Décomposition micro-macro pour Vlasov-BGK en utilisant des particules

Anaïs Crestetto [1], Nicolas Crouseilles [2] et Mohammed Lemou [3].

Groupe de travail Multi-échelles, le 9 février 2012.

1. INRIA Nancy - Grand Est & Université de Strasbourg, IRMA
2. INRIA Rennes - Bretagne Atlantique & ENS Cachan Bretagne, IRMAR
3. Université de Rennes I & ENS Cachan Bretagne, IRMAR

Plan de l'exposé :

1. Problématique
2. Décomposition micro-macro
3. Résultats numériques

Simulation numérique des plasmas

Différentes échelles (nombre de Knudsen ε) $\Longrightarrow$ différents modèles.

- Modélisation cinétique :
  - particules représentées par une fonction de distribution $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$,
  - équation de Vlasov (avec second membre $S(\varepsilon)$)

$$\partial_t f + \mathbf{v} \cdot \partial_{\mathbf{x}} f + \frac{q}{m} (\mathbf{E} + \mathbf{v} \wedge \mathbf{B}) \cdot \partial_{\mathbf{v}} f = S(\varepsilon)$$

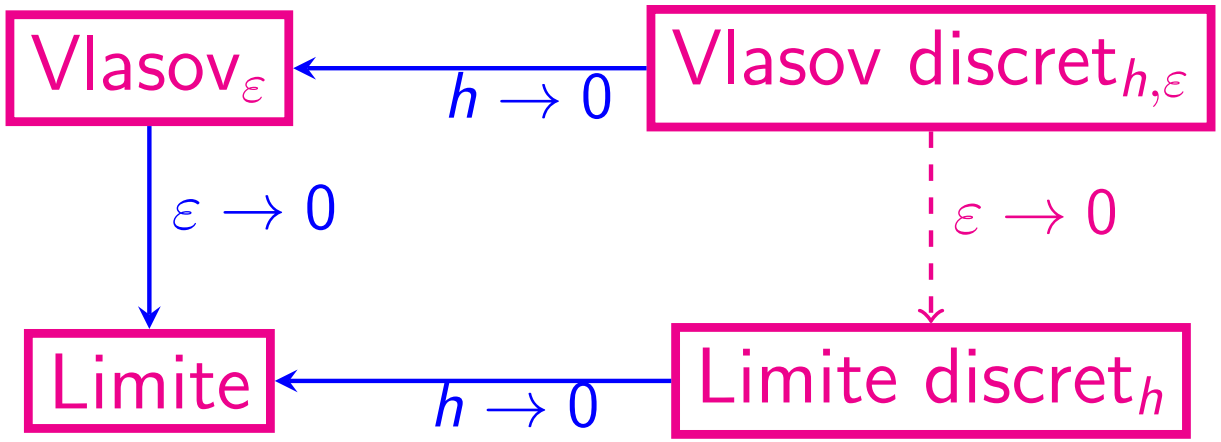
    couplée aux équations de Maxwell ou à l'équation de Poisson,
    ($\mathbf{E}$ champ électrique, $\mathbf{B}$ champ magnétique, $\mathbf{x}$ position, $\mathbf{v}$ vitesse, t temps, q charge des particules, m masse des particules)
  - en 3D $\Longrightarrow$ 7 variables : 3 en espace, 3 en vitesse et le temps $\Longrightarrow$ calculs très lourds.

- Modélisation fluide : trop grossière pour $\varepsilon \neq 0$.
- Si deux échelles dans la même simulation : deux schémas avec une interface ? Mais interface difficile à gérer !

Obj. 1. Construire un schéma précis sans être trop coûteux.

Obj. 2. Construire un schéma préservant l'asymptotique (AP pour Asymptotic Preserving).

Schéma AP



Ppté : Stabilité et consistance $\forall \varepsilon$, en particulier quand $\varepsilon \to 0$.

Déf. : Au sens de Jin, un schéma est AP si pour Δt, Δx fixés, quand $\varepsilon \to 0$, le schéma limite est consistant avec l'équation asymptotique.

Vlasov-BGK

- Vlasov avec collisions $\Longrightarrow$ équation de Vlasov-BGK :

$$\partial_t f + v\partial_x f + E\partial_v f = \frac{1}{\varepsilon} Q(f)$$

couplée avec l'équation de Poisson :

$$\partial_x E(x,t) = \rho(x,t) - 1 = \int f(x,v,t)\, dv - 1.$$

(ε nombre de Knudsen, $\rho = \rho(x,t)$ densité de charge.)

- $Q(f)$ opérateur de collisions BGK (Bhatnagar-Gross-Krook) :

$$Q(f) = M(U) - f,$$

avec $M(U)$ Maxwellienne ayant les mêmes trois premiers moments que f, notés U.

- $M(U)(x,v,t) = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{|v-u|^2}{2T}\right)$.

  ($T = T(x,t)$ température, $u = u(x,t)$ vitesse moyenne.)

- $$U = \int \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} f \, dv = \int \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix} M(U) \, dv$$
  $$\Longrightarrow U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \frac{1}{2}(\rho u^2 + \rho T) \end{pmatrix}.$$

- Remarques :
  - $M(U) \in Ker\ Q = Span\left\{M, vM, |v|^2 M\right\}$,
  - $f - M(U) \to 0$ quand $\varepsilon \to 0$: les collisions ramènent f vers sa Maxwellienne.

Modèle micro-macro

- Écriture $f = M(U) + g$:

$$\partial_t M(U) + v\partial_x M(U) + E\partial_v M(U) + \partial_t g + v\partial_x g + E\partial_v g = -\frac{1}{\varepsilon} g.$$

Opérateur de transport $\mathcal{T} \cdot = v\partial_x \cdot + E\partial_v \cdot$:

$$\partial_t M(U) + \mathcal{T} M(U) + \partial_t g + \mathcal{T} g = -\frac{1}{\varepsilon} g.$$

- Hypothèse : trois premiers moments de g nuls $\Longrightarrow$

$$\langle mf \rangle := \int m(v) f(x, v, t) \, dv = U(x, t),$$

où $m(v) = \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{v^2}{2} \end{pmatrix}$.

Conservée au niveau numérique ? Sinon, l'imposer.

Mise en équations

Soit Π_M la projection orthogonale sur $Ker\ Q$ dans $L^2\left(M^{-1}dv\right)$:

$$\Pi_M(\varphi) = \frac{1}{\rho}\left[\langle\varphi\rangle + \frac{(v-u)\langle(v-u)\varphi\rangle}{T} + \left(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{1}{2}\right)\left\langle\left(\frac{|v-u|^2}{T} - 1\right)\varphi\right\rangle\right] M.$$

- Propriétés : $(I-\Pi_M)(\partial_t M) = \Pi_M(g) = \Pi_M(\partial_t g) = 0$.
- En appliquant $(I-\Pi_M)$ à Vlasov-BGK $\Longrightarrow$ équation micro sur g

$$\partial_t g + (I-\Pi_M)\mathcal{T}(M+g) = -\frac{1}{\varepsilon}g.$$

- En appliquant Π_M à Vlasov-BGK $\Longrightarrow$ équation macro sur $M(U)$

$$\partial_t M + \Pi_M \mathcal{T}(M+g) = 0$$

qui se réécrit (en prenant les 3 premiers moments)

$$\partial_t U + \partial_x F(U) + \partial_x \langle v m(v) g \rangle = S(U),$$

où $F(U) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + \rho T \\ \rho u \left(\frac{u}{2} + \frac{3}{2} T\right) \end{pmatrix}$: flux d'Euler

et $S(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ \rho E \\ \rho u E \end{pmatrix}$: terme source.

Algorithme

Système à résoudre :

$$\begin{cases} \partial_t g + (I - \Pi_M)\mathcal{T}(M + g) = -\frac{1}{\varepsilon} g \\ \partial_t U + \partial_x F(U) + \partial_x \langle v m(v) g \rangle = S(U) \end{cases}$$

équivalent à Vlasov-BGK.

1. Résolution de la partie micro par la méthode Particle-In-Cell (PIC).
2. Étape de projection pour annuler numériquement les trois premiers moments de g.
3. Résolution de la partie macro par un schéma de volumes finis (sur maillage en x), avec un terme source dépendant de g.

Méthode PIC

- Équation

$$\partial_t g + (I - \Pi_M)\mathcal{T}(M + g) = -\frac{1}{\varepsilon} g$$

$$\Longleftrightarrow$$

$$\partial_t g + \mathcal{T} g = -(I - \Pi_M)\mathcal{T} M + \Pi_M \mathcal{T} g - \frac{g}{\varepsilon} =: S_g.$$

- Méthode particulaire : soient N particules, de position x_k, de vitesse v_k et de poids ω_k, g est approchée par

$$g_N(x, v, t) = \sum_{k=1}^{N} \omega_k(t)\, \delta(x - x_k(t))\, \delta(v - v_k(t)).$$

1. Initialisation :
   - particules disposées aléatoirement (ou quasi) dans l'espace des phases (x, v),
   - poids initialisés selon $\omega_k(0) = g(x_k, v_k, 0)\frac{L_x L_v}{N}$.
     (L_x longueur du domaine en x, L_v en v.)
2. Résolution du champ électrique sur maillage :

$$\partial_x E(x,t) = \rho(x,t) - 1 = \int f(x,v,t)\,dv - 1$$

en discrétisant en espace :

$$\rho_i(t) = \sum_{k/x_k \in [x_i, x_{i+1}[} \omega_k(t),$$

puis interpolation aux positions des particules $\rightarrow E(x_k, t)$ (Splines linéaires, cubiques, etc.).

Résolution de $\partial_t g + \mathcal{T} g = 0$

3. Déplacement des particules grâce aux équations du mouvement, sous l'effet de E :

$$\frac{dx_k}{dt}(t) = v_k(t) \quad \text{et} \quad \frac{dv_k}{dt}(t) = E(x_k, t).$$

Utilisation d'un schéma de Verlet (par exemple) :

$$\begin{cases} v_k^{n+\frac{1}{2}} = v_k^n + \dfrac{\Delta t}{2} E^n(x_k^n) \\ x_k^{n+1} = x_k^n + \Delta t\, v_k^{n+\frac{1}{2}} \\ v_k^{n+1} = v_k^{n+\frac{1}{2}} + \dfrac{\Delta t}{2} E^{n+1}(x_k^{n+1}) \end{cases}.$$

Résolution de $\partial_t g = S_g$

4. Évolution des poids ω_k (étape spécifique aux équations cinétiques avec terme source) :

$$\frac{d\omega_k}{dt}(t) = s_k(t),$$

où $s_k(t) = S_g(x_k, v_k)\frac{L_x L_v}{N}$: poids associé au terme source $S_g = -(I - \Pi_M)\mathcal{T}M + \Pi_M \mathcal{T} g - \frac{g}{\varepsilon}$.

Réécriture :

$$\frac{d\omega_k}{dt}(t) = \alpha_k(t) - \frac{\omega_k(t)}{\varepsilon},$$

où $\alpha_k(t)$ est le poids associé à $-(I - \Pi_M)\mathcal{T}M + \Pi_M \mathcal{T} g$ qui ne fait intervenir que les moments de g, leurs dérivées et M.

- Moments de g calculés par déposition, dérivés par différences finies et évalués en (x_k, v_k) par interpolation, ainsi que ρ, u et T.
- $M = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{|v-u|^2}{2T}\right)$ alors facilement évaluée en (x_k, v_k).
- Pour avoir un schéma AP, on doit impliciter le terme raide $\frac{\omega_k(t)}{\varepsilon}$. D'où le schéma

$$\omega_k^{n+1} = \frac{\omega_k^n + \Delta t \alpha_k^n}{1 + \frac{\Delta t}{\varepsilon}}.$$

Étape de projection

- On a alors

$$g^{n+1}(x,v,t) \approx \sum_{k=1}^{N} \omega_k^{n+1} \delta\left(x - x_k^{n+1}\right) \delta\left(v - v_k^{n+1}\right)$$

  qui ne vérifie pas forcément $\langle m(v) g^{n+1} \rangle = 0$.
- On pose $U_g := \langle m g^{n+1} \rangle \neq 0$,

$$U_g(x_i) = \langle m g^{n+1} \rangle \,|_{x_i} = \sum_{k/|x_k - x_i| \leq \Delta x/2} \omega_k m(v_k).$$

- Soit $h \in Ker\ Q$ de la forme $h(x,v) = \lambda(x) \cdot m(v) M(x,v)$ tq $h = \Pi_M g^{n+1}$.
  On cherche $\lambda(x_i) \in \mathbb{R}^3$ tq $U_g(x_i) = \langle m h(x_i, v) \rangle$.

- Soit $\gamma_k = \lambda(x_i) \cdot m(v_k) p_k$ les poids associés à h avec p_k les poids associés à M, alors

$$\begin{aligned} \langle mh \rangle|_{x_i} &= \sum_{k/|x_k - x_i| \leq \Delta x/2} m(v_k)\lambda(x_i) \cdot m(v_k) p_k, \\ &= \left(\sum_{k/|x_k - x_i| \leq \Delta x/2} p_k m(v_k) \otimes m(v_k) \right) \lambda(x_i). \end{aligned}$$

- On résout alors le système linéaire

$$U_g(x_i) = A_i \lambda(x_i), \quad A_i = \begin{pmatrix} M_0 & M_1 & M_2 \\ M_1 & M_2 & M_3 \\ M_2 & M_3 & M_4 \end{pmatrix},$$

avec $M_j = \sum_{k/|x_k - x_i| \leq \Delta x/2} p_k v_k^j$.

- On détermine les poids $\gamma_k = \lambda(x_i) \cdot m(v_k) p_k$ $\forall i = 0, \ldots, N_x - 1$ et $\forall k = 0, \ldots, N_{part}$.
- On corrige les poids de g

$$\omega_k^{new} \leftarrow \omega_k - \gamma_k,$$

et on obtient

$$\langle m g^{n+1,new} \rangle \,|_{x_i} = \sum_{k/|x_k - x_i| \leq \Delta x/2} \omega_k^{new} m(v_k)$$

$$= \sum_{k/|x_k - x_i| \leq \Delta x/2} \omega_k m(v_k) - \sum_{k/|x_k - x_i| \leq \Delta x/2} \gamma_k m(v_k) = 0.$$

Partie macro

- Équation $\partial_t U + \partial_x F(U) = \tilde{S}(U, g)$ $(= S(U) - \partial_x \langle vm(v)g \rangle)$.
- Méthode des volumes finis

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(F_{i+1/2}^n - F_{i-1/2}^n\right) - \Delta t \tilde{S}_i^n,$$

avec le flux de Rusanov

$$F_{i+1/2}^n = \frac{1}{2}\left(F\left(U_{i+1}^n\right) + F\left(U_i^n\right) - a_{i+1/2}(U_{i+1} - U_i)\right),$$

où $a_{i+1/2} = max_{j=i,i+1}\left(abs\ R\left(J_F\left(x_j\right)\right)\right)$ avec $R\left(J_F\right)$ les valeurs propres du Jacobien de F. Et avec

$$\tilde{S}_i^n = S\left(U_i^n\right) - \left(\frac{\langle vmg^{n+1}\rangle|_{x_{i+1/2}} - \langle vmg^{n+1}\rangle|_{x_{i-1/2}}}{\Delta x}\right)$$

où $\langle vmg^{n+1}\rangle|_{x_{i+1/2}} = \sum_{k/|x_k - x_{i+1/2}| \leq \Delta x/2} \omega_k^{n+1} v_k m(v_k)$.

Limite analytique

$$\begin{aligned} \partial_t g + (I - \Pi_M)\mathcal{T}(M+g) &= -\frac{1}{\varepsilon} g, & (1)\\ \partial_t U + \partial_x F(U) + \partial_x \langle v m(v) g \rangle &= S(U). & (2) \end{aligned}$$

- Limite $\varepsilon \to 0$ dans (1) : $g = \mathcal{O}(\varepsilon) \Longrightarrow$

$$\begin{aligned} g &= -\varepsilon(I - \Pi_M)\mathcal{T}M + \mathcal{O}(\varepsilon^2),\\ &= -\varepsilon(I - \Pi_M)(v\partial_x M + E\partial_v M) + \mathcal{O}(\varepsilon^2),\\ &= -\varepsilon(I - \Pi_M)(v\partial_x M) + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \end{aligned}$$

car $E\partial_v M \in Ker\ Q$ donc $(I - \Pi_M)(E\partial_v M) = 0$.

- Injecté dans (2), on obtient le modèle de Navier-Stokes

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = S(U) + \varepsilon \partial_x \langle v m(v)(I - \Pi_M)(v\partial_x M) \rangle + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

Limite numérique

- (1) se discrétise

$$\begin{aligned} \frac{\omega_k^{n+1} - \omega_k^n}{\Delta t} &= -\alpha_{1,k}^n + \alpha_{2,k}^n - \frac{\omega_k^{n+1}}{\varepsilon}, \\ \omega_k^{n+1} &= \frac{1}{1 + \Delta t/\varepsilon} \left(\omega_k^n - \Delta t \alpha_{1,k}^n + \Delta t \alpha_{2,k}^n \right). \end{aligned}$$

- Or $\frac{1}{1+\Delta t/\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\Delta t} + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ quand $\varepsilon \to 0$, $\omega_k^n = \mathcal{O}(\varepsilon)$ et $\alpha_{2,k}^n = \mathcal{O}(\varepsilon)$ donc

$$\omega_k^{n+1} = -\varepsilon \alpha_{1,k}^n + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

- On obtient le terme de diffusion du modèle de Navier-Stokes

$$g^{n+1} = -\varepsilon (I - \Pi_M) \mathcal{T} M + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$\Longrightarrow$ propriété AP.

Amortissement Landau

- Fonction de distribution initiale :

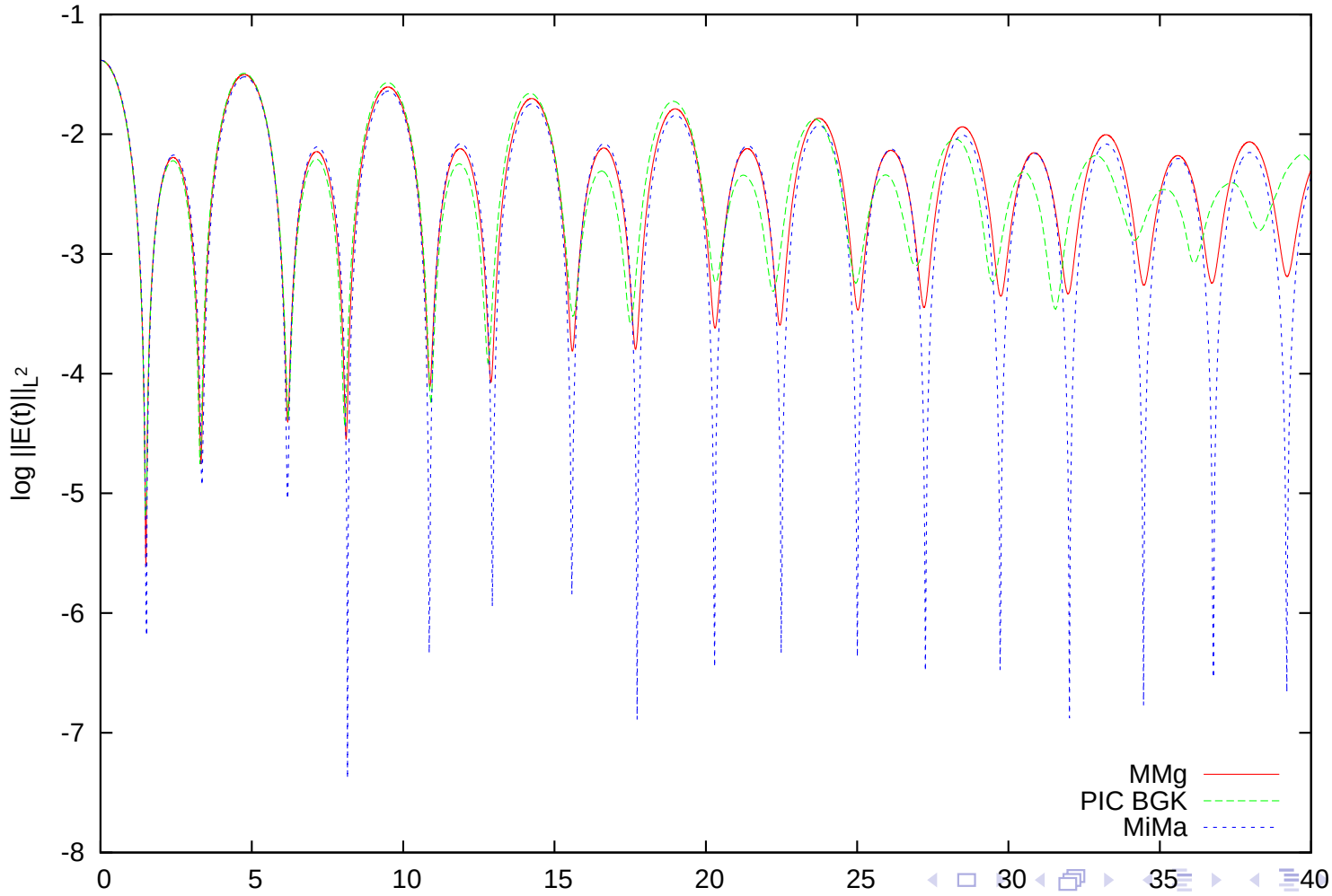
$$f(x,v,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{v^2}{2})(1+\alpha\cos(kx)), \qquad x \in [0, 2\pi/k]$$

- Initialisations micro-macro :

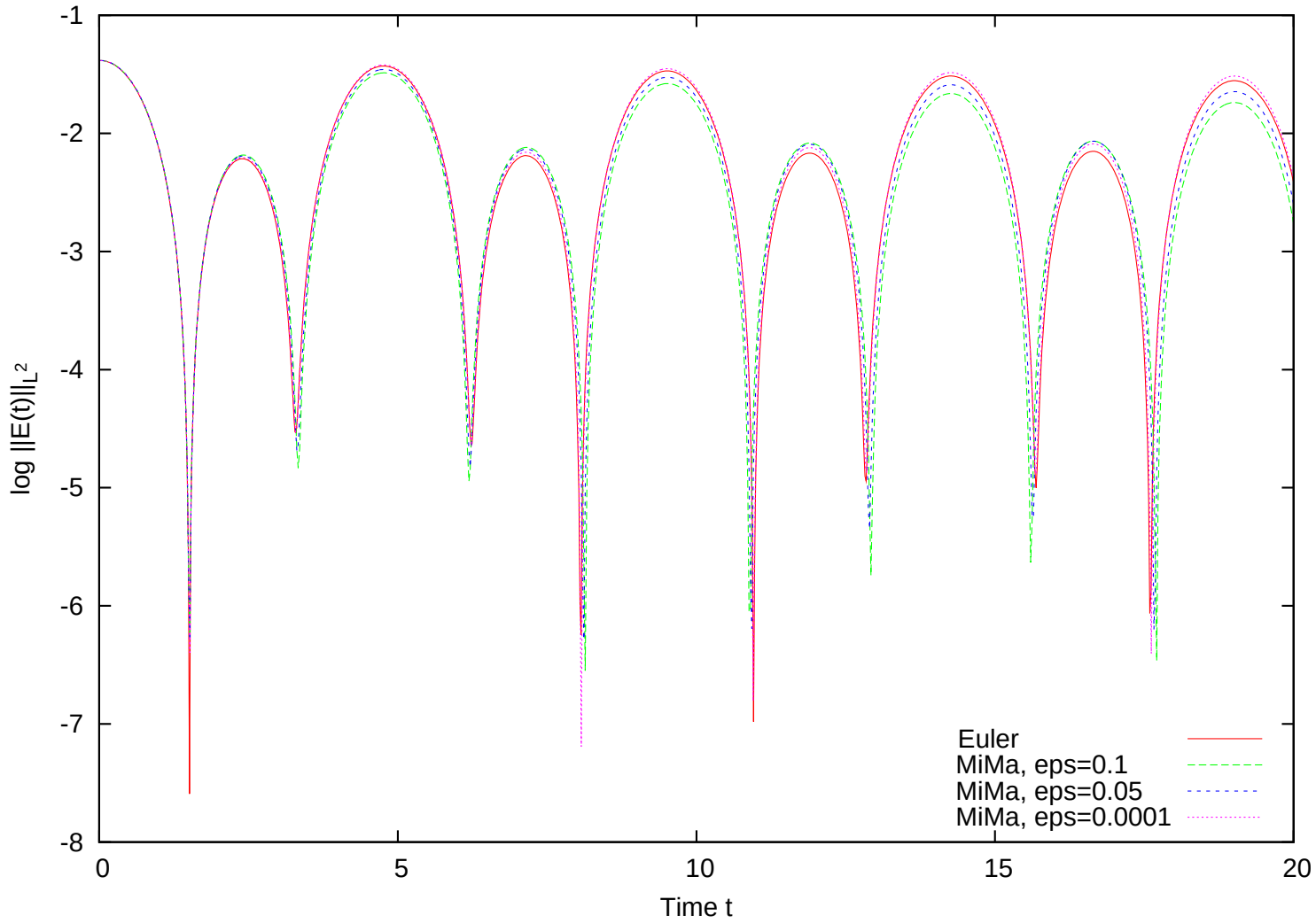
$$U(x) = \begin{pmatrix} 1+\alpha\cos(kx) \\ 0 \\ 1+\alpha\cos(kx) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad g(t=0,x,v) = 0.$$

- Paramètres : $\alpha = 0.05,\ k = 0.5.$
- Observation : énergie électrique $\mathcal{E}(t) = \sqrt{\int E(t,x)^2 dx}.$

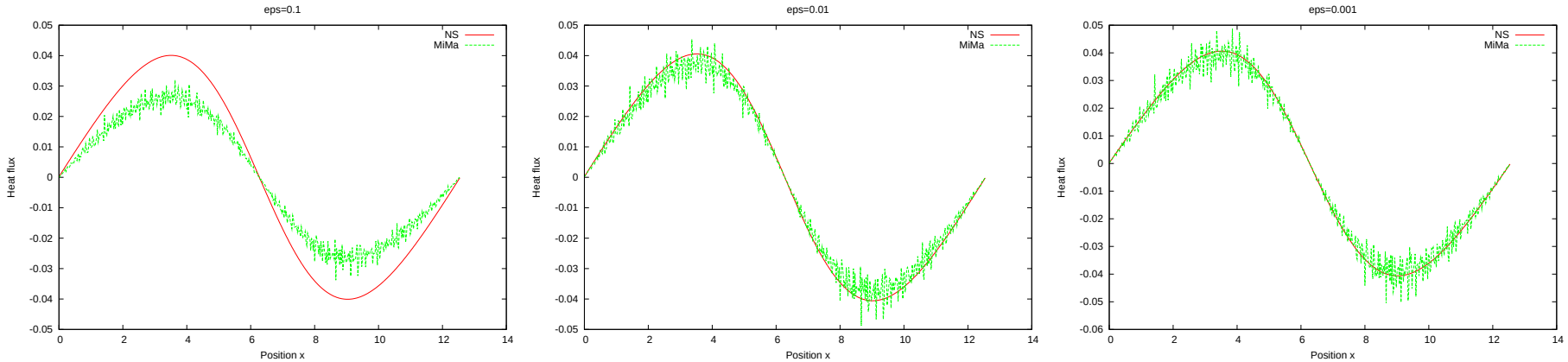
Comparaison de MiMa à une méthode PIC sur Vlasov-BGK et à une méthode micro-macro sur grille, $\varepsilon = 0.1$, $N_x = 128$, $N_{part} = 5 \times 10^5$:



Convergence à la limite $\varepsilon \to 0$, $N_x = 128$, $N_{part} = 5 \times 10^3$:

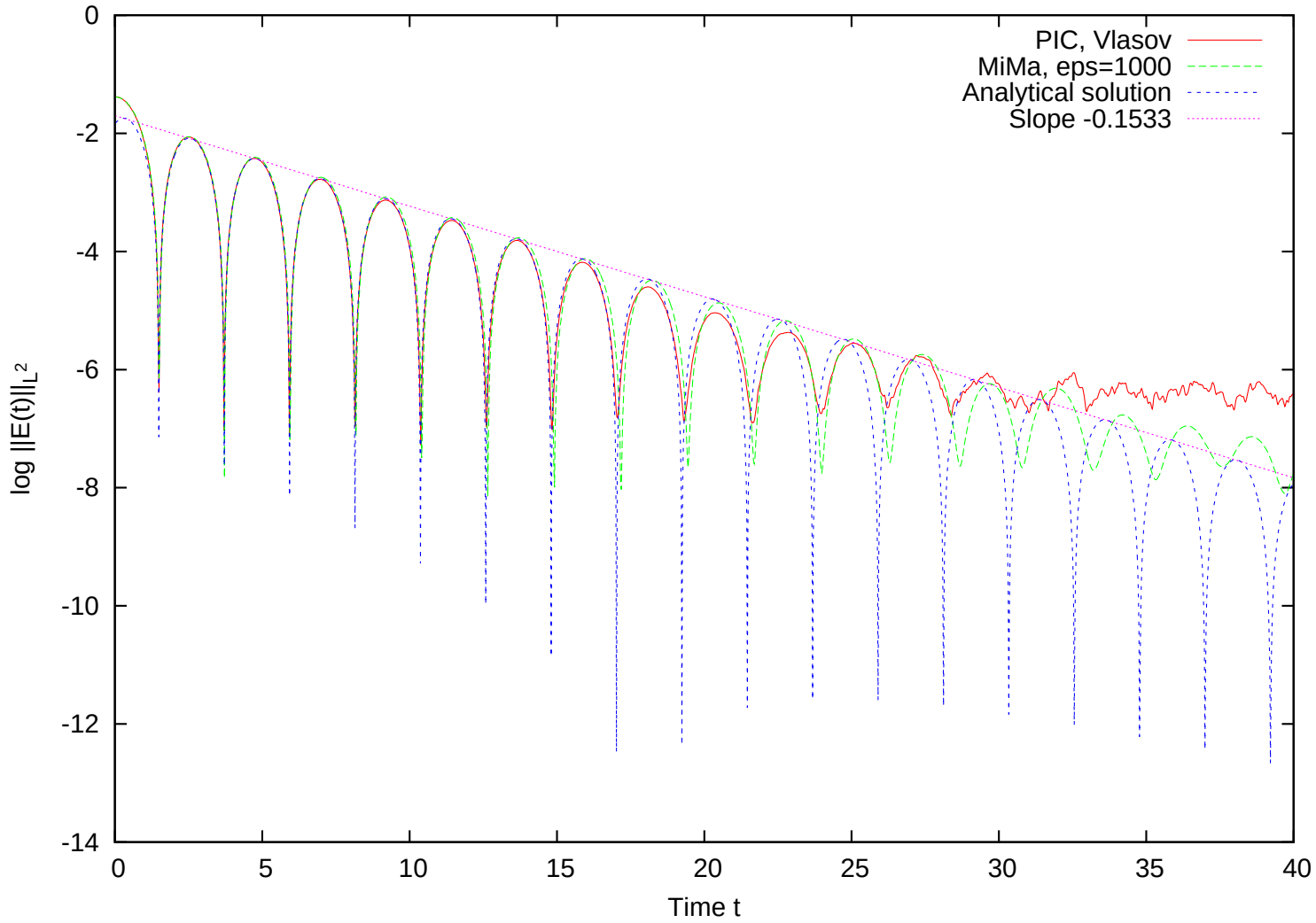


Flux de chaleur de MiMa (en vert) et de Navier-Stokes (en rouge) à $t = 1$ avec $N_{part} = 10^6$ pour $\varepsilon = 0.1$ (gauche), 0.01 (centre) et 0.001 (droite) :

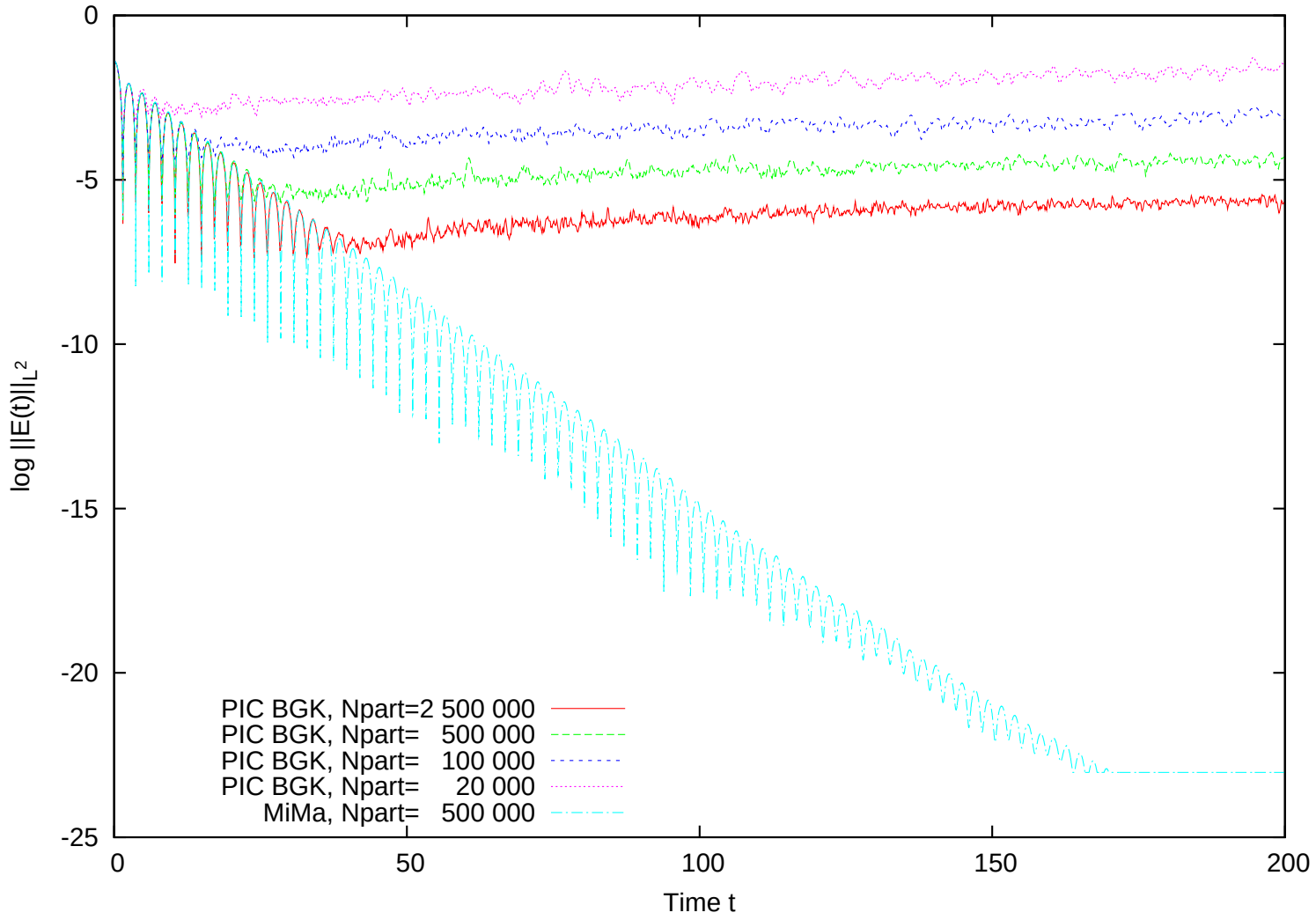


où les flux de chaleur correspondent à :
$(3/2)\rho T \partial_x T$ pour NS et
$\frac{1}{\varepsilon}\langle |v-u|^3 (M+g)\rangle$ pour le micro-macro.

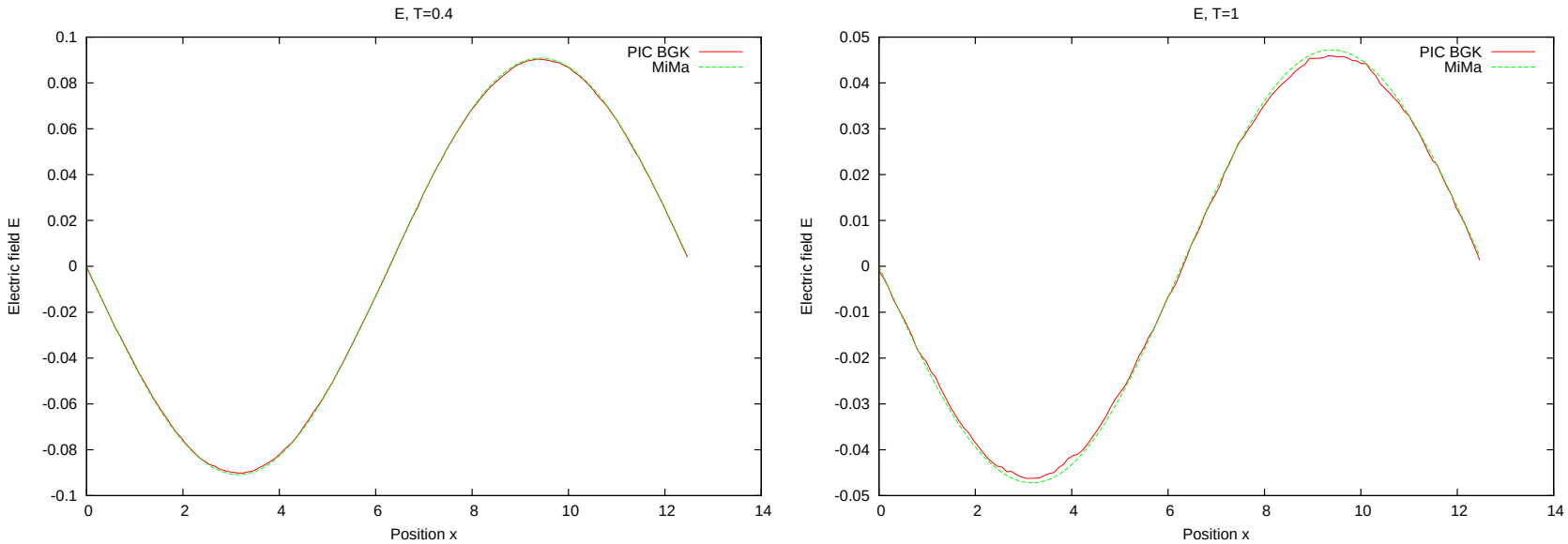
Limite non collisionnelle $\varepsilon \to +\infty$, $N_x = 128$, $N_{part} = 5 \times 10^5$:



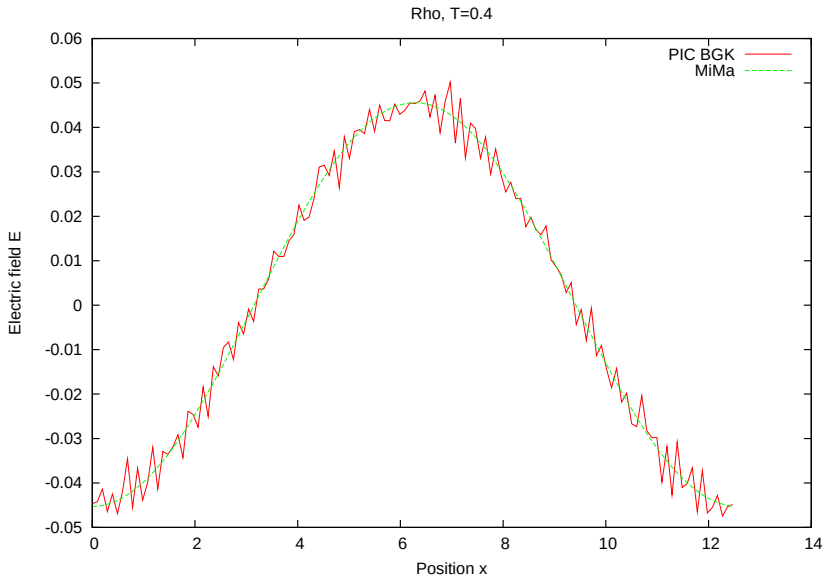
Nombre de particules nécessaires, $\varepsilon = 10$, $N_x = 128$:

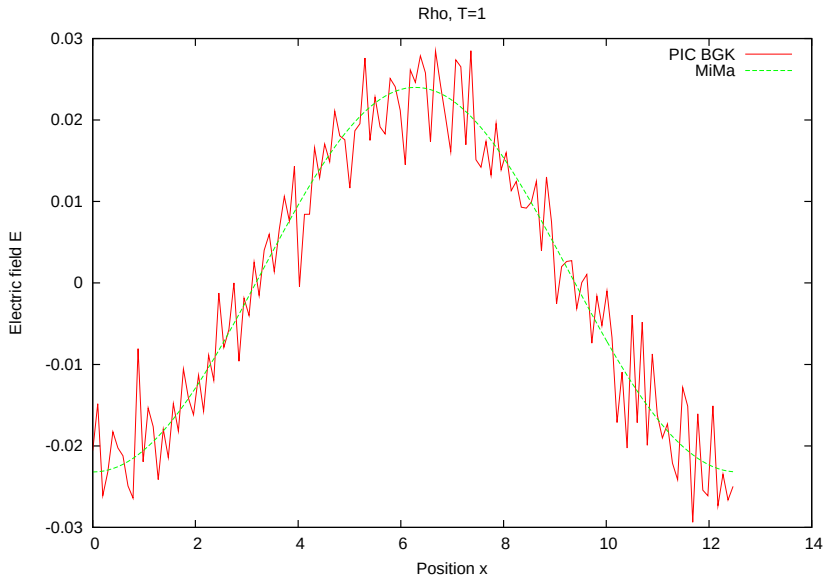


Réduction du bruit sur E, $\varepsilon = 1$, $N_x = 128$, $N_{part} = 5 \times 10^5$, à $t = 0.4$ (gauche) et $t = 1$ (droite) :



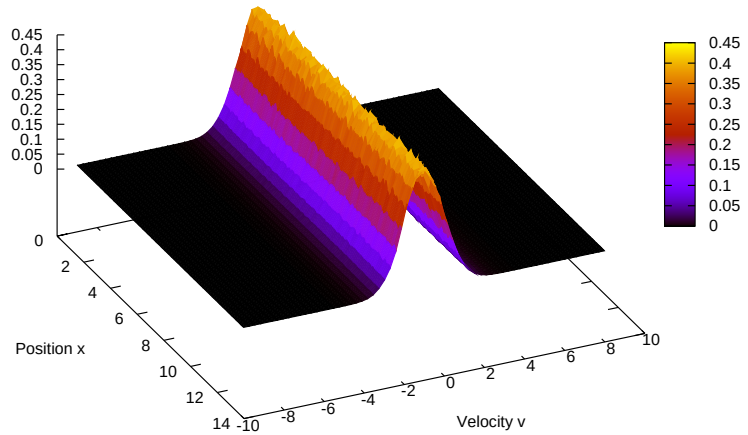
Réduction du bruit sur ρ, $\varepsilon = 1$, $N_x = 128$, $N_{part} = 5 \times 10^5$, à $t = 0.4$ (gauche) et $t = 1$ (droite) :



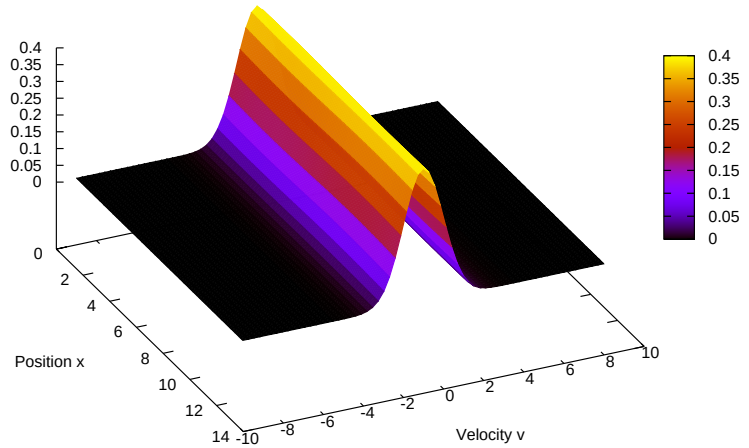


Fonction de distribution f de PIC BGK, de MiMa, g et M, à $t = 20$, $\varepsilon = 1$, $N_{part} = 5 \times 10^5$

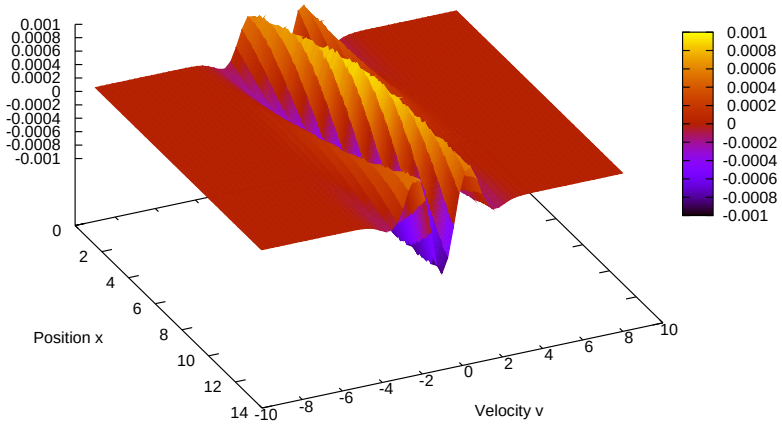
f - PIC BGK



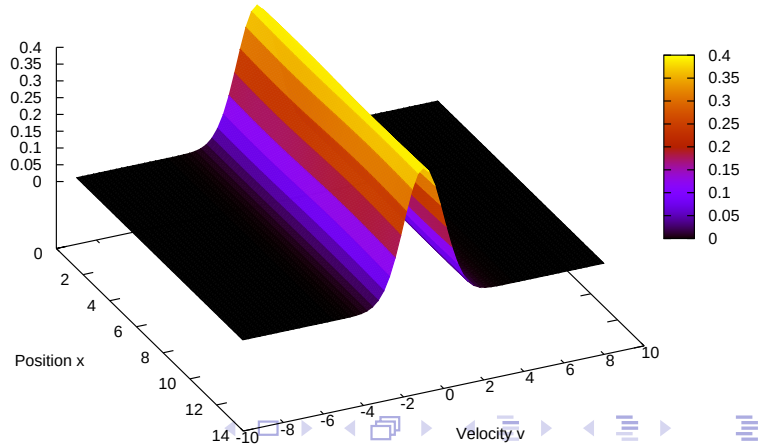
f - MiMa



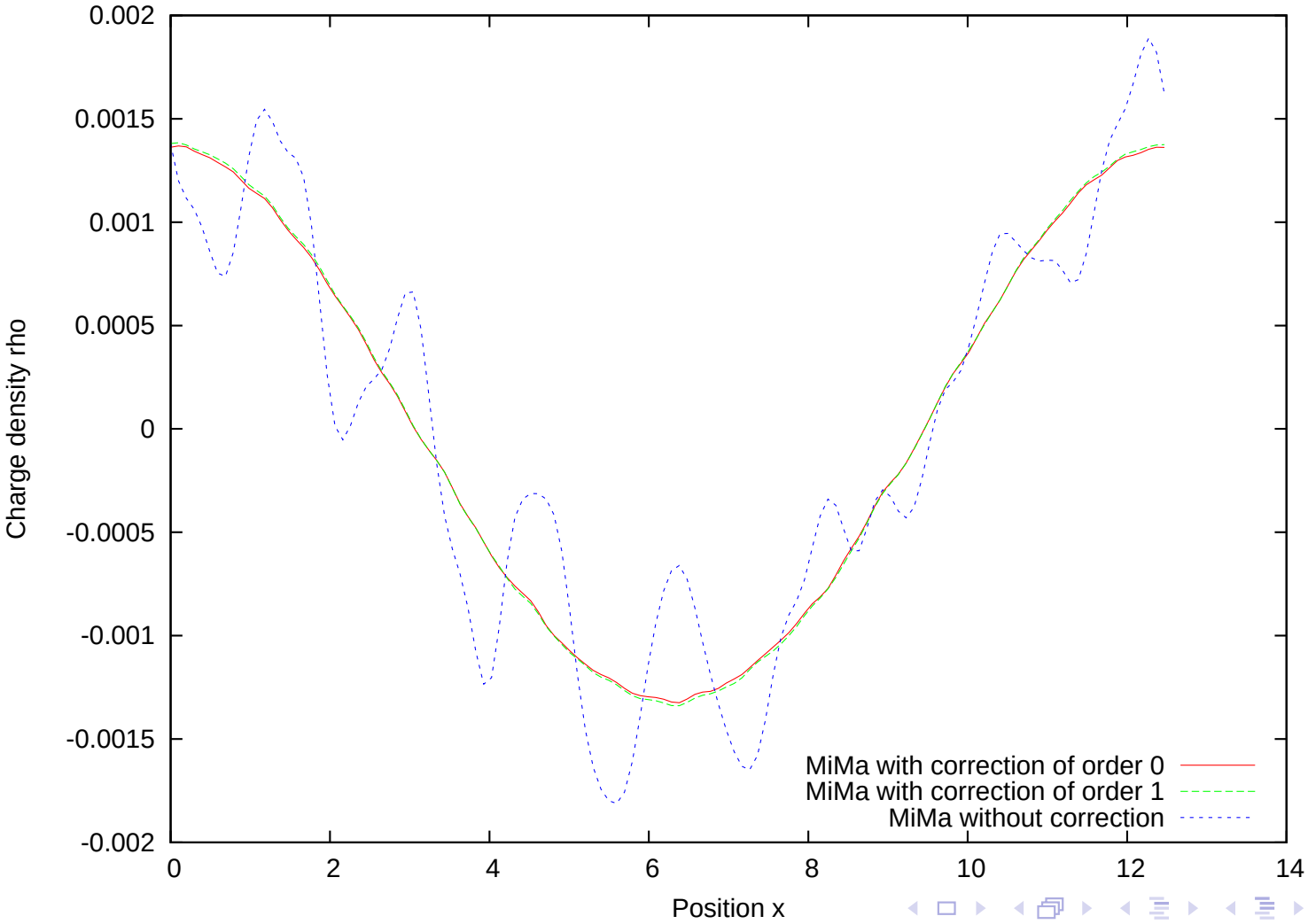
g - MiMa



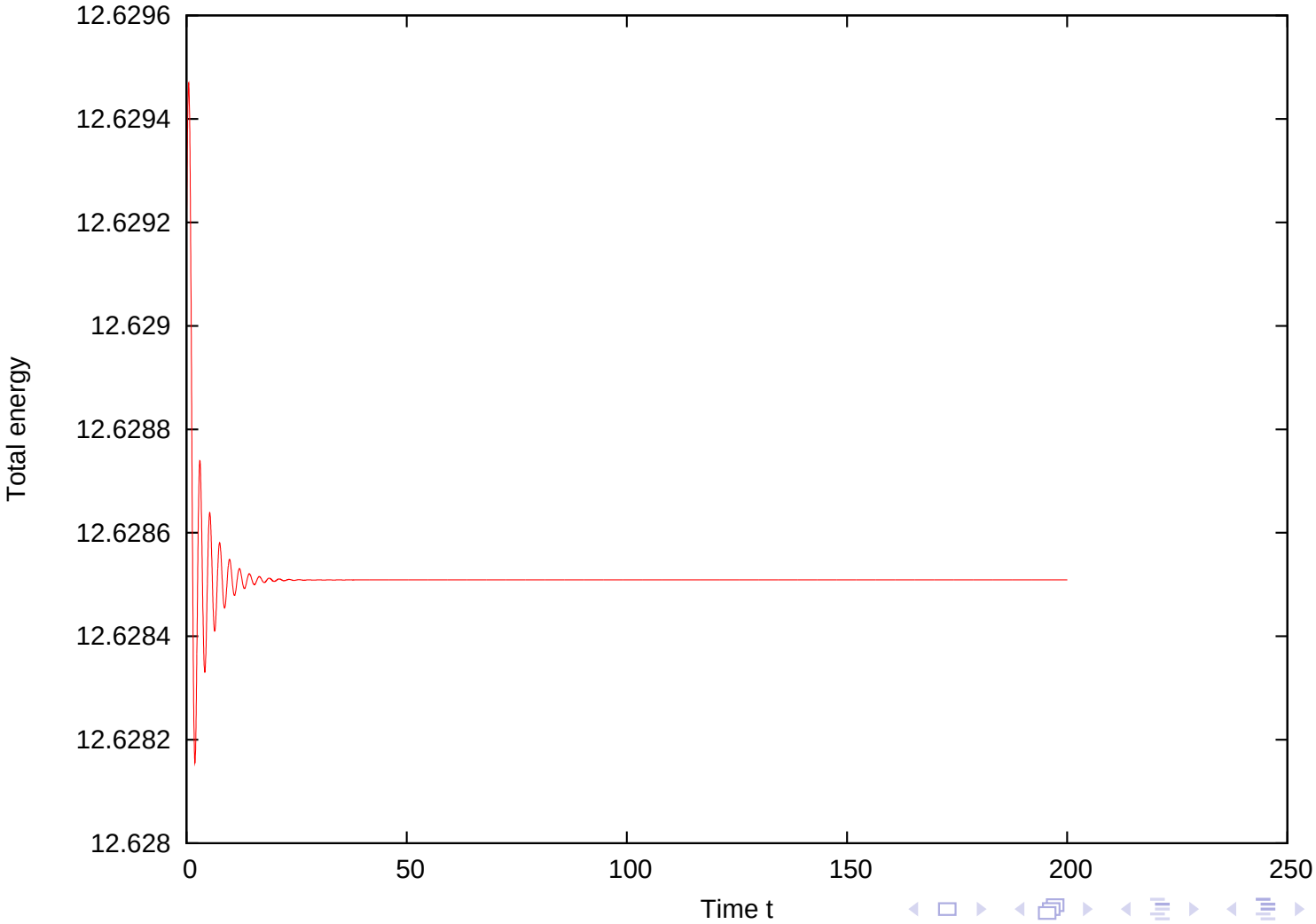
M - MiMa



Importance de la projection des moments de g sur ρ à $t = 20$, $\varepsilon = 1$, $N_{part} = 5 \times 10^5$:



Conservation de l'énergie totale $\int \int v^2 f \ dvdx + \int E^2 \ dx$ avec $\varepsilon = 10$, $N_{part} = 5 \times 10^5$:



Conclusions

- Limite fluide retrouvée quand $\varepsilon \to 0$.
- Étape de projection pour conserver les moments de g nuls numériquement.
- $g \to 0$ quand $\varepsilon \to 0 \Longrightarrow$ peu de particules suffisent à la limite, alors que les méthodes sur grille (x, v) ont un coût constant quelle que soit la valeur de ε.
- Bruit inhérent aux méthodes PIC réduit (car uniquement sur g) $\Longrightarrow$ à résultats équivalents, moins de particules nécessaires $\Longrightarrow$ temps de calcul diminué.

Perspectives

- Considérer d'autres opérateurs de collisions.
- Passer en $2D$ ($4D$ dans l'espace des phases).

Références :

- M. Benoune, M. Lemou, L. Mieussens : **Uniformly stable numerical schemes for the Boltzmann equation preserving the compressible Navier-Stokes asymptotics**, J. Comput. Phys. **227** pp. 3781-3803, (2008)
- N. Crouseilles, M. Lemou : **An asymptotic preserving scheme based on a micro-macro decomposition for collisional Vlasov equations : diffusion and high-field scaling limits**, KRM 4, pp. 441-477, (2011)
- A. Crestetto, N. Crouseilles, M. Lemou : **Micro-macro decomposition for Vlasov-BGK equation using particles**, en préparation...

Merci de votre attention !