Couplage de codes de calculs :
Modélisation mathématique,
Approximation numérique

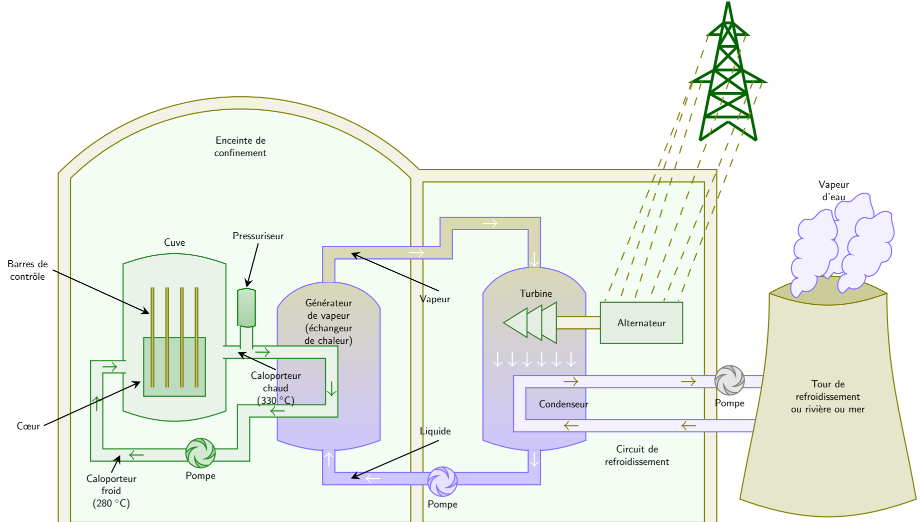
Frédéric COQUEL

CMAP

Ecole Polytechnique

Chaire MMSN, Journée de bilan

Motivations industrielles



Problématique générale

Enjeu : Simulation instationnaire des écoulements diphasiques eau-vapeur

Défis :

- ▷ phénomènes **multi-échelles** en temps et en espace.
- ▷ **Hiérarchie de modèles** physiques : *de la DNS aux modèles moyennés*.
- ▷ Ensemble fortement **hétérogène** de modèles mathématiques.

Longueurs caractéristiques en sureté nucléaire : *du micron au delà du mètre*

adapter l'effort de résolution en temps et en espace
à la taille des échelles caratéristiques

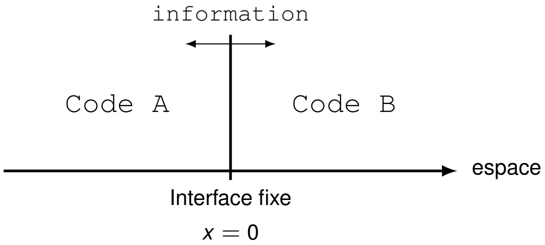
Problématique générale

**Décider localement du modèle le mieux adapté
et procéder au couplage en temps et en espace de
modèles distincts.**

Trois questions mathématiques complémentaires :

- **Modélisation adaptative** : choix du meilleur modèle localement en temps et en espace, pour un raffinement en maillage fixé.
- **Couplage multi-échelles** : coupler des modèles différents au travers d'interfaces minces ou de zones de recouvrement.
- **Hiérarchisation mathématique des modèles de thermohydraulique**. Critères de promotion d'un modèle. Définition des conditions de couplage.

Couplage de codes :



Quelle information transmettre ?

- Conservation de certaines quantités physiques
- Continuité de certaines variables pertinentes
- Définition des états « stationnaires » du problème

COUPLAGES CONSERVATIF ET NON-CONSERVATIF

Inconnue $w \in \mathbb{R}^N$

$$\begin{cases} \partial_t w + \partial_x f_-(w) = 0, & x < 0,\ t > 0, \\ \partial_t w + \partial_x f_+(w) = 0, & x > 0,\ t > 0. \end{cases}$$

Couplage par flux

$$f_-(w(0^-, t)) = f_+(w(0^+, t)), \quad t > 0.$$

AUDUSSE, PERTHAME, SEGUIN, VOVELLE, TOWERS, KARLSEN, RISEBRO

Couplage conservatif à flux discontinu

Conditions entropiques à l'interface

Couplage par état

$$w(0^-, t) = w(0^+, t), \quad t > 0.$$

ou plus généralement

$$\theta_-(w(0^-, t)) = \theta_+(w(0^+, t)), \quad t > 0.$$

$\theta_\pm$ changements de variable.

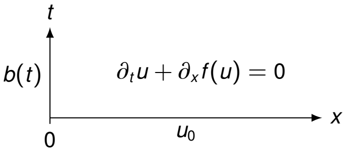
GODLEWSKI, RAVIART

Pas de critère entropique naturel à l'interface ($\Rightarrow$ besoin d'un retour au niveau microscopique)

Difficulté : Les approches sont généralement incompatibles !

Exemple du couplage de deux Euler (lois de pressions distinctes) formulé en $w = (\rho, u, p) \Rightarrow$ continuité de u et p, conservation de ρ et ρu, mais ρe n'est pas conservée

Demi-problème de RIEMANN (DUBOIS & LEFLOCH, 1988)



Condition de bord : $u(0^+, t) = b(t)$.

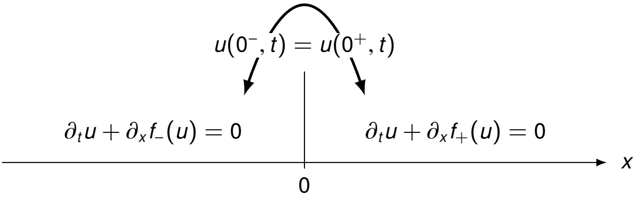
Forme affaiblie :

$$u(0^+, t) \in \mathcal{O}(b(t)), \text{ où}$$

$$\mathcal{O}(b(t)) = \{\mathcal{W}(0^+, b(t), \tilde{u}), \tilde{u} \in \Omega\}$$

$\rightarrow$Problème bien posé.

Recollement de deux demi-problèmes de RIEMANN (GODLEWSKI & RAVIART, 2004)



$$\begin{cases} u(0^-, t) \in \mathcal{O}_-(u(0^+, t)), \\ u(0^+, t) \in \mathcal{O}_+(u(0^-, t)). \end{cases}$$

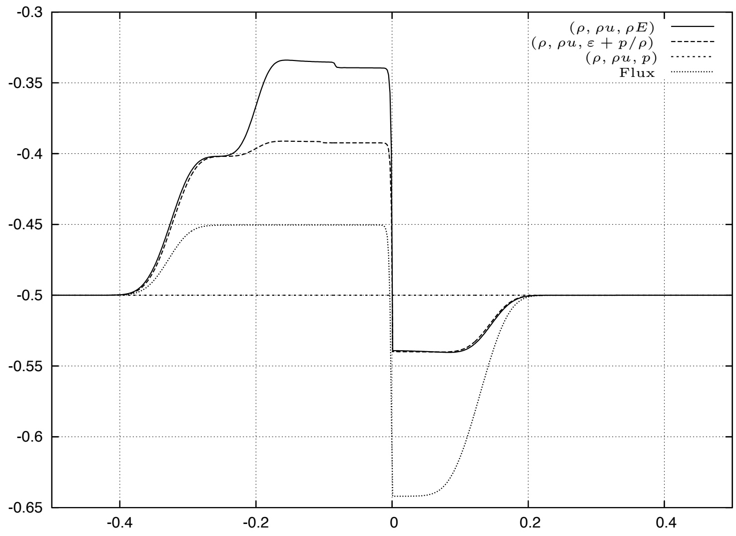


Figure 2: Velocity u with the different coupling methods.

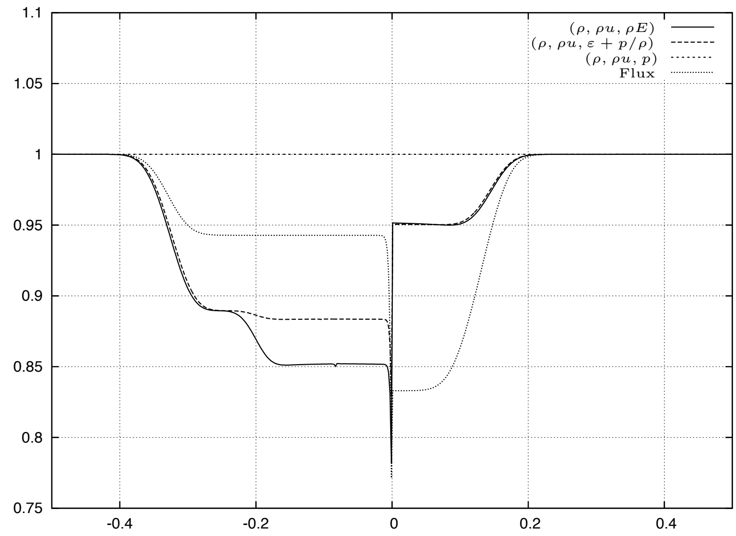
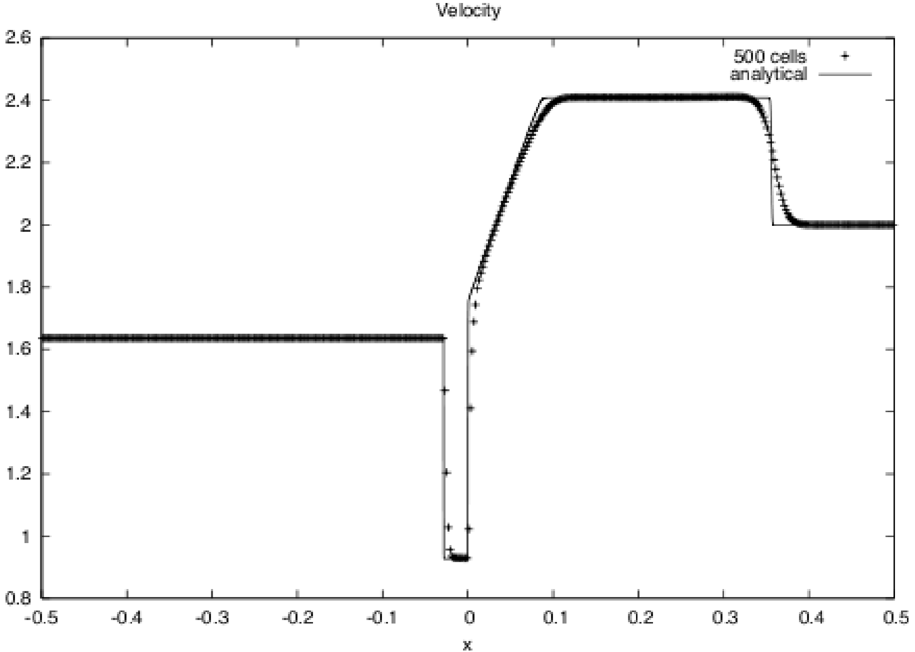
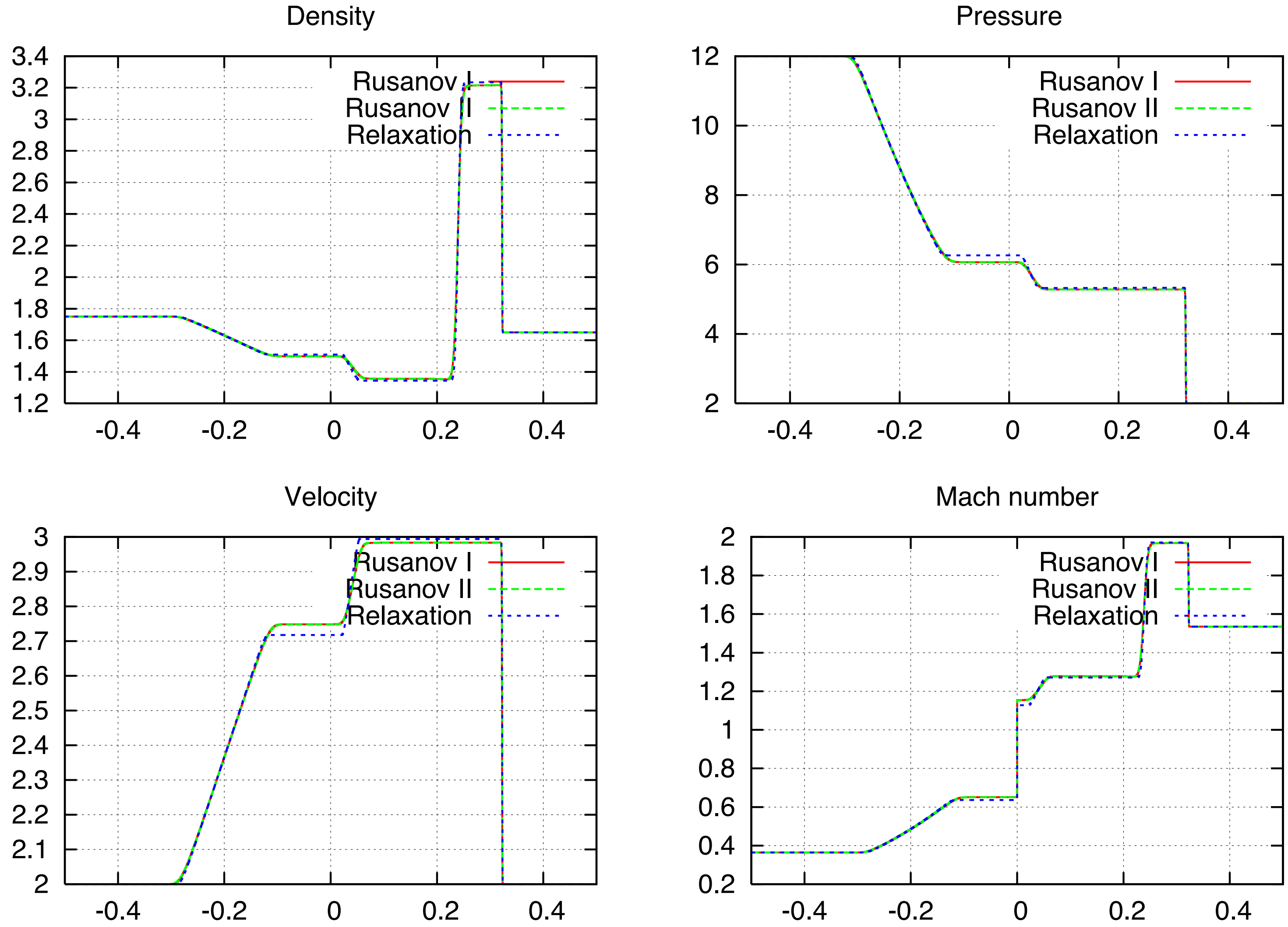


Figure 3: Pressure p with the different coupling methods.


Velocity
500 cells
analytical
2.6
2.4
2.2
2
1.8
1.6
1.4
1.2
1
0.8
-0.5
-0.4
-0.3
-0.2
-0.1
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
x

Numerical tests with multiple solutions



DÉMARCHE PROPOSÉE

Nous proposons d'ajouter au modèle de couplage une « **structure d'interface** »

1. **suffisamment enrichissante** pour assurer un problème global mathématiquement bien posé/mieux posé.
2. **suffisamment souple** pour envisager de prendre en compte a posteriori des considérations physiques discriminantes (dissipation d'entropie à l'interface, relation cinétique)
3. implémentable numériquement

Deux travaux complémentaires dans cette voie :

- Modèle d'interface mince et analyse de la résonance
  retour à une régularisation parabolique du problème en considération.
- Modèle d'interface épaisse (zone tampon) et mise en œuvre numérique

FORMULATION AUGMENTÉE DU COUPLAGE

Inconnue $u \in \mathbb{R}^N$, traité ici pour une transmission en u

$$u(0^-,t) = u(0^+,t)$$

$$\partial_t u + \partial_x f_-(u) = 0 \qquad \Big| \qquad \partial_t u + \partial_x f_+(u) = 0$$

0

Système augmenté

$$\begin{cases} \partial_t u + A_1(u,v)\partial_x u = 0, \\ \partial_t v = 0, \end{cases} \qquad x \in \mathbb{R}, t \geq 0.$$

Fonction de couleur :

$$v(x,0) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ -1, & x < 0. \end{cases}$$

exemple :

$$A_1(u,v) = \frac{1-v}{2}\nabla f_-(u) + \frac{1+v}{2}\nabla f_+(u),\ \mathbb{R}-\text{diagonalisable.}$$

Propriétés :

Système global hyperbolique non-conservatif,

Système en u de taille N strictement hyperbolique

Système en (u,v) de taille $N+1$: perte d'hyperbolicité

$\lambda = 0$ est valeur propre multiple si $A_1(u,v)$ n'est pas inversible

(Manifestation de la résonance à l'interface).

Hors de la résonance, les composantes de u sont des invariants de RIEMANN pour les ondes de vitesse nulle.

Régularisation parabolique de DAFERMOS : étude des solutions autosemblables en temps grand

Système augmenté régularisé

$$\partial_t u^\epsilon + A_1(u^\epsilon, v^\epsilon)\partial_x u^\epsilon = \epsilon t\, \partial_x\Big(B_0(u^\epsilon, v^\epsilon)\partial_x u^\epsilon\Big),$$
$$\partial_t v^\epsilon = \epsilon^2 t\, \partial_{xx} v^\epsilon.$$

Théorème d'existence (BOUTIN, COQUEL, LEFLOCH)

Sous des hypothèses de proximité des données, le problème de RIEMANN pour ce système admet une solution u^ϵ, qui converge simplement vers u à variation bornée, autosemblable, solution entropique (sur chaque demi-espace) de

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x f_-(u) = 0, & x < 0,\ t > 0, \\ \partial_t u + \partial_x f_+(u) = 0, & x > 0,\ t > 0. \end{cases}$$

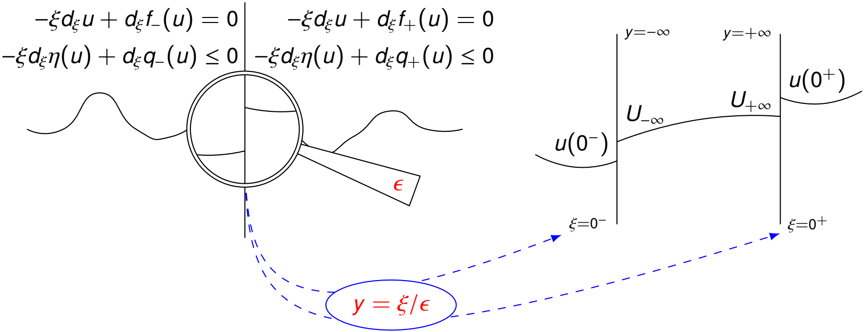
Cas système $u \in \mathbb{R}^N$, pour des couplages généraux $\theta_\pm$ suffisamment proches.

Principe de démonstration : Théorème de point fixe

- Représentation de la solution sur une base héritée de l'hyperbolicité du système en u
- Contrôle des coefficients d'interactions entre les ondes élémentaires qui constituent la solution
- Contrôle des coefficients d' interactions avec l'onde résonnante

Qu'en est-il des traces à l'interface ?

Renormalisation à l'interface



Principe de renormalisation de la solution révélant la structure à l'interface.

$$U^\epsilon(y) = u^\epsilon(\epsilon y) \text{ et } V^\epsilon(y) = v^\epsilon(\epsilon y).$$

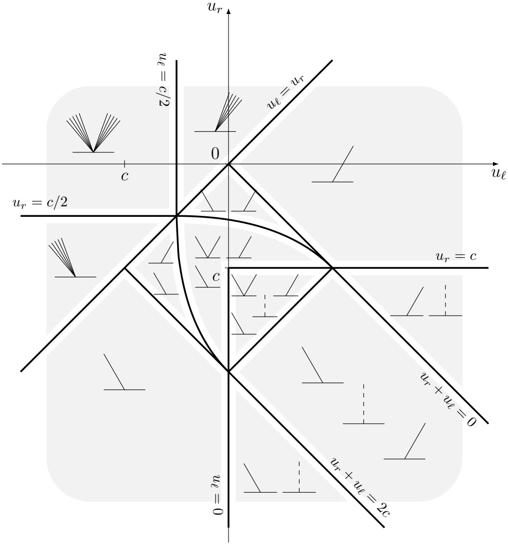
$f_L(u) = u^2/2$
$f_R(u) = (u - c)^2/2$ avec $c = -1$

Remarques :

Non-unicité dans certains domaines

Les solutions à deux ondes ont un état intermédiaire bien déterminé (après analyse complémentaire par une méthode de Laplace).

Au plus 4 solutions

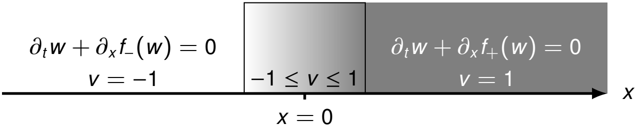


Conclusion :

L'approche visqueuse a sélectionné certaines solutions parmi toutes celles satisfaisant à la condition de couplage.

Pourquoi plusieurs solutions ?
Interprétation du problème de Riemann
Cas résonnants.

Modèle d'interface épaisse



Le couplage par état $\theta_-(w(0^-, t)) = \theta_+(w(0^+, t))$
est ici restitué sous la forme
"les états à u constant sont stationnaires", où

$$u = C_0(w, v), \quad C_0(w, \pm 1) = \theta_\pm(w),$$

Modèle d'interface épaisse

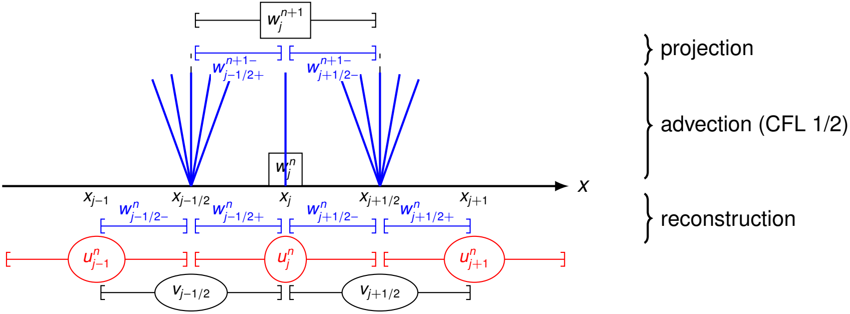
$$\partial_t w + \partial_x f(w, v) = \partial_v f(w, v) \partial_x v. \qquad (1)$$

Théorème à la Kružkov non-homogène avec terme source lipschitzien

Soit une à de CAUCHY $w_0 \in L^1(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R})$ et $v \in W^{2,\infty}(\mathbb{R})$, alors

$\exists! w \in L^\infty(\mathbb{R}_+, L^1(\mathbb{R}) \cap L^\infty(\mathbb{R}))$ solution « entropique » de (1).

$\partial_t w + \partial_x h(w,x) = S(w,x)$



Reconstruction :

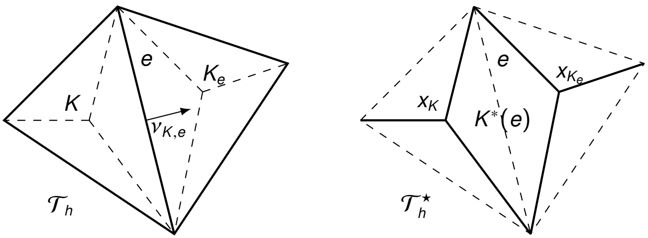
$$u_j^n \text{ solution de } w_j^n = \frac{1}{2}\Big(\overbrace{C_0(u_j^n, v_{j-1/2})}^{w_{j-1/2+}^n :=} + \overbrace{C_0(u_j^n, v_{j+1/2})}^{w_{j+1/2-}^n :=}\Big)$$

Evolution en temps et projection :

$$w_j^{n+1} = w_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(H_{j+1/2}^n - H_{j-1/2}^n\right) - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(h(w_{j-1/2+}^n, v_{j-1/2}) - h(w_{j+1/2-}^n, v_{j+1/2})\right)$$

Extension du schéma au cas multiD :

$L+1$ domaines (géométrie, flux, fonction de couplage) de $\mathbb{R}^d$
Fonction couleur vectorielle : $v(x) \in \mathbb{R}^L$
Possible recouvrement des domaines
Étape de reconstruction effectuée via un maillage « dual » $\mathcal{T}_h^\star$
Hypothèse de non-dégénérescence du maillage.

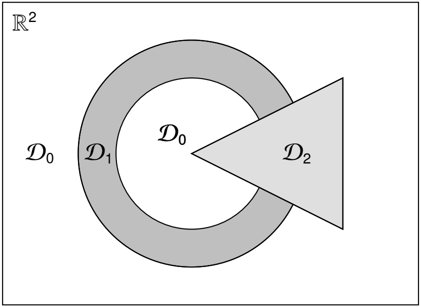


Théorème de convergence du schéma multiD (Boutin, Coquel, LeFloch)

La solution numérique converge vers l'unique solution Kružkov de

$$\partial_t w + \partial_x h(w,x) = S(w,x).$$

Configuration géométrique :



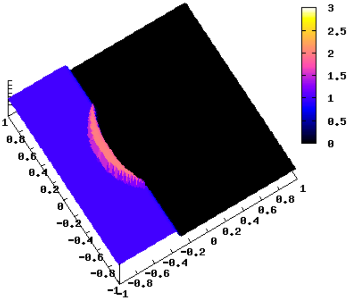
$$\partial_t w + \partial_x f_i(w) = 0, \quad x \in \mathcal{D}_i, \ i = 0, 1, 2.$$

$$f_0(w) = w^2/2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \theta_0(w) = w,$$

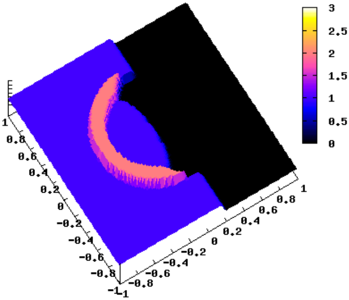
$$f_1(w) = w^2/2 \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \theta_1(w) = w/2,$$

$$f_2(w) = w^2/2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \theta_2(w) = w/3.$$

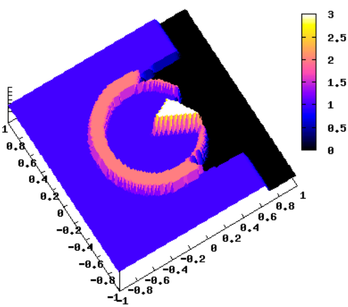
$$\theta_i(w(x^i, t)) = \theta_j(w(x^j, t)), \qquad i \neq j.$$



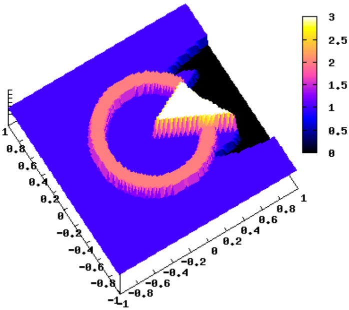
(a) Solution w at $t = 1.0$



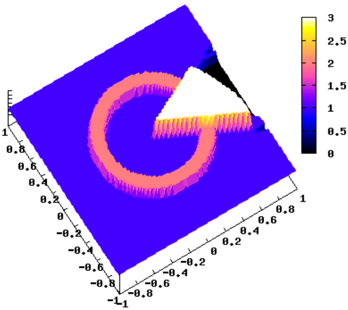
(b) Solution w at $t = 2.0$



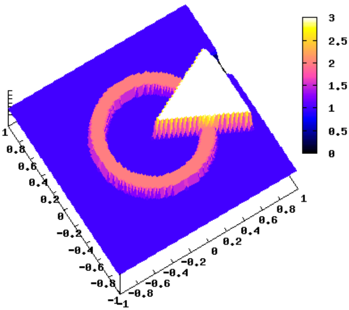
(c) Solution w at $t = 3.0$



(d) Solution w at $t = 4.0$



(e) Solution w at $t = 5.0$



(f) Solution w at $t = 6.0$

Figure 6: Three domains - evolution of the solution w.

Nouveaux Challenges Mathématiques et Numériques

- Modélisation adaptative : construction d'indicateurs d'erreurs locaux, issus d'une analyse *a posteriori*, équilibrant erreur de discrétisation et erreur de modélisation.
  - Couplage de codes : adaptation instationnaire de l'emplacement de l'interface.
  - Sélection locale en temps et en espace du meilleur couple modèle-maillage.

CEMRACS 2011
Couplage Multiéchelle de modèles complexes,
18 Juillet-26 Aout 2011, CIRM, Luminy

Organisateurs : FC (CMAP), Frédéric Lagoutière (Orsay), Philippe Helluy (Strasbourg), Christian Rohde (Stuttgart), Nicolas Seguin (P6)

Une problématique mathématique et numérique récente

- Ensemble de questions mathématiques et numériques explorées dans d'autres domaines de la Physique depuis une décénnie aux USA et en Europe (exemple : modélisation nano-macro).

- Contexte des systèmes hyperboliques plus récent : **impulsion du projet NEPTUNE** (CEA, EDF, AREVA-NP et IRSN).

Diversité des challenges :

- **Couplage instationnaire de codes existants** : interfaces de couplage fixes et infiniment minces (approche non intrusive).
- **Modélisation adaptative et couplage de modèles** : sélection dynamique de modèles, interfaces de couplage instationnaires minces ou épaisses.
- **Couplage volumique micro-macro** : construction dynamique (ou en pré-processeur) des lois de fermeture.