(\Delta t^2). \end{aligned}$$

β , γ_4 , s_4 et s_5 restent libres. Aussi s_3 si on néglige ζ .

A doubly periodic double shear layer [minion1997]

Equation de Navier-Stokes incompressible sur $[0, 1]^2$ avec les conditions initiales :

$$u_x = \begin{cases} U_0 \tanh(k(y - \frac{1}{4})), & y \leq \frac{1}{2}, \\ U_0 \tanh(k(\frac{3}{4} - y)), & y > \frac{1}{2}, \end{cases}$$

$$u_y = U_0 \delta \sin(2\pi(x + \frac{1}{4})),$$

$$\rho = \rho_0 = 1$$

et une contrainte de double périodicité en x et y .

- k contrôle la largeur des cisaillements.
- δ contrôle la magnitude de la perturbation initiale.

Apparition d'artéfacts numériques pour de nombreuses méthodes (ici des tourbillons non physiques).

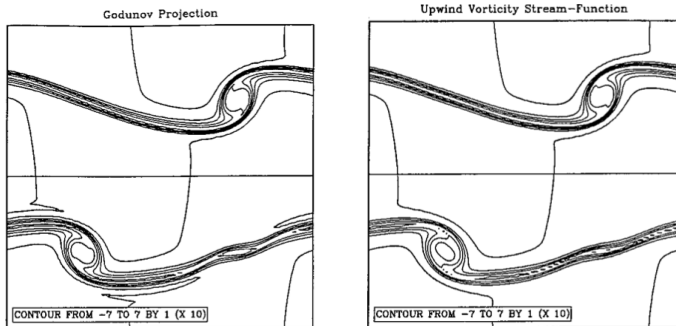
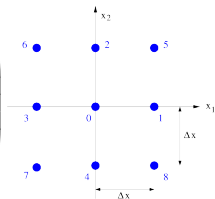


Figure – Vorticité provenant de la couche de cisaillement pour $t = 0.6$ à la résolution 256×256 (haut) et 128×128 (bas) [minion1997]



$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & \lambda & 0 & \lambda & 0 & \lambda & -\lambda & -\lambda & \lambda \\ 0 & 0 & \lambda & 0 & \lambda & \lambda & \lambda & -\lambda & -\lambda \\ -4 & -1 & -1 & -1 & -1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & -2 & -2 & -2 & -2 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 2 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$



Moments conservés :

$m_0 \equiv \rho$ (density), $m_1 \equiv j_x$, $m_2 \equiv j_y$ (momentum).

Moments non conservés (5 parmi 8) :

$$e = m_e^{eq} = -2\rho + \frac{3}{\lambda^2}(j_x^2 + j_y^2); \quad \text{tps de relax.} \quad S_e;$$

$$\epsilon = m_\epsilon^{eq} = \rho - \frac{3}{\lambda^2}(j_x^2 + j_y^2), \quad \text{tps de relax.} \quad S_\epsilon;$$

$$m_5^{eq} = -\frac{j_x}{\lambda}, \quad \text{tps de relax.} \quad S_5;$$

$$m_6^{eq} = -\frac{j_y}{\lambda}, \quad \text{tps de relax.} \quad S_5;$$

$$p_{xx} = \frac{1}{\lambda^2}(j_x^2 - j_y^2), \quad \text{tps de relax.} \quad S_\nu;$$

$$p_{xy} = \frac{1}{\lambda^2}j_x j_y, \quad \text{tps de relax.} \quad S_\nu.$$

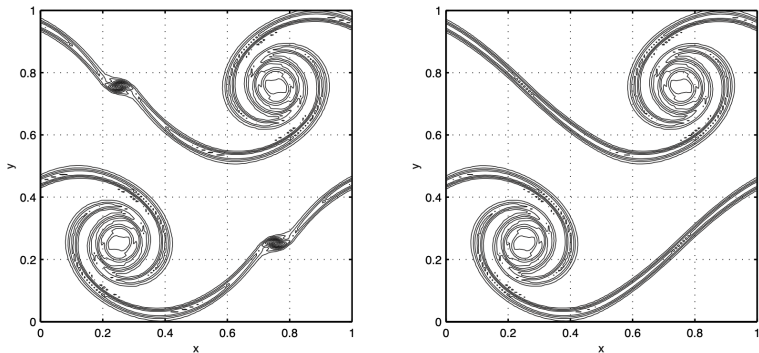


Figure – Vorticit  $t = 1$: $s_e = s_\nu$ ($\nu \simeq \zeta$) (gauche), $s_e \ll s_\nu$ ($\nu \ll \zeta$) (droite)

- Sch ma BGK ne fonctionne pas dans ce cas.
- Dellar pr conise de prendre $s_e \ll s_\nu$

Nous nous pla ons dans un cas plus g n ral.



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} = \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

$$\frac{\partial j_x}{\partial t} + \frac{\lambda}{3} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial j_x^2}{\partial x} + \frac{\partial j_x j_y}{\partial y} - \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \left[\sigma_e \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} \right) + \sigma_\nu \Delta j_x \right] = \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

$$\frac{\partial j_y}{\partial t} + \frac{\lambda}{3} \frac{\partial \rho}{\partial y} + \frac{\partial j_x j_y}{\partial x} + \frac{\partial j_y^2}{\partial y} - \frac{\lambda^2}{3} \Delta t \left[\sigma_e \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} \right) + \sigma_\nu \Delta j_y \right] = \mathcal{O}(\Delta t^2),$$

Par identification :

$$\text{Vitesse du son : } c_s^2 = \frac{\lambda}{3},$$

Viscosités de volume et de cisaillement :

$$\zeta \equiv \frac{\Delta t \lambda^2}{3} \sigma_e \equiv \frac{\Delta t \lambda^2}{3} \left(\frac{1}{s_e} - \frac{1}{2} \right), \quad \nu \equiv \frac{\Delta t \lambda^2}{3} \sigma_\nu \equiv \frac{\Delta t \lambda^2}{3} \left(\frac{1}{s_\nu} - \frac{1}{2} \right).$$

Problématique :

- BGK** Dans le cas d'un schéma BGK, ces paramètres ne sont plus libres et sont fixés (et égaux) par la viscosité
- MRT** Pour une viscosité fixée ν , le schéma MRT contient trois paramètres libres (s_e, s_E, s_5). Comment les choisir ?

La stabilité d'un schéma D2Q9 MRT est difficile à prouver.

- Analyse *a priori* : Analyse de Von Neumann à un point pour le cas linéaire [lallemand2000].
 - Recherche de ν_p de la mat 9×9 : $G = AM^{-1}CM$
 - Stabilité : $|\lambda_j| \leq 1$
- Analyse *a posteriori* : nous proposons un critère de stabilité lié au temps d'explosion.

Temps d'explosion

La première itération t_{exp} telle que la densité s'éloigne de $\rho_0 (= 1)$ en au moins un point :

$$\|\rho - \rho_0\|_\infty \geq 0.85$$

Quelques remarques pratiques :

- La simulation est demandée pour un nombre maximal d'itérations $Nt = 20000$.
- Rien n'indique que la solution diverge juste après.
- La nature physique de la solution trouvée n'est pas considérée.



Exploration de configurations pour le problème Minion :

$$N_x = N_y = 128, \nu = 1e-4, U_0 = 0.1$$

avec

$$(s_e, s_E, s_5) \in \left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 1.9999 \right] \times \left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 1.9999 \right] \times \left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 1.9999 \right],$$

répartis comme :

- 50% des valeurs (régulières) dans l'intervalle $\left[\frac{1}{\sqrt{2}}, 1.99 \right]$
- 50% des valeurs (régulières) dans l'intervalle $[1.99, 1.9999]$

$\Rightarrow 100^3 = 10^6$ simulations avec $N_t = 20000$ comme temps final.

$$(s_e, s_E, s_5) \rightarrow t_{exp}$$



Le résultat peut s'afficher sous la forme d'un nuage de points 3D.

- $(s_e, s_E, s_5, couleur = t_{exp})$
- Si $t_{exp} = Nt$, afficher (s_e, s_E, s_5) .



Questions :

- Etant donné un triplet (s_e, s_E, s_5) , le schéma induit est il stable? Preuve \Rightarrow Prédiction
- Peut on donner des règles pour le praticien?

Problème de classification binaire :

$$(s_e, s_E, s_5) \rightarrow \mathbb{1}\{t_{exp} = Nt\}$$

Des dizaines d'algorithmes existent, mais on privilégiera un résultat interprétable.

Les données sont les 10^6 simulations précédentes.



On utilise un arbre de décision (CART) qui sépare récursivement les simulations afin de regrouper les simulations suivant leurs stabilités.

Pour cela, on choisira de façon "optimale" s_e ou s_E ou s_5 et un seuil θ tel que les partitions G et D soit les plus pures possibles.

Au sens de l'entropie, pour G (idem pour D) :

$$H(G) = -(G_s \log G_s + (1 - G_s) \log(1 - G_s))$$

avec G_s la proportion de simulations stables dans G .

Au final, cette méthode cherche à chaque étape le paramètre de relaxation s_e ou s_E ou s_5 et le seuil θ associé

$$\arg \min_{s^*, \theta} (|G| * H(G) + |D| * H(D))$$

Implémentation : scikit-learn



La recherche de paramètres stables peut être vue comme la minimisation de la fonctionnelle :

$$J(s_e, s_E, s_5) \equiv -t_{exp}$$

avec $J(s_e, s_E, s_5) = -Nt$ si la simulation n'a pas divergé.

Mais :

- L'expression de J inconnue.
- Les propriétés de J sont inconnues (différentiabilité?)
- Dans le cas de nos simulations, l'évaluation de J n'est pas très chère...

Nous avons choisi les algorithmes génétiques parmi les méthodes d'optimisation globale en "Boîte noire".

Implémentation : `differential_evolution` dans `scipy`



```
differential_evolution(func, bounds, args=(),  
    init='latinhypercube', popsize=15,  
    strategy='best1bin', recombination=0.7,  
    mutation=(0.5, 1),  
    constraints=(), maxiter=1000, seed=None, workers=1, ...)
```

- 1 Initialisation : échantillonnage + popsize + evaluation
- 2 Mutation de x_p : $x'_p = x_{best} + \alpha_{mut}(x_{rand1} - x_{rand2})$
- 3 Croisement entre x_p et $x'_p \rightarrow c_p$ (avec un taux de croisement)
- 4 Sélection : x_p est remplacé par c_p si amélioration.
- 5 Revenir à l'étape 2 si non convergence.



Pour le problème Minion ($n_x = n_y = 128$) :

<pre>visco = 0.001 s_visco = 1.9881 U0 = 0.08 Re = 10240.0 Nt = 20000, min_se = 0.7071 se_opt = 0.9483 sE_opt = 0.7525 s5_opt = 1.2242 y_stab = -1 nfev = 184</pre>	<pre>visco = 0.001 s_visco = 1.9881 U0 = 0.08 Re = 10240.0 Nt = 20000, min_se = 1.99 se_opt = 1.9992 sE_opt = 1.9943 s5_opt = 1.7882 y_stab = -1 nfev = 679</pre>
Visualisation	Visualisation



Pour le problème Minion ($n_x = n_y = 128$) :

<pre>visco = 0.0005 s_visco = 1.994 U0 = 0.08 Re = 20480.0 Nt = 20000, min_se = 1.99 se_opt = 1.990 sE_opt = 1.983 s5_opt = 1.628 y_stab = -1 nfev = 679</pre>	<pre>visco = 0.001 s_visco = 1.9881 U0 = 0.16 Re = 20480.0 Nt = 20000, min_se = 1.99 se_opt = 1.991 sE_opt = 1.950 s5_opt = 1.958 y_stab = -1 nfev = 904</pre>
Visualisation	Visualisation



- Quelles sont les configurations visitées par la méthode d'optimisation (vs Exp. 1) ?
- Que se passe t'il pour $t > Nt$ pour des paramètres stables ?
- Que donne la méthode de recherche de paramètres pour un autre problème ?



Problème de Taylor-Green en 2D :

$$\rho = \rho_0 \left[1 - \frac{3\rho_0 U_0^2}{4} (\cos(4\pi x) + \cos(4\pi y)) \right]$$

$$u_x = -U_0 \cos(2\pi x) \sin(2\pi y)$$

$$u_y = U_0 \sin(2\pi x) \cos(2\pi y)$$

Dans ce problème, la solution exacte est connue :

$$\rho = \rho_0 \left[1 - \frac{3\rho_0 U_0^2}{4} (\cos(4\pi x) + \cos(4\pi y)) \right] e^{-8\pi^2 \nu t}$$

$$u_x = -U_0 \cos(2\pi x) \sin(2\pi y) e^{-4\pi^2 \nu t}$$

$$u_y = U_0 \sin(2\pi x) \cos(2\pi y) e^{-4\pi^2 \nu t}$$



Pour le problème Taylor-Green 2D ($n_x = n_y = 128$) :

```
visco = 0.001
s_visco = 1.9881
U0 = 0.08
Re = 10240.0

Nt = 20000, min_se = 1.99
se_opt = 1.9993
sE_opt = 1.9961
s5_opt = 1.7021
y_stab = -1
nfev = 634
```

Visualisation

Analyse de stabilité *a la* Von Neuman pour des paramètres "plutôt stables" sur **tout le domaine** !

- 1 Réaliser normalement la simulation jusqu'au temps t .
- 2 Construire une version linéarisée de l'opérateur de collision $C_{lin}(t)$ avec le champ de vitesse obtenu à l'étape 1.
- 3 Calculer les k premières valeurs propres de la matrice

$$G(t) = AM^{-1}C_{lin}(t)M$$

- 4 Tracer l'évolution des valeurs propres $G(t_{exp} - d), \dots, G(t_{exp})$.

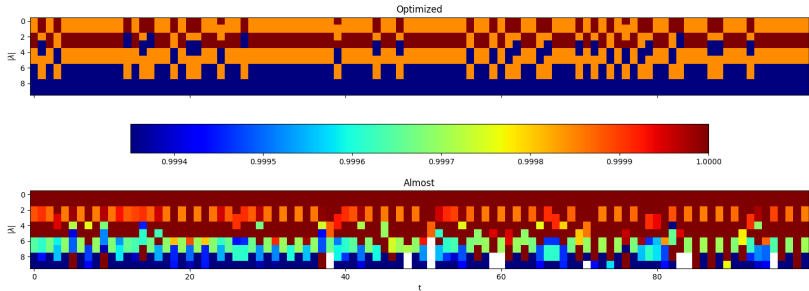
Pb. : La matrice $G(t)$ est grande...

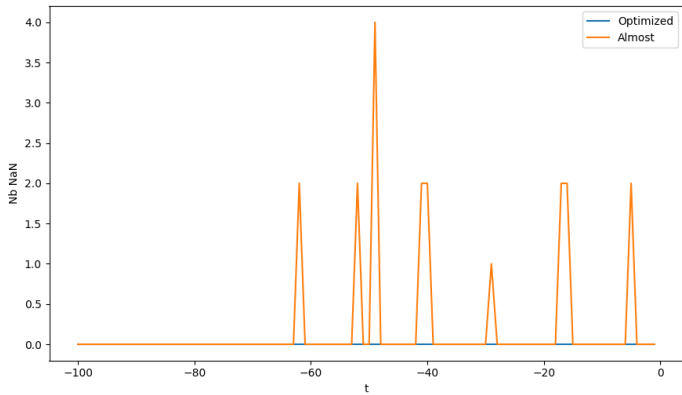
$$nx = ny = 128 \rightarrow 128^2 \times 9 = 147456$$

$$128 \text{ (rapide - lente) } \rightarrow 16 \text{ (rapide - lente)}$$



Minion : $n_x = n_y = 16$, $\text{visco} = 1e-3$, $U_0 = 0.08$ ($\text{Re} = 1280.0$)







- Définition d'un critère de stabilité pour un schéma D2Q9 MRT basé sur le temps d'explosion.
- Exploration "exhaustive" des paramètres libres pour le cas test Minion.
- Caractérisation (prédiction) des zones de stabilité à partir d'un arbre de décision ($\sim 82\%$ de rec.)
- Proposition d'une méthode d'optimisation globale permettant de trouver rapidement un triplet de paramètres LB stables dans le cas non linéaire.
- Minimisation sous contrainte (Ex. : viscosité de volume petite (se proche de 2))



- Définition alternative de la stabilité ou du critère à optimiser :
 - Contraindre la divergence à être nulle / l'énergie ...
 - Minimiser l'erreur entre la solution LB et la solution exacte.
 - Formuler la recherche de paramètres "magiques" (quartiques) ...
- Etude de la stabilité sur tout le domaine et identifier les modes de l'explosion.
- Appliquer la méthode proposée dans le cas 3D où le nombre de paramètres libres est bien plus important.