Méthodes de décomposition de domaine espace-temps

Paul-Marie Berthe
CEA Saclay, Université Paris 13

Directeur de thèse : Pascal Omnes (CEA Saclay, Université Paris 13)

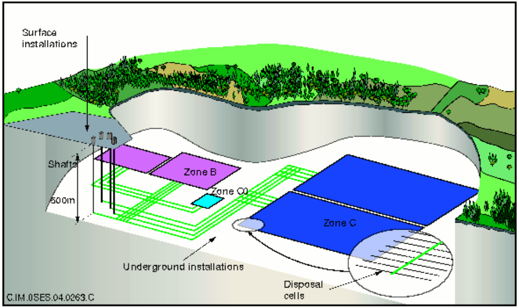
Encadrant : Caroline Japhet (Université Paris 13)

Congrès SMAI
27 mai 2011

Sommaire

Contexte

Stockage en milieu géologique pour les déchets à vie longue (haute activité)



Structure d'un stockage de déchets nucléaires en milieu géologique profond (source : Andra)

3 fonctions :

- limiter le relâchement des éléments radioactifs
- retarder le temps de migration
- empêcher la circulation d'eau

assurées par différentes barrières : colis, scellement, couche géologique profonde peu perméable

Objectif : Mieux comprendre l'évolution des colis de déchets en situation de stockage au cours du temps et la migration des radionucléides dans la géosphère

Modélisation - Contraintes

- Modélisation du transport des radionucléides en milieu poreux

  → Equation de convection-diffusion-réaction :

  $$\mathcal{L}u = \omega \partial_t u + \nabla \cdot (\mathbf{b}u) - \nabla \cdot (\boldsymbol{\nu} \nabla u) + cu = f$$

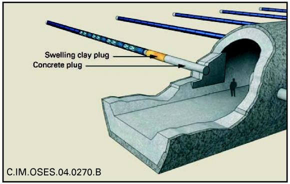
- Prise en compte des propriétés des couches géologiques fortement hétérogènes

  → Porosité ω discontinue

  → Diffusion $\boldsymbol{\nu}$ anisotrope et discontinue

- Prise en compte des échelles multiples

  → En espace et en temps

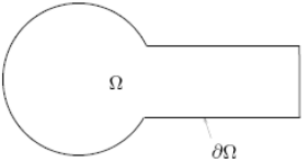


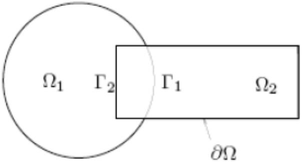
(Source : Andra)

⇒ raffinement de maillage espace-temps, couplage de modèles

Solution : Décomposition de domaines

L'algorithme de Schwarz (1870)





$$\left\{\begin{array}{lll} \mathcal{L}u_1^{(k+1)} = f & \text{dans} & \Omega_1 \times (0,T) \\ u_1^{(k+1)}(.,0) = u_0 & \text{dans} & \Omega_1 \\ u_1^{(k+1)} = u_2^{(k)} & \text{sur} & \Gamma_1 \end{array}\right. \qquad \left\{\begin{array}{lll} \mathcal{L}u_2^{(k+1)} = f & \text{dans} & \Omega_2 \times (0,T) \\ u_2^{(k+1)}(.,0) = u_0 & \text{dans} & \Omega_2 \\ u_2^{(k+1)} = u_1^{(k)} & \text{sur} & \Gamma_2 \end{array}\right.$$

$\longrightarrow$ l'algorithme ne converge pas sans recouvrement

$\longrightarrow$ Sans recouvrement : $\mathcal{B}_1 u_1^{(k+1)} = \mathcal{B}_1 u_2^{(k)}$ et $\mathcal{B}_2 u_2^{(k+1)} = \mathcal{B}_2 u_1^{(k)}$

La méthode - Généralités

Equation du transport des radionucléides sur $\Omega = \cup \Omega_i$ pour 2 sous-domaines (sans recouvrement)

$$\begin{cases} \mathcal{L} u_1^{(k+1)} = f & \text{dans} \quad \Omega_1 \times (0,T) \\ u_1^{(k+1)}(.,0) = u_0 & \text{dans} \quad \Omega_1 \\ \mathcal{B}_1 u_1^{(k+1)} = \mathcal{B}_1 u_2^{(k)} & \text{sur} \quad \Gamma \end{cases} \qquad \begin{cases} \mathcal{L} u_2^{(k+1)} = f & \text{dans} \quad \Omega_2 \times (0,T) \\ u_2^{(k+1)}(.,0) = u_0 & \text{dans} \quad \Omega_2 \\ \mathcal{B}_2 u_2^{(k+1)} = \mathcal{B}_2 u_1^{(k)} & \text{sur} \quad \Gamma \end{cases}$$

où $\mathcal{B}_i$ sont les opérateurs de transmission

Discrétisation :

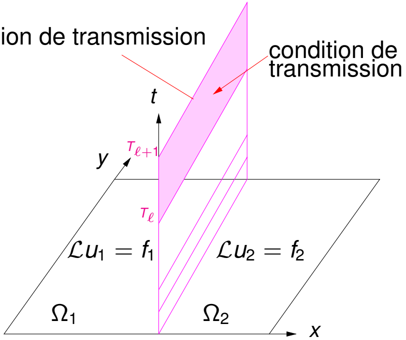
- en temps : Galerkin discontinu P0 ou P1

Discontinuous Galerkin and non conforming in time optimized Schwarz waveform relaxation for heterogeneous problems (Halpern, Japhet, 2005)

- en espace : Volumes finis avec terme de convection centré ou décentré

Décomposition de domaine :

- Méthodes de Schwarz optimisées



(schéma d'après C. Japhet)

Méthode

Méthodes de Schwarz optimisées

- Conditions de transmission physiques :

$$u_1 = u_2 \qquad \text{et} \qquad \nu_1 \frac{\partial u_1}{\partial n} = \nu_2 \frac{\partial u_2}{\partial n} \qquad \text{sur } \Gamma$$

- Conditions de transmission dans l'algorithme de Schwarz :

A SWR Method for Advection-Diffusion-Reaction Problems with discontinuous coefficients and non-matching grids (Gander, Halpern, Kern, Proceedings, DD17 (2005))

$$\mathcal{B}_1(u_1^{k+1}) = \mathcal{B}_1(u_2^k) \qquad \text{et} \qquad \mathcal{B}_2(u_2^{k+1}) = \mathcal{B}_2(u_1^k) \qquad \text{sur } \Gamma$$

avec :

$$\begin{cases} \mathcal{B}_1 = \nu_1 \dfrac{\partial}{\partial n} - \mathbf{b} \cdot n + \mathcal{S}_2 \\ \mathcal{B}_2 = \nu_2 \dfrac{\partial}{\partial n} - \mathbf{b} \cdot n + \mathcal{S}_1 \end{cases}$$

Comment choisir $\mathcal{S}_j$ pour optimiser la vitesse de convergence de l'algorithme ?

→ Outil : Transformée de Fourier en temps
(et en espace le long de l'interface en 2D et 3D)

Méthode

Méthode de Schwarz (appliqué à notre problème 1D)

- Transformée de Fourier à partir de l'EDP continue

$$\omega_j ik\widehat{e_j^k} - \nu_j \partial^2_{xx}\widehat{e_j^k} + b\partial_x \widehat{e_j^k}\partial x + c\widehat{e_j^k} = 0 \qquad \text{où } e_j^k = W_{|\Omega_j} - u_j^k$$

- Taux de convergence

$$\rho = \frac{\nu_2 r_2^- - b + s_1}{\nu_1 r_1^+ - b + s_1} \cdot \frac{-\nu_1 r_1^+ + b + s_2}{-\nu_2 r_2^- + b + s_2}$$

$$\text{où } r_1^+ = \frac{b + \sqrt{d_1}}{2\nu_1} \qquad r_2^- = \frac{b - \sqrt{d_2}}{2\nu_2} \qquad d_j = b^2 + 4\nu_j(ik\omega_j + c)$$

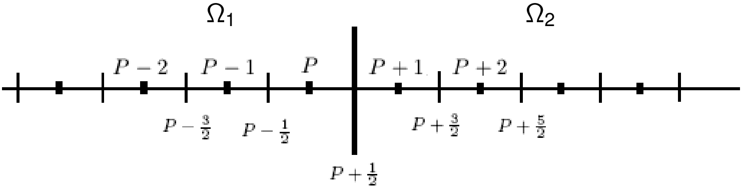
- Symboles d'opérateurs exacts

$$s_1 = \frac{b + \sqrt{d_2}}{2} \qquad s_2 = \frac{\sqrt{d_1} - b}{2}$$

Inconvénient : s_1 et s_2 sont des symboles d'opérateurs non-locaux

$\rightarrow$ Approximation par $\widetilde{s_1} = \alpha_1 + ik\beta_1$ et $\widetilde{s_2} = \alpha_2 + ik\beta_2$

Ainsi : $\mathcal{B}_j = \nu_j \dfrac{\partial}{\partial n} - b \cdot n + \alpha_i + \beta_i \dfrac{\partial}{\partial t}$



- Schéma sur une maille *i* (point intérieur) :

$$\omega_i \frac{\Delta x_i}{(\Delta t)_n}\left(U_{0i}^{n} - U_{0i}^{n-1}\right) + b\left(U_{0}{}_{i+\frac{1}{2}}^{n} - U_{0}{}_{i-\frac{1}{2}}^{n}\right) - (\nu\nabla U_0)_{i+\frac{1}{2}}^{n} + (\nu\nabla U_0)_{i-\frac{1}{2}}^{n} + c\Delta x_i U_{0i}^{n} - \Delta x_i f_{0i}^{n} = 0 \quad (1)$$

- avec $(\nu\nabla U_0)_{i+\frac{1}{2}} = 2\nu_i \frac{U_{0\,i+\frac{1}{2}} - U_{0\,i}}{\Delta x_i} = 2\nu_{i+1}\frac{U_{0\,i+1} - U_{0\,i+\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i+1}}$

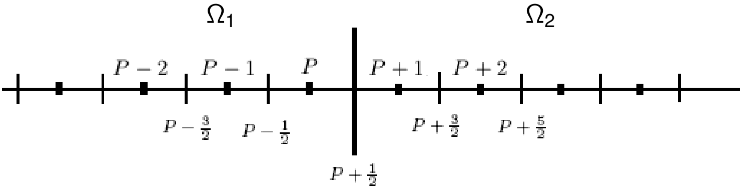
d'où $(\nu\nabla U_0)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{2\nu_i\nu_{i+1}(U_{0\,i+1} - U_{0\,i})}{\nu_i\Delta x_{i+1} + \nu_{i+1}\Delta x_i}$

- Terme de convection :

$$U_{0\,i+\frac{1}{2}} = \frac{\nu_i \Delta x_{i+1}}{\nu_i\Delta x_{i+1} + \nu_{i+1}\Delta x_i} U_{0\,i} + \frac{\nu_{i+1}\Delta x_i}{\nu_i\Delta x_{i+1} + \nu_{i+1}\Delta x_i} U_{0\,i+1} \quad \text{dans le cas centré}$$

$$U_{0\,i+\frac{1}{2}} = U_{0\,i} \qquad (si\ b > 0) \qquad \text{dans le cas décentré}$$

Notre problème en 1D



- A l'interface, en $\{x_{P+1/2}\}$, discrétisation des conditions de transmission :

$$2\nu_P \frac{{U_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k+1)} - {U_0}^{n}_{P}{}^{(k+1)}}{\Delta x_P} - b{U_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k+1)} + \alpha_2 {U_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k+1)}$$
$$= 2\nu_{P+1} \frac{{V_0}^{n}_{P+1}{}^{(k)} - {V_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k)}}{\Delta x_{P+1}} - b{V_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k)} + \alpha_2 {V_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k)}$$

$$-2\nu_{P+1} \frac{{V_0}^{n}_{P+1}{}^{(k+1)} - {V_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k+1)}}{\Delta x_{P+1}} + b{V_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k+1)} + \alpha_1 {V_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k+1)}$$
$$= -2\nu_P \frac{{U_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k)} - {U_0}^{n}_{P}{}^{(k)}}{\Delta x_P} + b{U_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k)} + \alpha_1 {U_0}^{n}_{P+\frac{1}{2}}{}^{(k)}$$

Notre problème en 1D

Du schéma monodomaine au schéma multi-domaine

- Schéma multidomaine centré sur la maille *P*

reprendre l'équation (1) (avec l'indice (k) de l'itération de l'algorithme de Schwarz)

$$\begin{aligned}
&U_{0\,P}^{n\,(k)}\left[\omega_P \frac{\Delta x_P}{(\Delta t)_n} - b\frac{\nu_P \Delta x_{P-1}}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P \Delta x_{P-1}} + \frac{2\nu_P}{\Delta x_P} + \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P \Delta x_{P-1}} + c\Delta x_P\right] \\
&+ U_{0\,P-1}^{n\,(k)}\left[-b\frac{\nu_{P-1}\Delta x_P}{\nu_{P-1}\Delta x_P + \nu_P\Delta x_{P-1}} - \frac{2\nu_{P-1}\nu_P}{\nu_{-1}\Delta x_P + \nu_P \Delta x_{P-1}}\right] \\
&= \omega_P \frac{\Delta x_P}{(\Delta t)_n} U_{0\,P}^{n-1\,(k)} - \left(b - \frac{2\nu_P}{\Delta x_P}\right) U_{0\,P+1/2}^{n\,(k)} + \Delta x_P f_{0\,P}^{n}
\end{aligned}$$

lorsque l'algorithme de Schwarz converge, on retrouve le schéma monodomaine à partir du schéma multidomaine en utilisant la condition de transmission à convergence :

$$\overline{U_0}_{P+\frac{1}{2}} = \frac{\nu_P \Delta x_{P+1}\overline{U_0}_P + \nu_{P+1}\Delta x_P \overline{V_0}_{P+1}}{\nu_P \Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P}$$

Notre problème en 1D

Du schéma monodomaine au schéma multi-domaine

- Schéma multidomaine décentré

- Maille en amont de l'interface :

Les termes de convection ne posent pas de difficultés
Les termes de diffusion se traitent comme dans le cas centré

- Maille en aval de l'interface :

$$\frac{\Delta x_{P+1}}{(\Delta t)_n}\left({V_0}_{P+1}^{n\ (k)} - {V_0}_{P+1}^{n-1\,(k)}\right) + b\left({V_0}_{P+1}^{n\ (k)} - \tilde{V}_{0\,P+\frac{1}{2}}^{n\ (k)}\right) - \frac{2\nu_{P+1}\nu_{P+2}\left({V_0}_{P+2}^{n\ (k)} - {V_0}_{P+1}^{n\ (k)}\right)}{\nu_{P+1}\Delta x_{P+2} + \nu_{P+2}\Delta x_{P+1}}$$
$$+2\nu_{P+1}\frac{{V_0}_{P+1}^{n\ (k)} - {V_0}_{P+\frac{1}{2}}^{n\ (k)}}{\Delta x_{P+1}} + c\Delta x_{P+1}{V_0}_{P+1}^{n\ (k)} - \Delta x_{P+1}{f_0}_{P+1}^{n} = 0$$

Comment déterminer $\tilde{V}_{0\,P+\frac{1}{2}}^{n\ (k)}$?

Utiliser la condition $\overline{U_0}_{P+\frac{1}{2}}^{n} = \dfrac{\nu_P\Delta x_{P+1}\overline{U_0}_P^n + \nu_{P+1}\Delta x_P\overline{V_0}_{P+1}^n}{\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P}$

D'où $$\tilde{V}_{0\,P+\frac{1}{2}}^{n\ (k)} = \begin{cases} \dfrac{(\nu_P\Delta x_{P+1} + \nu_{P+1}\Delta x_P){V_0}_{P+\frac{1}{2}}^{n\ (k)} - \nu_{P+1}\Delta x_P {V_0}_{P+1}^{n\ (k)}}{\nu_P\Delta x_{P+1}} & \text{Schéma d0} \\ {U_0}_P^{n\ (k-1)} \ (\text{i.e. } {U_0}_P^n \text{ transmis}) & \text{Schéma d1} \end{cases}$$

Notre problème en 1D

Prise en compte du schéma décentré dans l'optimisation des paramètres

- Adaptation dans le cas d'un schéma décentré

Schéma décentré $\Longleftrightarrow$ Schéma centré avec viscosité artificielle $\nu' = \nu + \frac{b\Delta x}{2}$

$\longrightarrow$ Symboles d'opérateurs exacts : $s_1 = \frac{\nu_2}{2\nu_2'}(b + \sqrt{d_2}) - b \qquad s_2 = b - \frac{\nu_1}{2\nu_1'}(b - \sqrt{d_1})$

- Optimisation à partir du taux de convergence discret

Transformée de Fourier discrète en temps : $u_i^n = \sum_k e^{ikn\Delta t}\hat{u}_i$

$\longrightarrow$ Récurrence à 3 termes de chaque côté de l'interface

$\longrightarrow$ Solution générale d'une EDO d'ordre 2

- Utilisation des conditions limites pour déterminer deux constantes
- Le taux de convergence dérive de la relation entre les deux autres constantes dans la condition de transmission

Schéma d0 :

$$\rho(\omega, \nu, b, c, \Delta_x, \Delta t, \alpha, \beta) = \frac{G^- C_2 + \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} r_1}{F^+ C_1 - \frac{2\nu_2}{\Delta x_2}} \cdot \frac{G^+ C_1 + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2}}{F^- C_2 - \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} r_1}$$

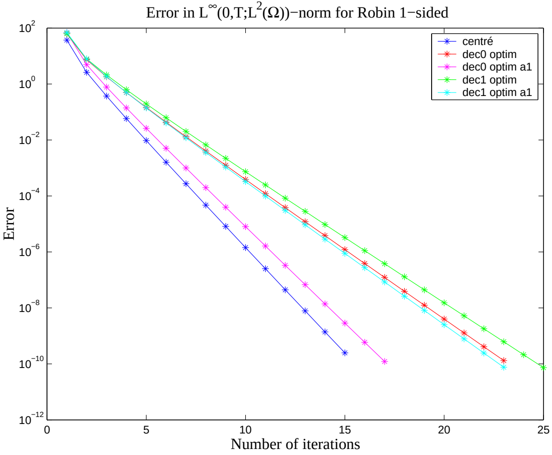
Schéma d1 :

$$\rho(\omega, \nu, b, c, \Delta_x, \Delta t, \alpha, \beta) = \frac{\left(F^+ + G^+\right) b r_1 + \left(G^- C_2 + \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} r_1\right)\left(G^+ C_3 + \frac{2\nu_2}{\Delta x_2}\right)}{\left(F^+ C_3 - \frac{2\nu_2}{\Delta x_2}\right) \cdot \left(F^- C_2 - \frac{2\nu_1}{\Delta x_1} r_1\right)}$$

Comparaison Centré - Décentré d0 - Décentré d1

- Coefficients constants
  - $\omega_1 = \omega_2 = 1$
  - $b = 1$
  - $\nu_1 = \nu_2 = 0.01$
  - $c = 0$

Maillage :
$\Delta x = \Delta t = 10^{-2}$



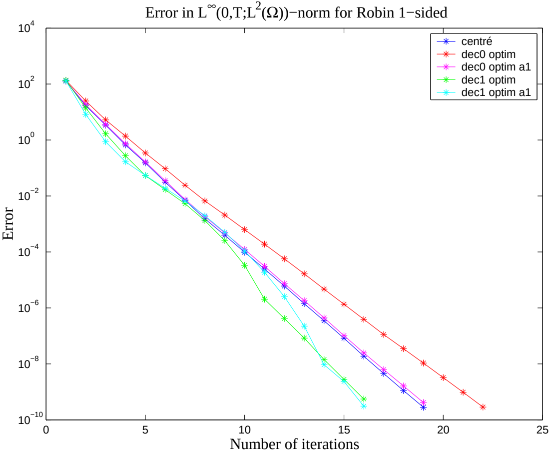
	c	d0	d0 a1	d1	d1 a1
nb it	15	23	17	25	23

Résultats

Comparaison Centré - Décentré d0 - Décentré d1

- Coefficients non constants
  - $\omega_1 = 0.06, \omega_2 = 1$
  - $b = 1$
  - $\nu_1 = 0.05, \nu_2 = 1$
  - $c = 0$

  Maillage :
  $\Delta x = \Delta t = 10^{-2}$



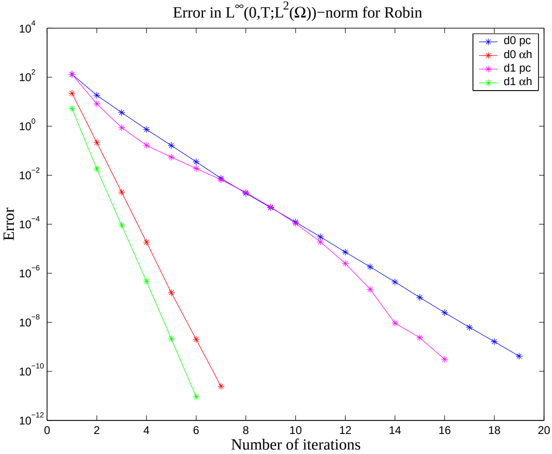
	c	d0	d0 a1	d1	d1 a1
nb it	19	22	19	16	16

Résultats

Comparaison optimisation avec taux de CV Continu - Discret

- Coefficients non constants
  - $\omega_1 = 0.06, \omega_2 = 1$
  - $b = 1$
  - $\nu_1 = 0.05, \nu_2 = 1$
  - $c = 0$

  Maillage :
  $\Delta x = \Delta t = 10^{-2}$



	d0 c	d0 h	d1 c	d1 h
nb it	19	7	16	6

Conclusion et perspectives

- Conclusions

Développement d'un code Matlab 1D monodomaine et multidomaine

avec des conditions optimisées à l'interface, soit à partir du taux de convergence continu, soit à partir du taux discret

Comparaison centré - décentré d0 et d1 :

- le schéma centré est en général le meilleur (en terme de vitesse de convergence)

- le schéma décentré d0 donne, dans la plupart des cas, des meilleurs résultats que d1

Comparaison optimisation avec le taux de CV continu ou discret :

amélioration plus ou moins nette selon les cas-tests

- Perspectives

Ecriture du schéma monodomaine en 2D à partir de schémas volumes finis à dualité discrète

Analyse et validations du code multi-domaine

Difficulté des coins pour les conditions d'ordre 2