

Schémas cinétiques : aspects théoriques et optimisations informatiques

Clément Flint, Kevin Guillon, Romane Hélie, Philippe Helluy

23 juillet 2022

1 Contexte

Les systèmes de lois de conservation hyperboliques peuvent être représentés par des systèmes d'équations cinétiques couplés par des termes de relaxation raides, de type BGK [3, 1]. Ces représentations sont très intéressantes, car elles permettent de construire des schémas numériques parallèles très efficaces [4, 2, 8]. Elles sont à la base des schémas de type Lattice-Boltzmann (voir [10], pour une présentation récente de ce vaste sujet). En général, les étapes de transport et de relaxation sont traitées indépendamment, avec un schéma de splitting. La discrétisation numérique de l'étape de relaxation fait intervenir un paramètre ω . Si ce paramètre $\omega = 1$, l'étape de relaxation consiste à projeter les fonctions de distribution sur la distribution d'équilibre. Ce choix génère une viscosité numérique importante et conduit à un schéma d'ordre 2. Si $\omega = 2$, la relaxation est remplacée par une sur-relaxation, la viscosité numérique est plus faible et le schéma est alors d'ordre 2.

En jouant sur le paramètre de relaxation ω , les représentations cinétiques sont souvent utilisées pour ajouter de petits termes de viscosité. Pour cela, il faut calculer leur équation équivalente. L'outil théorique d'analyse est souvent la méthode de Chapman-Enskog (voir [10], par exemple). Mais la justification mathématique de cette méthode est délicate [11]. Une autre technique, basée sur des développements de Taylor est plus rigoureuse. Elle permet de retrouver les résultats de l'analyse de Chapman-Enskog sous l'hypothèse de petits écarts à l'équilibre cinétique [7, 9]. Il est aussi possible de ne pas faire l'hypothèse d'un petit écart à l'équilibre, afin de prendre en compte les effets dits de « couche-limite ». Cette approche, décrite dans [6], permet de retrouver les résultats habituels quand $\omega = 2$. En revanche, pour $1 < \omega < 2$, l'équation équivalente obtenue est différente.

2 Aspects théoriques

En jouant sur le paramètre de relaxation ω , les représentations cinétiques sont souvent utilisées pour ajouter de petits termes de viscosité. Pour cela, il faut calculer leur équation équivalente. L'outil théorique d'analyse est souvent la méthode de Chapman-Enskog (voir [10], par exemple). Mais la justification mathématique de cette méthode est délicate [11]. Une autre technique, basée sur

des développements de Taylor est plus rigoureuse. Elle permet de retrouver les résultats de l'analyse de Chapman-Enskog sous l'hypothèse de petits écarts à l'équilibre cinétique [7, 9]. Il est aussi possible de ne pas faire l'hypothèse d'un petit écart à l'équilibre, afin de prendre en compte les effets dits de « couche-limite ». Cette approche, décrite dans [6], permet de retrouver les résultats habituels quand $\omega = 2$. En revanche, pour $1 < \omega < 2$, l'équation équivalente obtenue est différente.

Le premier objectif est, par des simulations numériques, de vérifier la pertinence des deux analyses. Méthode : calculer des solutions exactes des équations équivalentes obtenues dans chaque cas et comparer avec la solution numérique.

Le deuxième objectif du projet de recherche est de trouver un moyen de relier les deux analyses. Normalement, il devrait être possible de retrouver les résultats pour un petit écart à l'équilibre à partir de l'analyse pour un écart arbitraire. Méthode : commencer par étudier le cas d'une équation de transport à vitesse constante. Essayer d'étendre au cas non-linéaire et aux systèmes. On peut aussi essayer de faire une analyse double échelle directement sur le schéma de splitting (mais ce n'est pas la priorité).

Le troisième objectif, s'il reste du temps, est de proposer une analyse de stabilité complètement non-linéaire de la méthode cinétique. En général, cette stabilité est indépendante de la stabilité de l'équation équivalente (voir [5]).

3 Optimisations informatiques

La représentation cinétique peut-être résolue par un schéma de Lattice-Boltzmann, particulièrement efficace puisqu'il est basé sur une succession de décalages de données en mémoire et de relaxations purement locales. Pour paralléliser la méthode, on peut découper le domaine de calcul (un cube) en sous-cubes et traiter chaque cube en parallèle séparément. La difficulté est d'optimiser l'algorithme de décalage, qui nécessite des échanges entre les cubes voisins. Un code optimisé sur GPU et basé sur StarPU a été écrit et testé, qui donne de bons résultats. Cependant la mémoire occupée est rapidement un facteur limitant, surtout en 3D.

L'objectif du projet est d'implémenter un algorithme de compression par ondelettes des données de chaque sous-cube afin d'accélérer les transferts mémoire sur le ou les GPU et de rendre possible des calculs qui ne rentreraient pas en mémoire autrement. Il est important que la technique de compression/décompression garantisse la conservation des variables conservatives. Méthode : utiliser un algorithme de compression par ondelettes 1D sur un intervalle. Appliquer cette algorithme direction par direction avec transposition des données en mémoire pour garantir des accès coalescents. La difficulté, afin d'assurer la conservation, est que l'algorithme implique un recouvrement de deux-couches aux interfaces entre les sous-domaines.

4 Proposition de planning lundi matin

Philippe, Clément : programmation de l'algorithme de compression 1D et tests de conservativité. Préparation de l'algorithme 3D, avec transpositions.

Romane, Kevin : Romane commence à expliquer à Kevin, pour le cas de l'équation de transport 1D et la représentation de Jin-Xin, comment on calcule des équations équivalentes. Il faudrait expliquer la méthode qui marche quand l'écart à l'équilibre est d'ordre $O(\Delta t)$, puis le cas général.

Références

- [1] Denise Aregba-Driollet and Roberto Natalini. Discrete kinetic schemes for multidimensional systems of conservation laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37(6) :1973–2004, 2000.
- [2] Hubert Baty, Florence Drui, Emmanuel Franck, Philippe Helluy, Christian Klingenberg, and Lukas Thanhäuser. A robust and efficient solver based on kinetic schemes for magnetohydrodynamics (mhd) equations. 2021.
- [3] François Bouchut. Construction of bgk models with a family of kinetic entropies for a given system of conservation laws. *Journal of Statistical Physics*, 95(1) :113–170, 1999.
- [4] David Coulette, Emmanuel Franck, Philippe Helluy, Michel Mehrenberger, and Laurent Navoret. High-order implicit palindromic discontinuous galerkin method for kinetic-relaxation approximation. *Computers & Fluids*, 190 :485–502, 2019.
- [5] Firas Dhaouadi, Emilie Duval, Sergey Tkachenko, and Jean-Paul Vila. Stability theory for some scalar finite difference schemes : validity of the modified equations approach. *ESAIM : Proceedings and Surveys*, 70 :124–136, 2021.
- [6] Florence Drui, Emmanuel Franck, Philippe Helluy, and Laurent Navoret. An analysis of over-relaxation in a kinetic approximation of systems of conservation laws. *Comptes Rendus Mécanique*, 347(3) :259–269, 2019.
- [7] François Dubois. Equivalent partial differential equations of a lattice boltzmann scheme. *Computers & Mathematics with Applications*, 55(7) :1441–1449, 2008.
- [8] Pierre Gerhard, Philippe Helluy, and Victor Michel-Dansac. Unconditionally stable and parallel discontinuous galerkin solver. *Computers & Mathematics with Applications*, 112 :116–137, 2022.
- [9] Benjamin Graille. Approximation of mono-dimensional hyperbolic systems : A lattice boltzmann scheme as a relaxation method. *Journal of Computational Physics*, 266 :74–88, 2014.
- [10] Timm Krüger, Halim Kusumaatmaja, Alexandr Kuzmin, Orest Shardt, Goncalo Silva, and Erlend Magnus Viggren. The lattice boltzmann method. *Springer International Publishing*, 10(978-3) :4–15, 2017.
- [11] Laure Saint-Raymond. From the bgk model to the navier-stokes equations. In *Annales scientifiques de l'Ecole normale supérieure*, volume 36, pages 271–317, 2003.