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

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





Journée MIRES-MARGAUx sur la Simulation Numérique

25 septembre 2024 - Niort

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 :

$$\mathrm{d}\boldsymbol{m}=f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{v},t)\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{v}.$$

Les moments de f :

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

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

Deux étapes fondamentales :

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

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

• 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)

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

 \bullet 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).



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

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

 \Rightarrow 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 :

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

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

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_i = λe_i, 0 ≤ j ≤ q − 1.

L'évolution discrète :

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

où l'exposant * désigne les quantités après collision.



Advection : f_i(x, t + Δt) = f_i(x - v_iΔt, t), avec x - v_iΔt un sommet.
 Equation d'advection : ∂f/∂t + v_i∂f/∂x = 0,

La méthode des caractéristiques est exacte.

- Collision : représentée par le terme $Q_i(f)$, locale en espace.
- Approximation Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) :

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

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 $M = (M_{kj})_{1 \le k,j \le q}$ est inversible. <u>Moments conservés</u> : $m_0^* = m_0, m_1^* = m_1, \dots, m_N^* = m_N.$ <u>Moments non-conservés</u> : $\frac{dm_k}{dt} + \frac{1}{\tau_k}(m_k - m_k^{eq}) = 0, \quad k \ge N + 1.$ Relaxent vers m_k^{eq} avec la constante τ_k . Euler explicite :

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

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

L'évolution de la population f_i :

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

où * décrit les quantités après la collision. • Moments conservés :



$$m_0 = \rho = \sum_{i=0}^8 f_i$$
 (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	е	$\alpha \rho + \frac{\gamma_3}{\lambda^2} (j_x^2 + j_y^2)$	<i>s</i> ₃
carré de l'énergie	ϵ	$eta ho+rac{\gamma_4}{\lambda^2}(j_x^2+j_y^2)$	<i>S</i> 4
flux d'énergie	q_{x}	$c_1 rac{j_x}{\lambda}$	<i>S</i> 5
flux d'énergie	q_y	$c_2 rac{j_y}{\lambda}$	<i>S</i> 5
tenseur des contraintes	<i>p_{xx}</i>	$rac{\gamma_7}{\lambda^2}\left(j_x^2-j_y^2 ight)$	S 7
tenseur des contraintes	p _{xy}	$\frac{\gamma_8}{\lambda^2} j_x j_y$	<i>S</i> 8

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

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

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

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

$$\begin{split} \zeta &= -\alpha_3 \frac{\lambda^2 \Delta t}{6} \left(\frac{1}{s_3} - \frac{1}{2} \right), \\ \nu &= \frac{\lambda^2 \Delta t}{3} \left(\frac{1}{s_8} - \frac{1}{2} \right). \end{split}$$

• Cas non linéaire (Navier-Stokes)

$$\gamma_3 = 3, \gamma_7 = 1$$
 et $\gamma_8 = 1$
 $\partial_t \rho + \partial_x j_x + \partial_y j_y = O(\Delta t^2),$
 $\partial_t j_x + \partial_x j_x^2 + \partial_y (j_x j_y) + c_0^2 \partial_x \rho - \zeta (\partial_x^2 j_x + \partial_x y j_y) - - \nu (\partial_x^2 j_x + \partial_y^2 j_x) = O(\Delta t^2),$
 $\partial_t j_y + \partial_x (j_x j_y) + \partial_y j_y^2 + c_0^2 \partial_y \rho - \zeta (\partial_y x j_x + \partial_y^2 j_y) - - \nu (\partial_x^2 j_y + \partial_y^2 j_y) = O(\Delta t^2).$

 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]

Schéma classique D2Q9 [lallemand2000]



Moments conservés :

00

 $m_0 \equiv \rho$ (density), $m_1 \equiv j_x$, $m_2 \equiv j_y$ (momentum). Moments non conservés (5 parmi 8) :

$$\begin{split} e &= m_e^{eq} = -2\rho + \frac{3}{\lambda^2}(j_x^2 + j_y^2); & \text{tps de relax.} \quad s_e, \\ \epsilon &= m_e^{eq} = \rho - \frac{3}{\lambda^2}(j_x^2 + j_y^2), & \text{tps de relax.} \quad s_e; \\ m_5^{eq} &= -\frac{j_x}{\lambda}, & \text{tps de relax.} \quad s_5; \\ m_6^{eq} &= -\frac{j_y}{\lambda}, & \text{tps de relax.} \quad s_5; \\ p_{xx} &= \frac{1}{\lambda^2}(j_x^2 - j_y^2), & \text{tps de relax.} \quad s_{\nu}; \\ p_{xy} &= \frac{1}{\lambda^2}j_xj_y, & \text{tps de relax.} \quad s_{\nu}. \end{split}$$





Figure – Vorticité t = 1: $s_e = s_{\nu} (\nu \simeq \zeta)$ (gauche), $s_e \ll s_{\nu} (\nu \ll \zeta)$ (droite)

- Schéma BGK ne fonctionne pas dans ce cas.
- Dellar préconise de prendre $s_e << s_{\nu}$

Nous nous plaçons dans un cas plus général.

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

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

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

Par identification :

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

Viscosités de volume et de cisaillement :

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



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 vp de la mat 9×9 : $G = AM^{-1}CM$
 - Stabilité : $|\lambda_i| <= 1$
- 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 :

$$||
ho -
ho_0||_\infty \ge 0.85$$

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 :

$$Nx = Ny = 128, \nu = 1e-4, U_0 = 0.1$$

avec

00.0

$$(s_e, s_E, s_5) \in [rac{1}{\sqrt{2}}, 1.9999] imes [rac{1}{\sqrt{2}}, 1.9999] imes [rac{1}{\sqrt{2}}, 1.9999],$$

répartis comme :

50% des valeurs (régulières) dans l'intervalle [¹/_{√2}, 1.99]
50% des valeurs (régulières) dans l'intervalle [1.99, 1.9999]
⇒ 100³ = 10⁶ 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 :

$$(s_e, s_E, s_5)
ightarrow \mathbbm{1}\{t_{exp} = Nt\}$$

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

Les données sont les 10⁶ simulations précédentes.

On utilise un arbre de décision (CART) qui <u>sépare récursivement</u> 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 <u>et</u> 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 divergée. 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 (nx = ny = 128) :

visco = 0.001 s_visco = 1.9881 U0 = 0.08 Re = 10240.0	visco = 0.001 s_visco = 1.9881 U0 = 0.08 Re = 10240.0
<pre>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>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 (nx = ny = 128) :

visco = 0.0005 s_visco = 1.994 U0 = 0.08 Re = 20480.0	visco = 0.001 s_visco = 1.9881 U0 = 0.16 Re = 20480.0
<pre>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>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 :

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

Dans ce problème, la solution exacte est connue :

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



Pour le problème Taylor-Green 2D (nx = ny = 128) :

visco = 0.001s_visco = 1.9881 U0 = 0.08Re = 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 *ala* Von Neuman pour des paramètres "plutôt stables" sur **tout le domaine**!

- 1 Réaliser normalement la simulation jusqu'au temps t.
- 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),..., G(t_{exp}).
 Pb. : La matrice G(t) est grande...

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

128 (rapide - lente) \rightarrow 16 (rapide - lente)

Minion : nx = ny = 16, visco = 1e-3, U0 = 0.08 (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.