

# Caractérisation dynamique des sensibilités de couplage multiphysiques, une méthodologie pour coupler et ordonner des solveurs partitionnés

Christopher Nahed

<sup>1</sup> Université Paris-Saclay, CEA, Service d'Etudes Mécaniques et Thermiques, 91191, Gif-sur-Yvette, France, christopher.nahed@cea.fr

**Résumé** — Les nombres adimensionnels, ne sont pas souvent utilisés dans le domaine de la modélisation multiphysiques, où les méthodes de couplage sont développées sans surveiller explicitement la sensibilité relative des termes de couplage, qui sont connus d'influencer l'ordonnance optimale de solveurs physique. Ici, nous proposons d'utiliser une méthodologie adimensionnelle appliquée aux systèmes multiphysiques afin d'estimer la sensibilité des termes de couplage. L'algorithme « *chicken-egg* » réordonne ainsi, à chaque pas de temps, la matrice jacobienne et ensuite les solveurs partitionnés, et démontre un gain en temps de calcul significatif.

**Mots clés** — couplage dynamique multiphysique, ordonnance des solveurs partitionnés, analyse dimensionnelle multiphysique, couplage partitionné serré.

## 1 Introduction

Ces dernières années, les différentes techniques proposées par la communauté multiphysique ont considérablement amélioré la simulation de systèmes complexes faisant intervenir diverses physiques couplées et des échelles spatiales/temporelles variées [1, 2]. De plus, l'utilisation de la simulation multiphysique en ingénierie n'a cessé de croître, principalement en raison de l'augmentation régulière des capacités de calcul offertes par les ordinateurs modernes. En réalité, l'intérêt croissant pour la simulation multiphysique se reflète dans la taille importante de la communauté, allant des experts en transferts thermiques conjugués [3, 4], aux spécialistes de l'interaction fluide-structure [5, 6], jusqu'aux interactions nucléaire-structure [7, 8, 9] (cette liste est loin d'être exhaustive). Cependant, et indépendamment de l'omniprésence de la simulation multiphysique dans l'ingénierie, des défis majeurs concernant le passage à l'échelle et la spécialisation des outils persistent aujourd'hui [1]. L'approche couramment employée pour mettre à l'échelle des simulations multiphysiques consiste à coupler de manière non intrusive et partitionnée des codes indépendants et spécifiques au problème, ce qui peut introduire des difficultés de stabilité, de précision et de robustesse [3, 5, 1]. En général, l'approche mathématique la plus cohérente et naturelle pour de tels problèmes serait d'effectuer un couplage serré et de résoudre monolithiquement l'ensemble des sous-problèmes du système multiphysique, afin de synchroniser et stabiliser parfaitement tous les termes de couplage [2]. Le terme « couplage serré » suit les définitions proposées par Felippa et al. [10] et reprises par Keyes et al. [1]. Cependant, cette approche devient rapidement irréalisable (ou tout simplement impraticable) pour les systèmes relativement grands, car elle évolue de manière quadratique avec l'augmentation du nombre d'inconnues physiques [8]. En outre, il est bien connu que les grands systèmes creux — typiques des schémas multiphysiques monolithiques [8, 1] — peuvent devenir mal conditionnés et donc difficiles à traiter par des solveurs linéaires itératifs [11]. Néanmoins, les schémas de couplage serrés restent particulièrement importants pour les systèmes multiphysiques fortement non linéaires, susceptibles de présenter des instabilités physiques ou des points de bifurcation, car ils nécessitent une prise en compte numérique précise de toutes les interactions de couplage [12, 13, 14]. Par conséquent, les limitations pratiques des approches monolithiques et l'importance des schémas serrés orientent la majorité des utilisateurs vers la conception de méthodes partitionnées spécifiques au problème, visant à améliorer la stabilité et la précision du couplage [8, 5, 4]. De plus, des efforts importants portent sur l'amélioration de la convergence des modules physiques individuels couplés au système multiphysique, notamment via des accélérateurs [15, 16] et/ou des techniques de relaxation dynamique

[17, 6]. Il convient de noter qu'un inconvénient possible des techniques d'accélération de convergence ou de relaxation est qu'elles proviennent souvent de méthodes itératives de résolution de systèmes linéaires, qui peuvent échouer complètement lorsqu'elles sont appliquées à des problèmes fortement non linéaires [18, 19].

En raison de l'impraticabilité des solveurs multiphysiques monolithiques, les approches de couplage serrés et partitionnées, synchronisées et accélérées sont généralement recommandées par les experts du domaine [2, 16, 8]. Cependant, l'importance du choix de la stratégie de partitionnement, bien que primordiale, demeure largement spécifique au problème [6, 17, 5, 3]. L'analyse menée par Huang et al. [2] montre explicitement que « l'ordonnement » des modules de physique prédicteurs est essentiel aux performances du schéma de couplage multiphysique. Pourtant, la question de « comment ordonner » les  $K$  modules physique de manière générique (qui vient en premier, la poule ou l'œuf?) reste peu explorée. Selon la revue approfondie des défis actuels menée par Keyes et al. [1], une « caractérisation dynamique de la force des interactions inter-physiques » constitue un problème important à résoudre aujourd'hui. Nous citons leur formulation :

*Though cross-coupling enters into performance efficiency considerations in subtle ways like arithmetic intensity, which may be better for a coupled system than for its components, making the coupling effectively “free” efficient multiphysics algorithms will preferably allocate the extra work of enforcing tight coupling only where the interaction is strong and will default to loose coupling where the interaction is weak, or sequential where it is unidirectional. Algorithmic selection, which may be dynamic over the duration of the computation, therefore requires dimensionless or relative measures of cross-variable sensitivities. Just as error estimators are required to inform adaptive discretizations, some measure of interaction strengths between the components is required to inform adaptive coupling tightness.*

Pour répondre au défi posé par Keyes et al. [1], nous développons une approche adimensionnelle capable de catégoriser dynamiquement les sensibilités de couplage au cours d'une simulation. Les définitions de couplage faible et fort peuvent être consultées dans [10] et dans le glossaire de [1]. L'algorithme que nous proposons, appelé « *chicken-egg* », prédit en utilisant la première perturbation l'ordonnement approximativement optimal à chaque pas de temps. Il réordonne automatiquement le système partitionné couplé et vise à réduire les itérations de synchronisation tout en garantissant un couplage serré. L'algorithme est testé pour la première fois sur un problème multiphysique thermo-hygro-corrosif issu d'une application de stockage de déchets radioactifs développée par De Lamare et l'Agence Nationale pour la Gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA) [20, 21]. L'algorithme permet d'améliorer le temps d'exécution en réduisant significativement le nombre total d'itérations des modules.

## 2 Méthodologie

Les détails complets de l'étude discuté dans cet abstract ont fait sujet d'un article scientifique dans la revue internationale de *Computers&Structures* par Nahed et al. [22]. Des travaux qui formalisent l'algorithme derrière la discussion faite dans [22] sont en cours de révision (dans une revue internationale) et feront l'objet d'un futur papier [23]. Par souci de concision, nous schématisons l'algorithme « *chicken-egg* » dans la figure 1. L'algorithme schématisé décrit de façon générique un couplage serré avec l'algorithme « *chicken-egg* » et démontre la capacité de choisir dynamiquement, donc au cours du temps, l'ordonnement des calculs physique ainsi que l'état de synchronisation des physiques fortement couplés. A chaque nouveau pas de temps  $n + 1$  les  $K$  physiques traitées de manière partitionnée peuvent être ordonnées de  $K!$  façon ; et donc dans le but de choisir le meilleur état ordonnancement parmi les  $K!$  états possibles une mesure adimensionnelle qui approxime la sensibilité du couplage est calculée et est utilisée pour réordonner les calculs physiques en ordre du plus faiblement sensible au plus fortement sensible aux variables primales issues des autres physiques<sup>1</sup>. De plus, la mesure adimensionnelle est utilisée pour vérifier si il est nécessaire d'effectuer des étapes de synchronisation entre certaines physiques qui sont identifiées d'être fortement couplées, ce qui garantit que l'algorithme assure un couplage serré uniquement entre les physiques (voir « *conditional field transfer* » dans la figure 1).

---

1. Les termes faiblement sensible et fortement sensible restent approximative dans un sens mathématique.

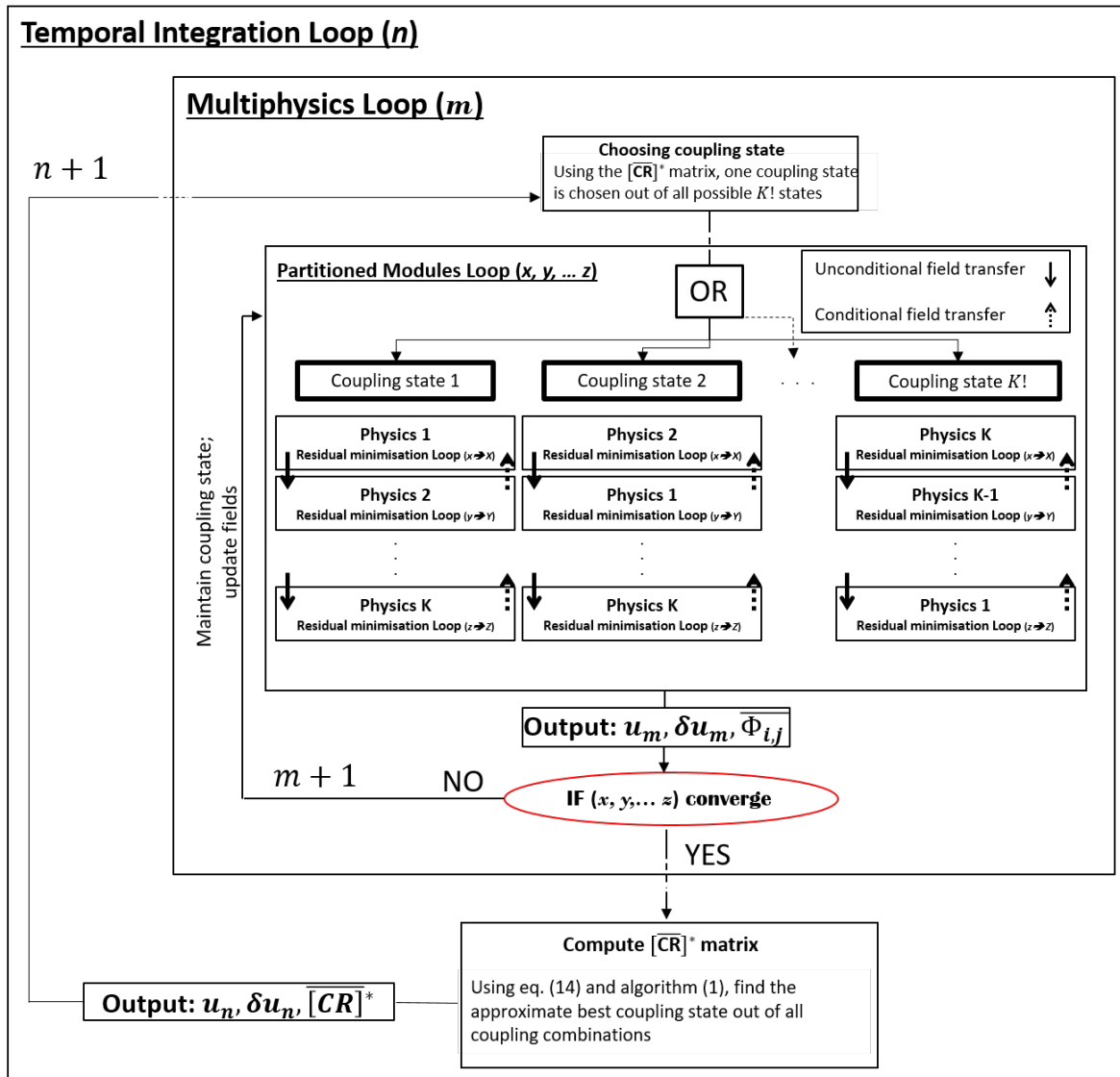


FIGURE 1 – Pour  $K$  équations physiques, les  $K!$  états de couplage possibles sont représentés et le  $[CR]^*$  calculé approxime le meilleur état de couplage à la fin de chaque pas de temps.

### 3 Conclusion

Cet article présente une réponse directe au défi posé par Keyes et al. [1], dans lequel il a été développé une mesure adimensionnelle et une méthodologie qui caractérisent de manière dynamique les sensibilités de couplage des solveurs/modules couplés dans une simulation multiphysique d'une manière mathématiquement cohérente (voir [22] pour les détails). Le préconditionnement et le réordonnancement sont basés sur une mesure adimensionnelle qui quantifie les sensibilités de couplage interphysiques. Nous testons pour la première fois notre algorithme « chicken-egg », qui pilote la caractérisation dynamique et le réordonnancement des solveurs, sur un problème thermo-hygro-corrosif et observons une réduction significative du nombre d'itérations nécessaires à la synchronisation des solveurs. Les performances de l'algorithme « chicken-egg » sont comparées à celles d'un algorithme de couplage classique diagonalisé et d'un algorithme de couplage monolithique. Grâce à cette comparaison, nous montrons que l'algorithme « chicken-egg » appartient à la classe des schémas de couplage serrés, malgré la réduction significative du nombre d'itérations de synchronisation entre les différents solveurs. La réduction du nombre d'itérations du module physique avant convergence à chaque pas de temps permet de réduire considérablement le temps d'exécution du programme. L'algorithme poule-œuf est 1,76 fois plus rapide que l'algorithme monolithique pour cette simulation multiphysique spécifique. Les auteurs appellent la communauté multiphysique à effectuer des tests supplémentaires.

## 4 Perspectives

Les perspectives suivantes sont prévues :

1. la formalisation de l’algèbre multiphysique derrière cette approche fait l’objet d’un article scientifique qui est en cours de révision dans une revue internationale [23];
2. une extension de cette approche vers des couplages explicites et la formalisation de l’algèbre multiphysique derrière est en cours d’étude;
3. l’utilisation des schémas d’accélération à l’intérieur de l’algorithme « *chicken-egg* » afin de minimiser le nombre d’itérations avant convergence pour chaque physique (uniquement en dehors des étapes de synchronisation) est en cours d’étude.

## Références

- [1] David E Keyes, Lois C McInnes, Carol Woodward, William Gropp, Eric Myra, Michael Pernice, John Bell, Jed Brown, Alain Clo, Jeffrey Connors, et al. Multiphysics simulations : Challenges and opportunities. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, 27(1) :4–83, 2013.
- [2] Daniel Z Huang, P-O Persson, and Matthew J Zahr. High-order, linearly stable, partitioned solvers for general multiphysics problems based on implicit–explicit runge–kutta schemes. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 346 :674–706, 2019.
- [3] Michael B Giles. Stability analysis of numerical interface conditions in fluid–structure thermal analysis. *International journal for numerical methods in fluids*, 25(4) :421–436, 1997.
- [4] Christopher Nahed. *Magneto-thermo-hydrodynamic modelling of TIG welding : a 3D unified coupling of the arc-plasma and the weld pool*. PhD thesis, Aix Marseille Université, 2021.
- [5] Paola Causin, Jean-Frédéric Gerbeau, and Fabio Nobile. Added-mass effect in the design of partitioned algorithms for fluid–structure problems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 194(42–44) :4506–4527, 2005.
- [6] Ulrich Küttler and Wolfgang A Wall. Vector extrapolation for strong coupling fluid-structure interaction solvers. 2009.
- [7] Cyril Patricot. *Couplages multi-physiques : évaluation des impacts méthodologiques lors de simulations de couplages neutronique/thermique/mécanique*. PhD thesis, Université Paris-Saclay (ComUE), 2016.
- [8] Louis Viot. *Couplage et synchronisation de modèles dans un code scénario d’accidents graves dans les réacteurs nucléaires*. PhD thesis, Université Paris Saclay (ComUE), 2018.
- [9] Alberto Facchini, Jaejin Lee, and Han Gyu Joo. Investigation of anderson acceleration in neutronics-thermal hydraulics coupled direct whole core calculation. *Annals of Nuclear Energy*, 153 :108042, 2021.
- [10] Carlos A Felippa, Kwang-Chun Park, and Charbel Farhat. Partitioned analysis of coupled mechanical systems. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 190(24–25) :3247–3270, 2001.
- [11] Yousef Saad. *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, 2003.
- [12] Christian Diddens and Duarte Rocha. Bifurcation tracking on moving meshes and with consideration of azimuthal symmetry breaking instabilities. *Journal of Computational Physics*, 518 :113306, 2024.
- [13] Ali H Nayfeh and Balakumar Balachandran. *Applied nonlinear dynamics : analytical, computational, and experimental methods*. John Wiley & Sons, 2008.
- [14] Jiří Náprstek. Combined analytical and numerical approaches in dynamic stability analyses of engineering systems. *Journal of Sound and Vibration*, 338 :2–41, 2015.
- [15] Isabelle Ramière and Thomas Helfer. Iterative residual-based vector methods to accelerate fixed point iterations. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(9) :2210–2226, 2015.
- [16] Claire Vaglio-Gaudard, Isabelle Ramière, and Nathalie Seiler. Overview of multiphysics r&d activities at the cea/iresne institute. *Annals of Nuclear Energy*, 192 :109957, 2023.
- [17] Ulrich Küttler and Wolfgang A Wall. Fixed-point fluid–structure interaction solvers with dynamic relaxation. *Computational mechanics*, 43(1) :61–72, 2008.
- [18] Qicang Shen, Sooyoung Choi, and Brendan Kochunas. A robust, relaxation-free multiphysics iteration scheme for cmfd-accelerated neutron transport k-eigenvalue calculations—ii : Numerical results. *Nuclear Science and Engineering*, 195(11) :1202–1235, 2021.
- [19] Brendan Kochunas, Andrew Fitzgerald, and Edward Larsen. Fourier analysis of iteration schemes for k-eigenvalue transport problems with flux-dependent cross sections. *Journal of Computational Physics*, 345 :294–307, 2017.

- [20] J. de LAMARE. Modélisation de la corrosion atmosphérique : condensation de la vapeur d'eau contenue dans l'air ambiant - Synthèse de l'action CORRAT 2016 : modèle de corrosion atmosphérique en micro-tunnel HA - Bilan Action CORRAT 2017 - Modèle CORRAT étendu. Technical report, CEA, 2014 - 2016 - 2017 - 2020.
- [21] Site de l'ANDRA. <https://www.andra.fr>.
- [22] Christopher Nahed and Jacques de Lamare. Dynamic characterization of cross-physics coupling strengths, a methodology to coupling and reordering partitioned solvers for multiphysics applications. *Computers & Structures*, 307 :107615, 2025.
- [23] Christopher Nahed and Pascal Omnes. Dimensional analysis of multiphysics algebra. *under review*.