Schémas unifomément stables dans l'asymptotique cinétique/fluides

M. Lemou

CNRS et Université de Rennes I,

Institut de mathématiques de Rennes (IRMAR),

Rennes, France

mlemou@univ-rennes1.fr

M. Bennoune
L. Mieussens

Université Paul Sabatier,

Institut de mathématiques de Toulouse (IMT).

With Acroread, CTRL-L switch between full screen and window mode

Contexte général

Construire des schémas numériques pour un modèle décrivant un système de particules :

- Traverser une hiérarchie de modèles macroscopiques.

  Modèle cinétique $\longrightarrow$ Modèles de diffusion ou fluides : *Euler, Navier-Stokes,* etc. à paramètres numériques fixés.
- Coût de calcul réduit + Propriétés physiques (conservation, entropie ...)

Intérêt : Eviter la décomposition de domaines et le traitement des interfaces.

Quelques applications :

- Traversée d'une atmosphère par une sonde.
- Environnements de satellites.
- Plasmas.

Plan

1. **Modèles cinétiques** - limite fluide et de diffusion
2. Méthodes numériques stables pour le passage cinétique/Euler.
3. Stratégie générale et décomposition micro/macro
4. Application à la construction de schémas stable pour l'asymptotique cinétique/Navier-Stokes
5. Schémas stables pour la limite de diffusion, et couches limites.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_x f + \mathcal{E} \cdot \nabla f = Q(f)$$

Q : Opérateur de collision, agit uniquement sur *la dépendance en vitesse* de f. En général non linéaire, non local (en vitesse) et de type integro-différentiel.

$\mathcal{E}$: Force extérieure, ou intérieure liée à f par les équations de Poisson ou de Maxwell.

Gaz neutres :	Q = Opérateur de Boltzmann.
Plasmas : Gaz ionisés	Q = Opérateur de Landau.

Modèle simplifié de relaxation : Modèle BGK

Applications : Plasmas, vent solaire, ionosphère $\longrightarrow$ Environnements de satellites, Fusion thermonucléaire. Institutions industrielles : CEA, ESA, CNES ...

Modèles cinétiques

- Quantités conservées, Invariants collisionnels :

$$\int_{\mathbb{R}^3} Q(f)(v)\phi(v)dv = 0, \ \ \forall\, f \quad \Leftrightarrow \phi(v) = A + B\cdot v + C|v|^2.$$

- Entropie (Théorème H) : $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} Q(f)\log f(v)dv \leq 0, \quad \forall\, f,$

  Egalité $\Leftrightarrow Q(f) = 0 \Leftrightarrow f$ est une Maxwellienne.

$$M_{\rho,u,T}(v) = \frac{\rho}{(2\pi T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v-u|^2}{2T}\right).$$

- Modèle simplifié : Modèle BGK :

$$Q(f) = \frac{1}{\varepsilon\tau}(M[f] - f), \qquad M[f](t,x,v) = M(U)(t,x,v) = M_{\rho,u,T}(v)$$

$$U = \int f(1, v, |v|^2/2)dv = (\rho, \rho u, \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{d}{2}\rho T) = \langle mM(U)\rangle$$

Passage cinétique/fluide, Méthode des moments

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \quad Q(f)$$

- Système à trois moments :

$$(\rho, \rho u, E) = \int f(t,x,v)(1, v, |v|^2/2)$$

$$\partial_t (\rho, \rho u, E) + \nabla_x \cdot \left(\rho u, \int f(t,x,v) v \otimes v dv, \int f(t,x,v) v |v|^2/2 dv \right) = 0.$$

  Système non fermé, spécifier f en fontion de $(\rho, \rho u, E)$.

  Fermeture = Fonction minimisant l'entropie à masse, impulsion et energie fixés= Maxwellienne $M_{\rho,u,T}$. Système d'Euler

- Système de moments d'ordre supérieur (Ruggeri, Levermore) :
  - Polynôme ayant les moments souhaités : réalisable mais positivité non garantie
  - Minimiseur de l'entropie : exponentielle de polynôme : Positivité mais réalisabilité non garantie. Hyperbolicité.

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f)$$

- Système à trois moments :

$$(\rho, \rho u, E) = \int f(t,x,v)(1, v, |v|^2/2)$$

$$\partial_t (\rho, \rho u, E) + \nabla_x \cdot \left(\rho u, \int f(t,x,v) v \otimes v dv, \int f(t,x,v) v |v|^2/2 dv \right) = 0.$$

  Système non fermé, spécifier f en fontion de $(\rho, \rho u, E)$.

  Fermeture = Fonction minimisant l'entropie à masse, impulsion et energie fixés= Maxwellienne $M_{\rho,u,T}$. Système d'Euler

- Système de moments d'ordre supérieur (Ruggeri, Levermore) :
  - Polynôme ayant les moments souhaités : réalisable mais positivité non garantie
  - Minimiseur de l'entropie : exponentielle de polynôme : Positivité mais réalisabilité non garantie. Hyperbolicité.

$\varepsilon \to 0 \implies Q(f) \sim 0 \implies f \sim$ Maxwellienne

- $f =$ Maxwellienne M de paramètres $(\rho, \rho u, E)$. Système d'Euler
- $f = M^\varepsilon + \varepsilon f_1$, Système de Navier-Stokes ou de Burnett.

$$\partial_t \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{pmatrix} + \nabla_x \cdot \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u \otimes u + pI \\ (E+p)u \end{pmatrix} = -\varepsilon \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_x \cdot \sigma \\ \nabla_x \cdot (\sigma u + q) \end{pmatrix}.$$

$$\mathbb{P} = pI + \sigma, \qquad p = \rho T$$

$$\sigma = -\mu\Big(\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d}\nabla_x \cdot uI\Big), \qquad \mathbb{Q} = \varepsilon q = -\varepsilon\kappa\nabla_x T$$

- Schéma explicite en temps simple :

$$f_i^{n+1} = f_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\Big[v^+(f_i^n - f_{i-1}^n) + v^-(f_{i+1}^n - f_i^n)\Big] + \frac{\Delta t}{\varepsilon}(M_i^n - f_i^n).$$

impose la contrainte $\Delta t = O(\varepsilon)$. Inutilisable en pratique.

- Schéma semi-implicite :

$$f_i^{n+1} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \Delta t} f_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\frac{\varepsilon}{\varepsilon + \Delta t}\Big[v^+(f_i^n - f_{i-1}^n) + v^-(f_{i+1}^n - f_i^n)\Big] + \frac{\Delta t}{\varepsilon + \Delta t} M_i^n.$$

Schéma stable dans la limite $\varepsilon \to 0$. Mais Schéma limite non consistent avec les équations d'Euler.

Méthode numérique stable pour le passage BGK/Euler

- Splitting : Résoudre successivement sur $[t_n, t_{n+1}]$

$$\partial_t \tilde{f} + v\, \partial_x \tilde{f} = 0 \quad , \qquad \partial_t \bar{f} = \frac{1}{\varepsilon}(M(\bar{U}) - \bar{f}), \quad ,$$
$$\tilde{f}(t = t_n, x, v) = f^n(x, v), \qquad \bar{f}(t = t_n, x, v) = \tilde{f}(t_{n+1}, x, v).$$

- Schéma de Coron et Perthame (1991) :
  - Phase transpot : Schéma décentré.

$$\frac{f_i^{n+\frac{1}{2}} - f_i^n}{\Delta t} + \frac{\Phi_{i+\frac{1}{2}}(f^n) - \Phi_{i-\frac{1}{2}}(f^n)}{\Delta x} = 0$$

  avec $\Phi_{i+\frac{1}{2}}(g) = v^+ g_{i+\frac{1}{2}} + v^- g_{i+\frac{3}{2}}$

  - Phase collision : Résolution exacte

$$f_i^{n+1} = e^{-\frac{\Delta t}{\varepsilon}} f_i^{n+\frac{1}{2}} + (1 - e^{-\frac{\Delta t}{\varepsilon}}) M_i^{n+\frac{1}{2}}.$$

Limite Euler OK, Mais pas Navier-Stokes. Pas de terme polynômiale en ε.

- Résoudre l'étape par un simple schéma décentré :

$$\frac{f_i^{n+1} - f_i^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \frac{1}{\varepsilon}(M_i^{n+\frac{1}{2}} - f_i^{n+1}).$$

- remplacer $e^{-\frac{\Delta t}{\varepsilon}}$ par $\frac{1}{1+\Delta t/\varepsilon}$.
- Schéma à deux pas consistant avec NS compressible.

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{F_{i+\frac{1}{2}}(U^n) - F_{i-\frac{1}{2}}(U^n)}{\Delta x} =$$

$$\frac{\varepsilon}{\Delta x}\left[\left\langle m\left(\Phi_{i+\frac{1}{2}}(\frac{M^{n-1} - M^n}{\Delta t}) - \Phi_{i-\frac{1}{2}}(\frac{M^{n-1} - M^n}{\Delta t})\right)\right\rangle\right.$$

$$\left. - \frac{1}{\Delta x}\left\langle m\left((\Phi_{i+\frac{1}{2}} - \Phi_{i-\frac{1}{2}})^2 (M^{n-1})\right)\right\rangle\right].$$

$$\partial_t f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f), \qquad f^{n+1} - f^n = \frac{\Delta t}{\varepsilon} Q(f^n)$$

- Opérateur de Boltzmann :
  - Positivité : $\Delta t = O(\varepsilon)$. Implicitation partielle :

$$f^{n+1} - f^n = \frac{\Delta t}{\varepsilon}\left(Q^+(f^n) - f^{n+1} L(f^n)\right),$$

$$f^{n+1} = \frac{1}{1 + \frac{\Delta t}{\varepsilon} L(f^n)} f^n + \frac{\frac{\Delta t}{\varepsilon}}{1 + \frac{\Delta t}{\varepsilon} L(f^n)} Q^+(f^n).$$

  - Inconsistance avec la mécanique des fluides quand $\varepsilon \to 0$.
- Opérateur diffusif en vitesse (FPL) :
  - Positivité sous contrainte CFL diffusive : $\Delta t \leq C \Delta v^2$. Coût global très élevé : $O(N^3)$ en isotrope.
  - Inconsistance avec la mécanique des fluides.

Gabetta, Pareschi, Toscani, Russo (1997). Caflish, Pareschi, Jin, ...

Basée sur le fait que l'opérateur de Boltzmann est la somme d'une partie positive et d'une partie négative.

$$Q(f,f) = Q^+(f,f) - Q^-(f,f)$$

Cas particulier des molécules maxwelliennes : $Q^-(f,f) = \mu f$.

$$f(t,v) = e^{-\mu t/\varepsilon} \sum_{k=0}^{\infty} \left(1 - e^{-\mu t/\varepsilon}\right)^k f_k(v)$$

$$f_{k+1}(v) = \frac{1}{k+1} \sum_{l=0}^{k} \frac{1}{\mu} Q^+(f_l, f_{k-l}).$$

Etant donné $f^n(v)$ correspondant à l'instant $t_n = n\Delta t$,

$$f^{n+1}(v) = e^{-\mu\Delta t/\varepsilon} \sum_{k=0}^{m} \left(1 - e^{-\mu\Delta t/\varepsilon}\right)^k f_k^n(v) + (1 - \exp(-\mu\Delta t/\varepsilon))^{m+1} M(v).$$

M est la maxwellienne associée à f^n.

- Positivité $\forall \varepsilon, \Delta t$.
- Quand $\varepsilon \longrightarrow 0$, f^{n+1} tend vers la Maxwellienne $M(v)$.
- Schéma d'ordre m.

Ne marche pas pour FPL. Pas de partie positive ayant la même structure.

Pour FPL, 2 problèmes :

1- *Coût de calcul induit par la condition CFL diffusive*

2- *Consistance avec la mécanique des fluides*

Stratégie générale : Décomposition micro/macro

- Equation de type Boltzmann :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f,f)$$

- Décomposition micro/macro :

$$f = M[f] + \varepsilon g, \qquad \mathcal{L}_M g = 2Q(M,g)$$

$$\partial t M + v \cdot \nabla_x M + \varepsilon(\partial_t g + v \cdot \nabla_x g) = \mathcal{L}_M g + \varepsilon Q(g,g).$$

- Π_M = Projection orthogonale dans $L^2(1/M)$ sur $N(\mathcal{L}_M) =$Span$\{M, vM, |v|^2 M\}$
- Appliquer Π puis $I - \Pi$:

$$\partial_t \langle m(v) M \rangle + \nabla_x \cdot \langle v m(v) M \rangle + \varepsilon \nabla_x \cdot \langle v m(v) g \rangle,$$

$$\partial_t g + (I - \Pi_M)(v \cdot \nabla_x g) - Q(g,g) = \frac{1}{\varepsilon}\left[\mathcal{L}_M g - (I - \Pi_M)(v \cdot \nabla_x M)\right].$$

Asymptotique Navier-Stokes

- $\varepsilon \to 0$:

$$g \sim \mathcal{L}_M^{-1}\left((I - \Pi_M)(v \cdot \nabla_x M)\right)$$

- Système de Navier-Stokes :

$$\partial_t U + \nabla_x \cdot F(U) = -\varepsilon \begin{pmatrix} 0 \\ \nabla_x \cdot \sigma \\ \nabla_x \cdot (\sigma u + q) \end{pmatrix} + O(\varepsilon^2).$$

$$\sigma = -\mu\left(\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d}\nabla_x \cdot uI\right), \qquad q = -\kappa \nabla_x T.$$

Discrétisation en temps

- Mimer numériquement la procédure continue, Terme raide semi-implicite dans l'équation en g

$$\frac{g^{n+1}-g^n}{\Delta t} + (I-\Pi_{M^n})(v\cdot\nabla_x g^n) - Q(g^n,g^n) = \frac{1}{\varepsilon}\Big[\mathcal{L}_{M^n} g^{n+1} - (I-\Pi_{M^n})(v\cdot\nabla_x M^n)\Big].$$

- Limite macro :

$$g^{n+1} = \mathcal{L}_{M^n}^{-1}\Big[(I-\Pi_{M^n})(v\cdot\nabla_x M^n)\Big] + O(\varepsilon)$$

- Equation en $U = \int f(1, v, |v|^2)$:

$$\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t} + \nabla_x\cdot F(U^n) + \varepsilon\nabla_x\cdot\left\langle v m g^{n+1}\right\rangle = 0.$$

Discrétisation en espace

- Stabilité des schémas transport : Décentrement pour le transport en g : Terme $(I - \Pi_{M^n})(v \cdot \nabla_x g^n)$.
- Discrétisation de Π ?
- Centrer le terme $(I - \Pi_{M^n})(v \cdot \nabla_x M^n)$: Terme source.
- Schéma limite avec des discrétisations adéquates pour la diffusion : utilisant $i,\ i+1,\ i-1$. Utilisation de deux grilles décalés : x_i pour U et $x_{i+1/2}$ pour g.

Schéma complétement discrétisé

$$\frac{g^{n+1}_{i+\frac12} - g^n_{i+\frac12}}{\Delta t} + (I - \Pi^n_{i+\frac12})\Big[v^+ \frac{g^n_{i+\frac12} - g^n_{i-\frac12}}{\Delta x} + v^- \frac{g^n_{i+\frac32} - g^n_{i+\frac12}}{\Delta x}\Big]$$
$$= -\frac{1}{\varepsilon}\big[g^{n+1}_{i+\frac12} + (I - \Pi^n_{i+\frac12})(v\frac{M^n_{i+1} - M^n_i}{\Delta x})\big], \tag{1}$$

$$\frac{U^{n+1}_i - U^n_i}{\Delta t} + \frac{F_{i+\frac12}(U^n) - F_{i-\frac12}(U^n)}{\Delta x} + \varepsilon \left\langle vm \frac{g^{n+1}_{i+\frac12} - g^{n+1}_{i-\frac12}}{\Delta x} \right\rangle = 0,$$

avec

$$\Pi_{i+\frac12} = \frac{\Pi(U_i) + \Pi(U_{i+1})}{2}$$

Asymptotique Navier-Stokes du Schéma

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \frac{F_{i+\frac{1}{2}}(U^n) - F_{i-\frac{1}{2}}(U^n)}{\Delta x}$$
$$= \frac{\varepsilon}{\Delta x} \left\langle vm \left[(I - \Pi^n_{i+\frac{1}{2}})(v \, \frac{M^n_{i+1} - M^n_i}{\Delta x}) - (I - \Pi^n_{i-\frac{1}{2}})(v \, \frac{M^n_i - M^n_{i-1}}{\Delta x}) \right] \right\rangle ,$$

- Consistant avec Navier-Stokes
- Diffusion : Approchée à l'ordre 2 en Δx.

Inconnues : $M(t,x),\ g(t,x,v)$:

$$\begin{cases} \partial_t M + \left(\sum_{k=0}^{p} \varepsilon^k \Pi(v\cdot\nabla_x f_k)\right) + \varepsilon^{p+1}\Pi(v\cdot\nabla_x g) = 0, \\ \partial_t g + (I-\Pi)(v\cdot\nabla_x g) = \frac{1}{\varepsilon}(g - f_{p+1})) = 0. \end{cases}$$

$$f_k = (-1)^k \left[(I-\Pi)(\partial_t + v\cdot\nabla_x)\right]^k M,$$

Reconstruction de f :

$$f = \left(\sum_{k=0}^{p} \varepsilon^k f_k\right) + \varepsilon^{p+1} g.$$

Schéma semi-implicite donne la consistance avec les équations de fluides d'ordre superieurs.

$$\partial_t f + \frac{1}{\varepsilon} v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon^2} \left(\rho[f] - f\right), \quad x \in \mathbb{R}, \quad v \in [-1, 1].$$

$$\rho[f] = \rho(t,x) = < f > = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} f dv.$$

- limite de diffusion :

$$\partial_t \rho = \frac{1}{3} \partial_x^2 \rho.$$

- Formulation Micro/macro : $f = \rho + \varepsilon g, \quad \Pi h = < h > = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} h dv.$

$$\partial_t \rho + \partial_x < v g > = 0,$$

$$\partial_t g + \frac{1}{\varepsilon} (I - \Pi)(v \partial_x g) = -\frac{1}{\varepsilon^2} \left(g + v \partial_x \rho\right).$$

Application à la limite de diffusion

- Impliciter uniquement le terme en $\frac{1}{\varepsilon^2}$: Stabilité confirmée par les tests numériques dans tous les cas.

  Preuve rigoureuse dans les cas simples avec la CFL :

$$\Delta t \leq \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta x^2}{2} + \varepsilon \Delta x\right).$$

- Compraison avec les schémas de Klar (1998), Jin, Pareschi, Toscani (1998) : Globalement comparables. Mais, ici, la stratégie est générale.
- Différentes conditions de bord en x.

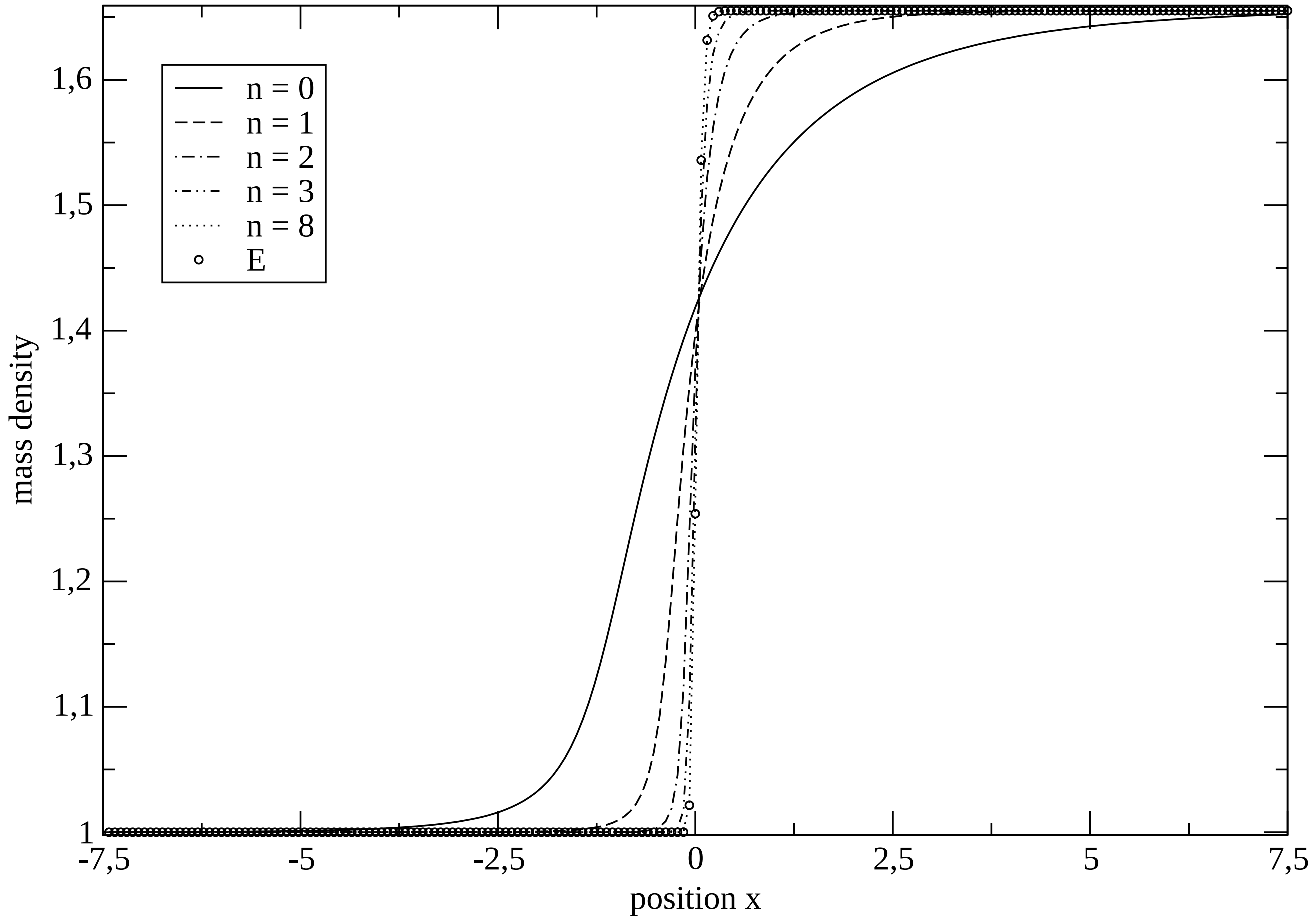

FIG. 1: Stationary shock : mass density as a function of the position $x \in [-7.5, 7.5]$ given by scheme (AP). Profiles of ρ for different values of $\varepsilon_n = 3^{-n}$ for rarefied regime ($\varepsilon_0 = 1, \varepsilon_1 = 0.333, \varepsilon_2 = 0.11$), intermediate regime ($\varepsilon_3 = 3.7 \times 10^{-2}$) and fluid regime ($\varepsilon_8 = 1.52 \times 10^{-4}$). The result of scheme (E) is also shown.

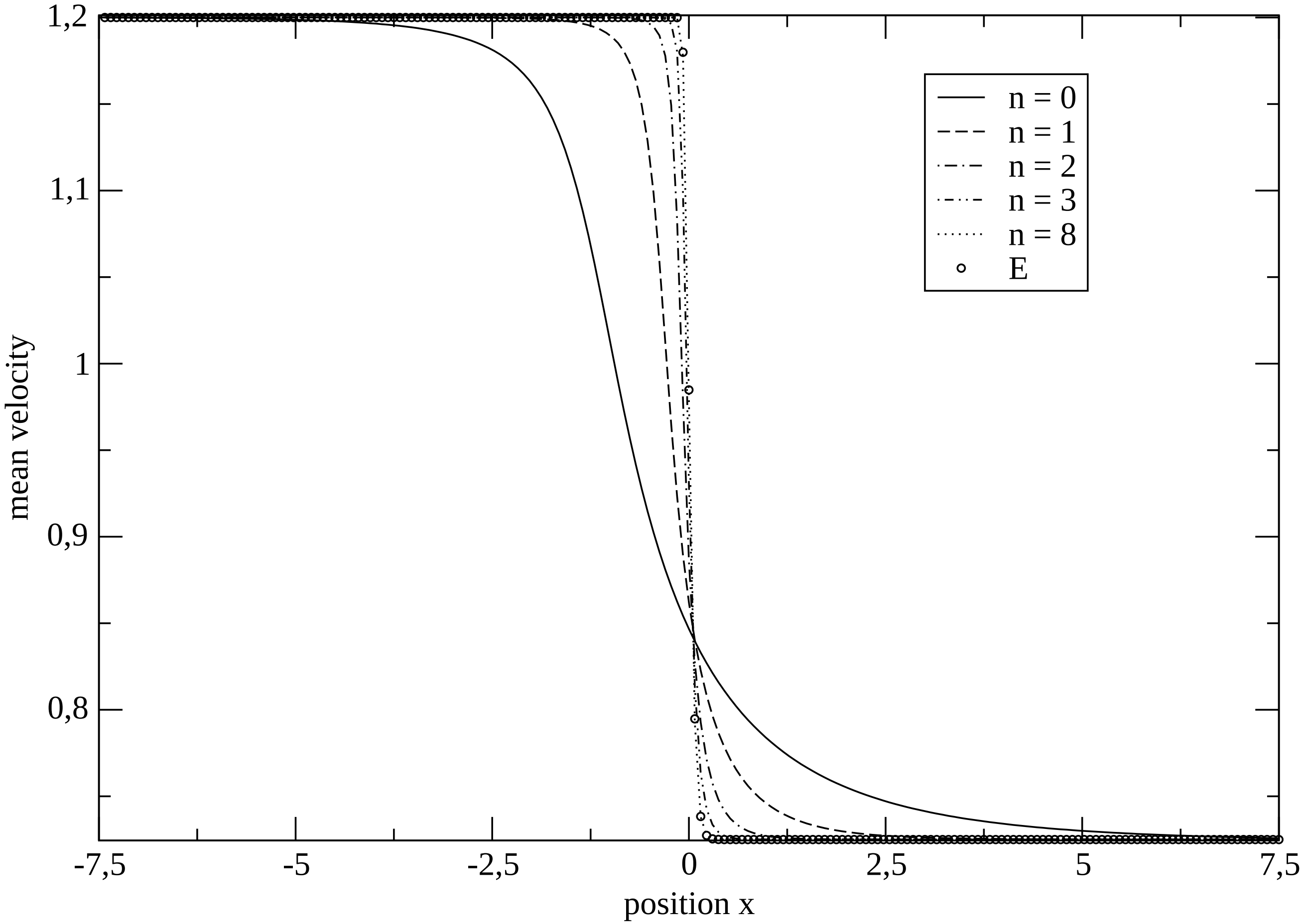

FIG. 2: Stationary shock : mean velocity as a function of the position $x \in [-7.5, 7.5]$ given by scheme (AP). Profiles of u for different values of $\varepsilon_n = 3^{-n}$ for rarefied regime ($\varepsilon_0 = 1, \varepsilon_1 = 0.333, \varepsilon_2 = 0.11$), intermediate regime ($\varepsilon_3 = 3.7 \times 10^{-2}$) and fluid regime ($\varepsilon_8 = 1.52 \times 10^{-4}$). The result of scheme (E) is also shown.

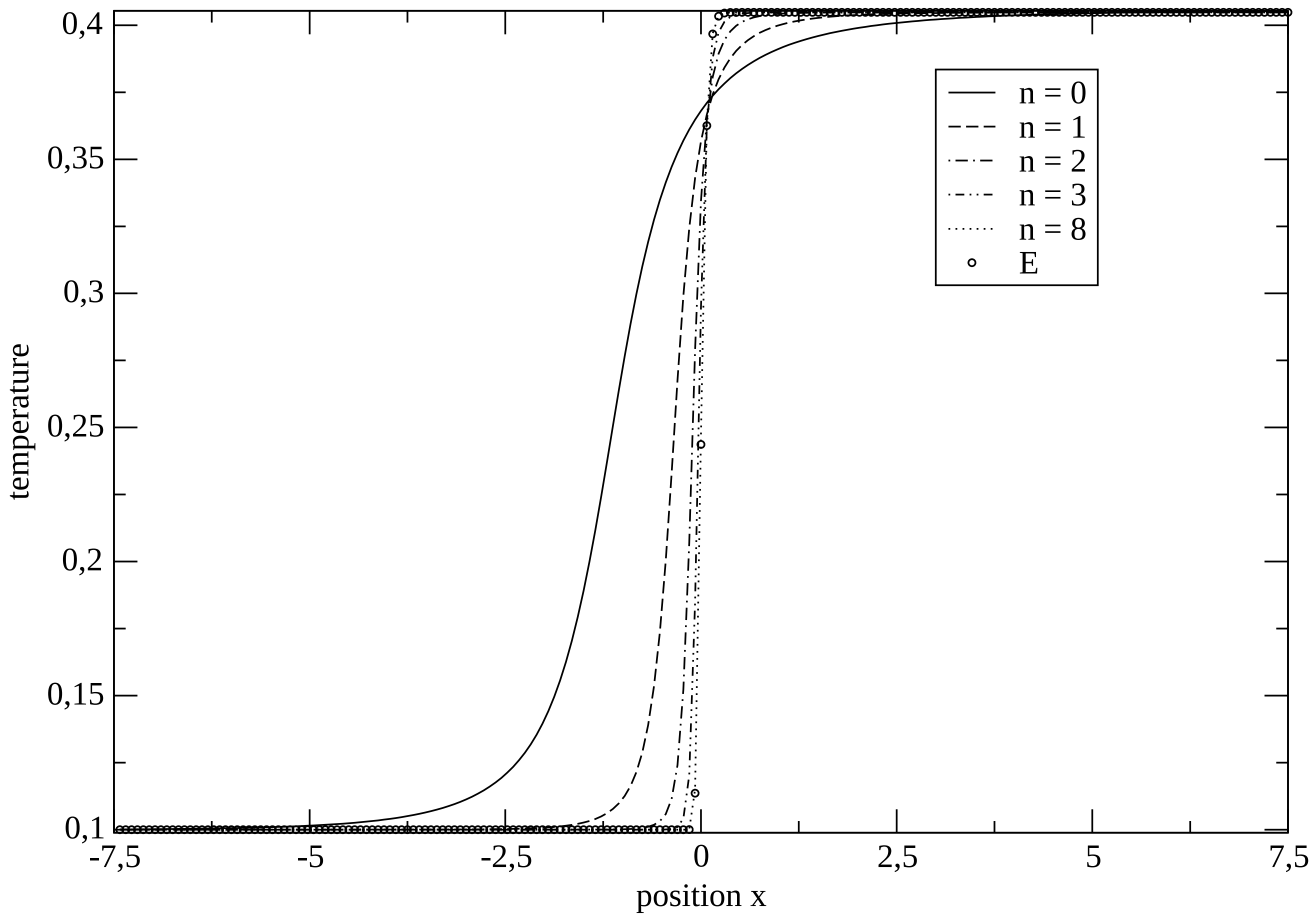

FIG. 3: Stationary shock : temperature as a function of the position $x \in [-7.5, 7.5]$ given by scheme (AP). Profiles of T for different values of $\varepsilon_n = 3^{-n}$ for rarefied regime ($\varepsilon_0 = 1, \varepsilon_1 = 0.333, \varepsilon_2 = 0.11$), intermediate regime ($\varepsilon_3 = 3.7 \times 10^{-2}$) and fluid regime ($\varepsilon_8 = 1.52 \times 10^{-4}$). The result of scheme (E) is also shown.

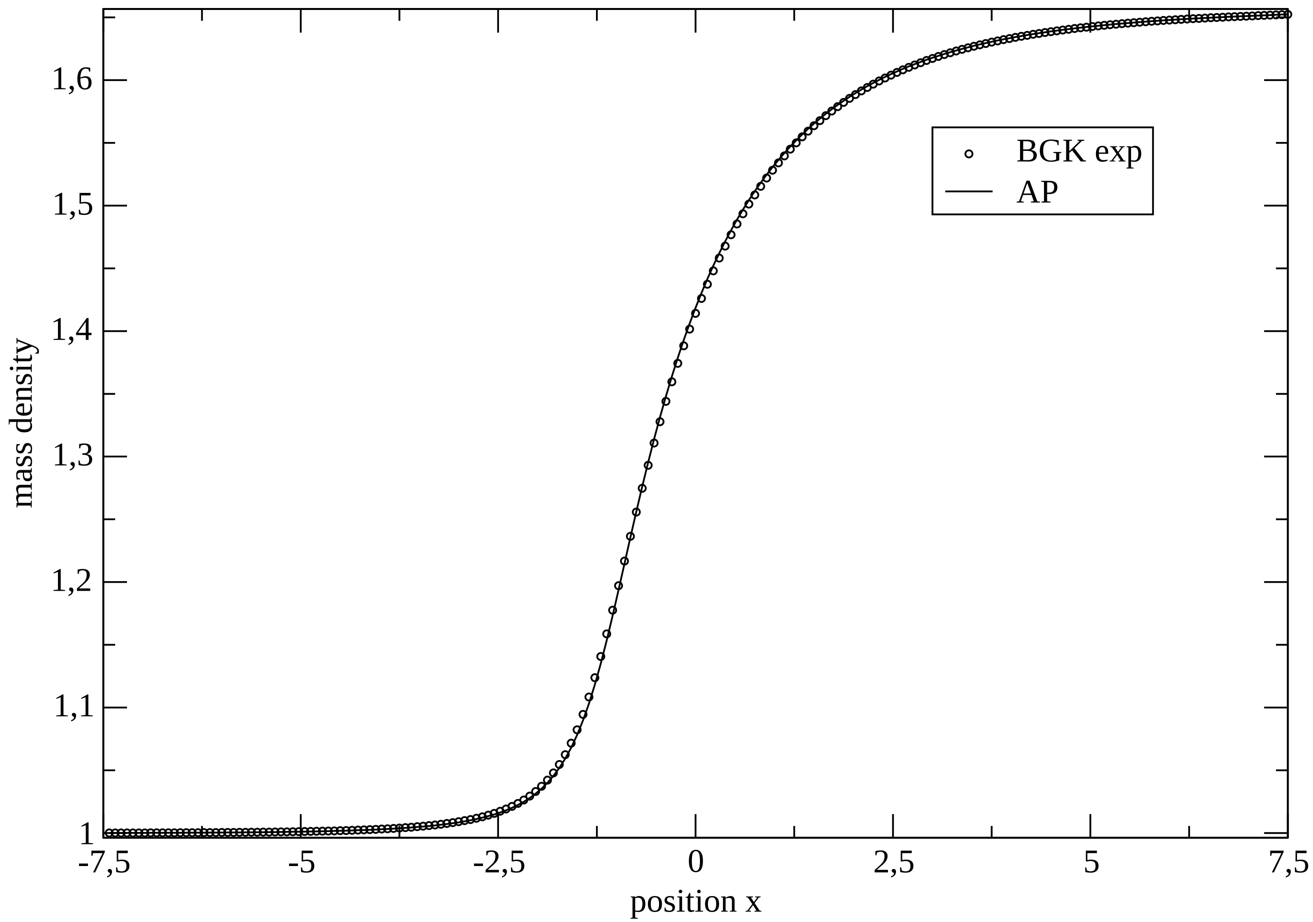

FIG. 4: Stationary shock : mass density as a function of the position $x \in [-7.5, 7.5]$ for $\varepsilon = 1$ (rarefied regime) obtained by schemes $(BGKexp)$, and (AP).

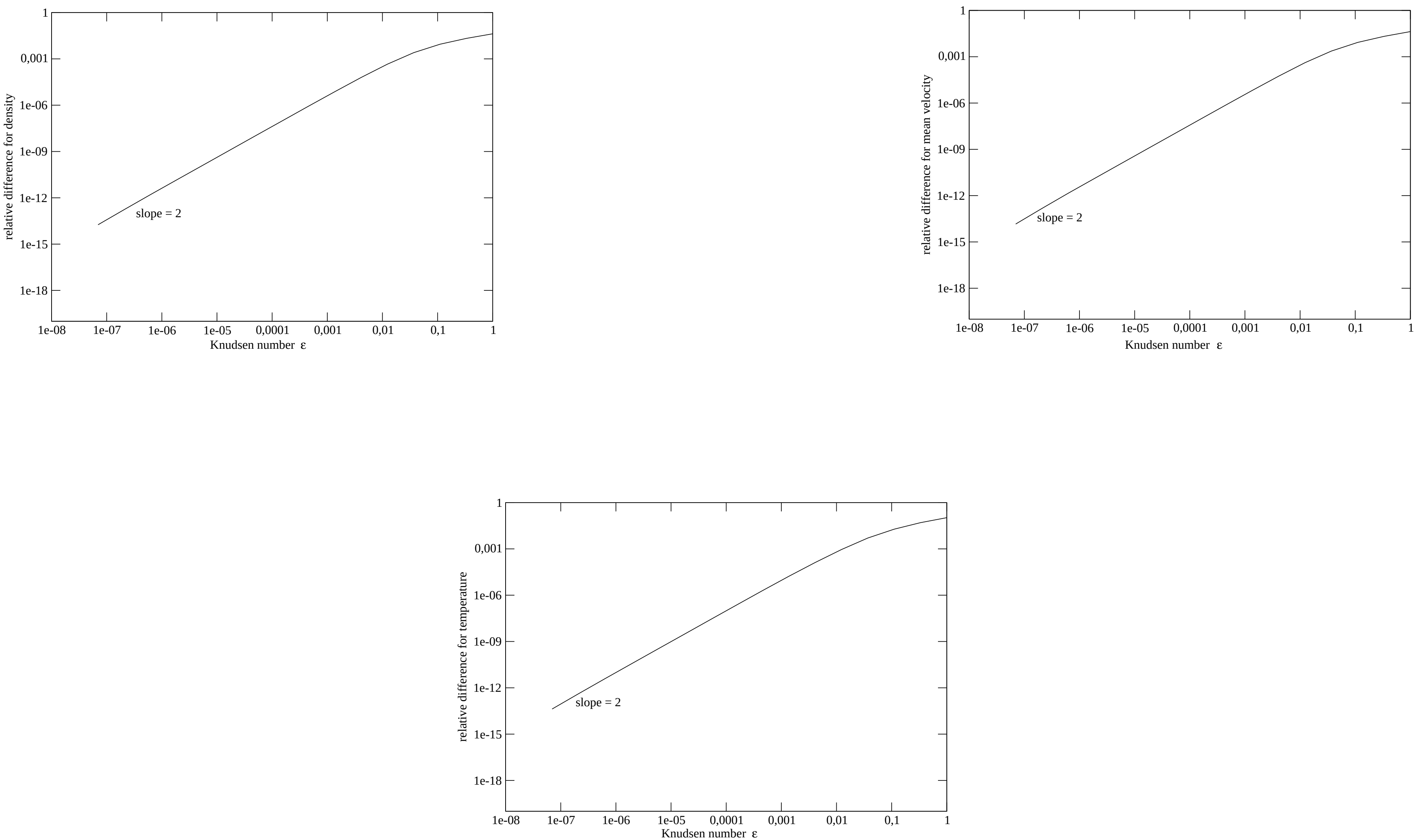

FIG. 5: Stationary shock : relative differences (in log scale) between the densities (top left), the velocities (top right), and the temperatures (bottom), obtained with schemes (AP) and $(AP1)$. Different values are considered : $\varepsilon_n = 3^{-n}, n \geq 0$.

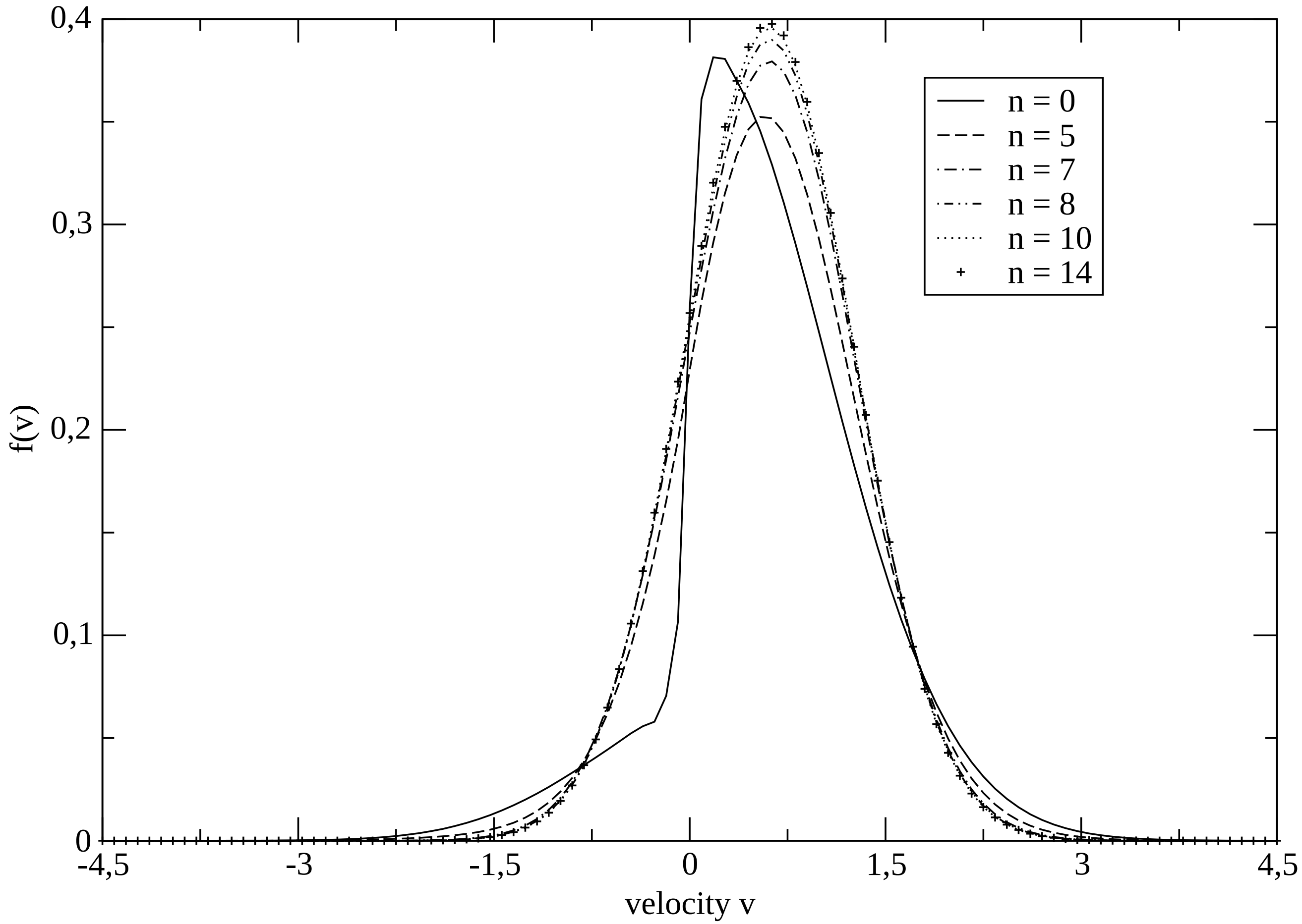

FIG. 6: Sod problem : distribution function f at point $x = 0.5$ as a function of the velocity $v \in [-4.5, 4.5]$ given by scheme (AP) at time $t = 0.14$. Profiles of f for different values of $\varepsilon_n = 2^{-n}$ in rarefied regime ($\varepsilon_0 = 1, \varepsilon_5 = 3.125 \times 10^{-2}$), transition regime ($\varepsilon_8 = 3.90 \times 10^{-3}$) and fluid regime ($\varepsilon_{10} = 9.7 \times 10^{-4}, \varepsilon_{14} = 6.10 \times 10^{-5}$) where f becomes close to a Maxwellian.

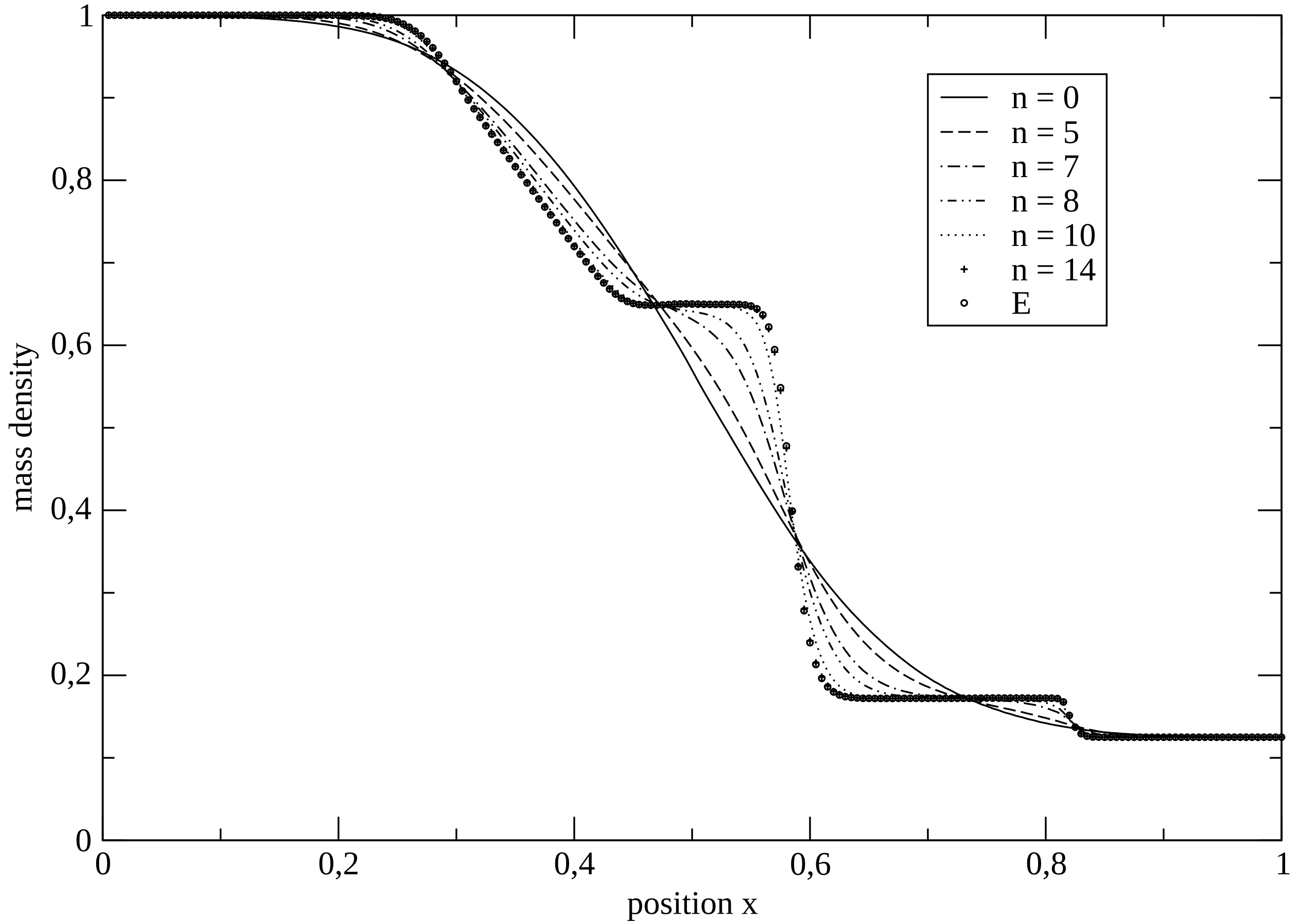

FIG. 7: Sod problem : mass density as a function of $x \in [0,1]$ at time $t = 0.14$, given by scheme (AP). Profiles for different values of $\varepsilon_n = 2^{-n}$ for rarefied regime ($\varepsilon_0 = 1, \varepsilon_5 = 3.125 \times 10^{-2}$), transition regime ($\varepsilon_8 = 3.90 \times 10^{-3}$) and fluid regime ($\varepsilon_{10} = 9.7 \times 10^{-4}, \varepsilon_{14} = 6.10 \times 10^{-5}$). The result of scheme (E) is also shown.

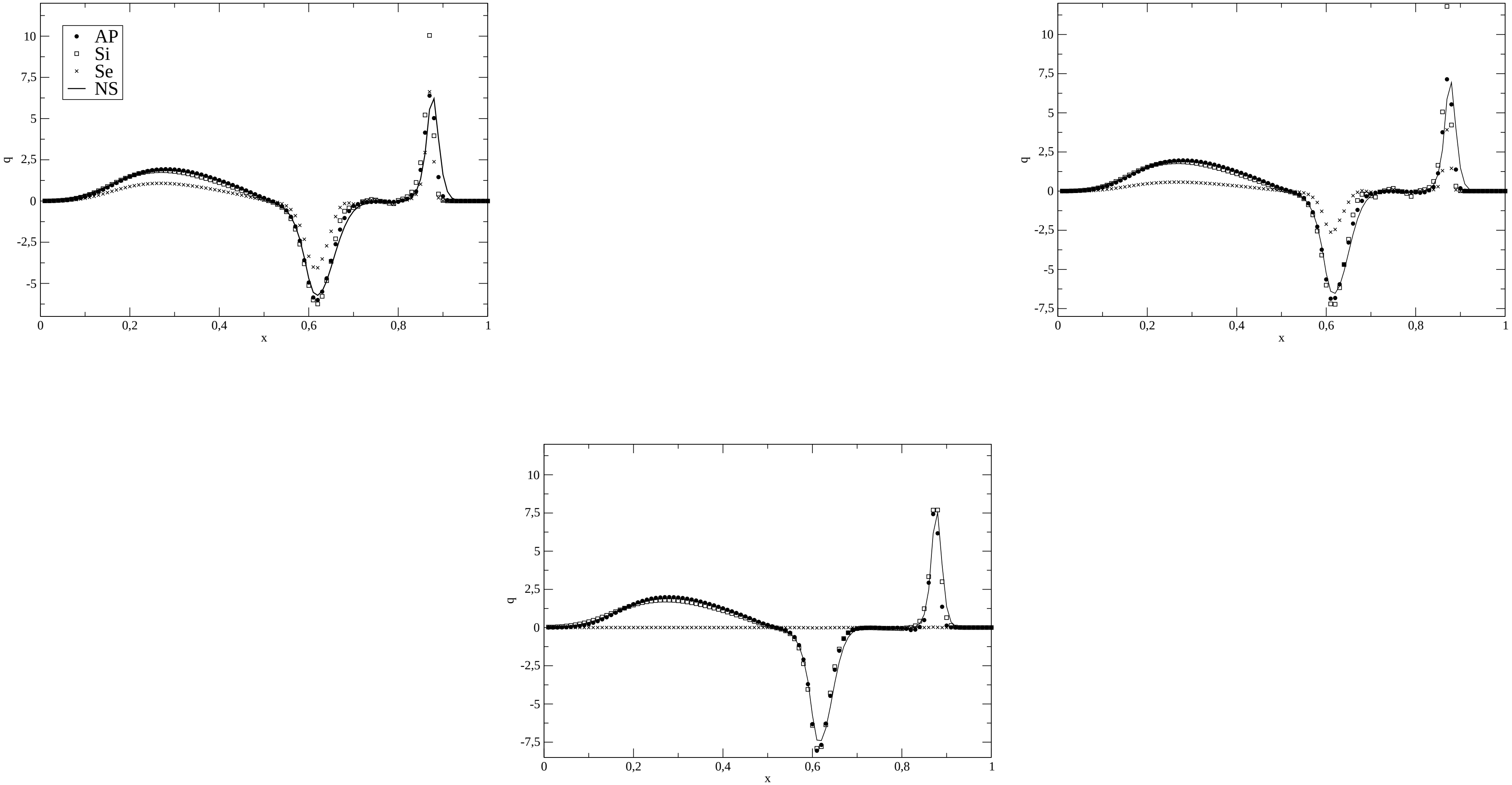

FIG. 8: Sod problem : heat flux scaled by ε as a function of $x \in [0,1]$ for schemes (AP), (S_i) (that preserve CNS asymptotics), for scheme (NS) and for scheme (S_e). Time $t = 0.16$, and $\varepsilon = 2^{-9} \approx 2 \times 10^{-3}$ (top), $\varepsilon = 2^{-10} \approx 10^{-3}$ (middle) and $\varepsilon = 2^{-12} \approx 2 \times 10^{-4}$ (bottom).

Conclusion

- Implémentation avec l'opérateur de Boltzmann complet et comparaison avec les sommes de Wild. Algorithmes rapides d'inversion.
- Modifier les sommes de Wild pour avoir l'asymptotique NS ?
- Traitement des couches limites en espace ?

$$f = M + \phi\left(t, \frac{x}{\varepsilon}, v\right) + \varepsilon g.$$