

Réduction de modèle pour la dynamique des aérosols

Oscar Jacquot[†], Virginie Ehrlacher[‡], Tony Lelièvre[‡], Karine Sartelet[†]

[†] CEREAs, École des Ponts ParisTech and EDF R&D, Marne-la-Vallée, France

[‡] CERMICS, École des Ponts ParisTech, Marne-la-Vallée, France

Coagulation

Processus associé à la collision de deux particules pour former une nouvelle particule plus volumineuse.

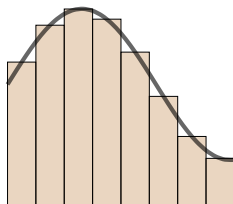
Systèmes physiques :

- Aérosols [Debry and Sportisse, 2007]
- Gouttes de pluies [Cueille and Sire, 1998]
- Polymérisation en milieu colloïdal
- Accrétion de protoplanètes [Lombart and Laibe, 2021]

Coagulation

Equation de Smoluchowski: [Smoluchowski, 1916]

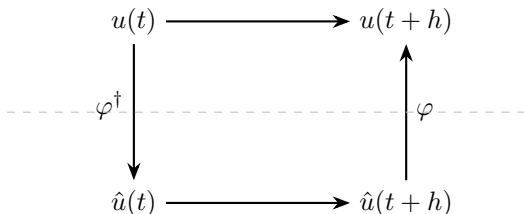
$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = \frac{1}{2} \int_0^x K(y, x-y) u(y, t) u(x-y, t) dy - u(x, t) \int_0^\infty K(x, y) u(y, t) dy$$



- Approche sectionnelle : méthode privilégiée en dynamique des aérosols [Debry and Sportisse, 2007]
- La non-localité accroît significativement le coût de calcul avec l'augmentation de la résolution

Modèle réduit

- Peut-on construire une représentation de **faible dimension** qui conserve un maximum de précision ?

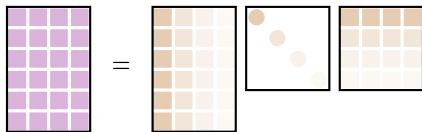


On cherche $\varphi \in \mathbb{R}^{n \times r}$ une base d'un sous-espace vectoriel de dimension r .

Base réduite

Approximation de rang faible :

- SVD [Eckart and Young, 1936]



- NMF [Lee and Seung, 2000]

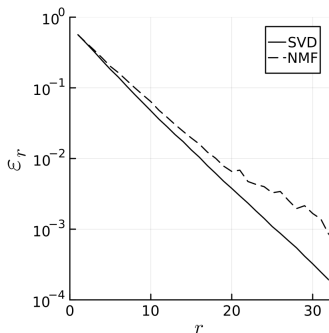
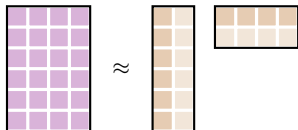


Figure 1. Décroissance de l'erreur quadratique en fonction du nombre de degrés de liberté.

Dynamique réduite - Méthode de Galerkin

- On résout l'équation de la dynamique *projetée* dans le sous-espace choisi. [Quarteroni and al., 2015]

$$\left\langle \varphi, \frac{\partial u}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \varphi, \mathcal{L}u + \mathcal{N}(u) \right\rangle$$

$$\begin{aligned} \varphi^\top \varphi \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} &= \varphi^\top \mathcal{L} \varphi \hat{u} + \varphi^\top \mathcal{N}(\varphi \hat{u}) \\ &= \hat{\mathcal{L}} \hat{u} + \varphi^\top \mathcal{N}(\varphi \hat{u}) \end{aligned}$$

Dans le cas général, on ne peut pas factoriser la non-linéarité. On reste dépendant du modèle haute fidélité.

Dynamique réduite - Méthode de Galerkin

- Projection de l'opérateur non-linéaire dans le sous-espace choisi

Modèle haute fidélité $\left[\frac{\partial u}{\partial t} \right]_i = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n \chi_{ikl} u_k u_l \quad \chi \in \mathbb{R}^{n \times n \times n}$

Modèle réduit $\left[\varphi^\top \varphi \frac{\partial \hat{u}}{\partial t} \right]_i = \sum_{k=1}^r \sum_{l=1}^r \Theta_{ikl} \hat{u}_k \hat{u}_l \quad \Theta \in \mathbb{R}^{r \times r \times r}$

avec

$$\Theta_{ikl} = \sum_j \sum_p \sum_q \chi_{jpk} \varphi_{ji} \varphi_{pk} \varphi_{ql}$$

Environnement urbain

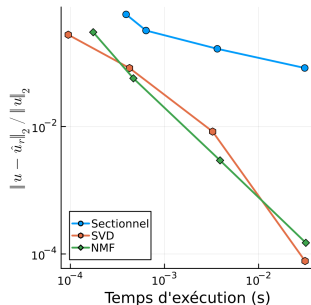
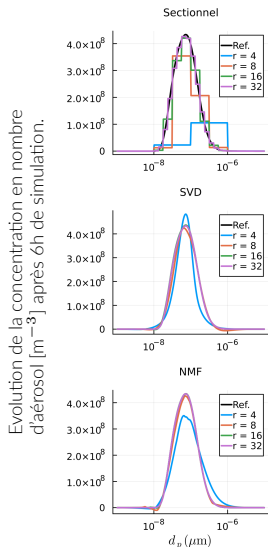
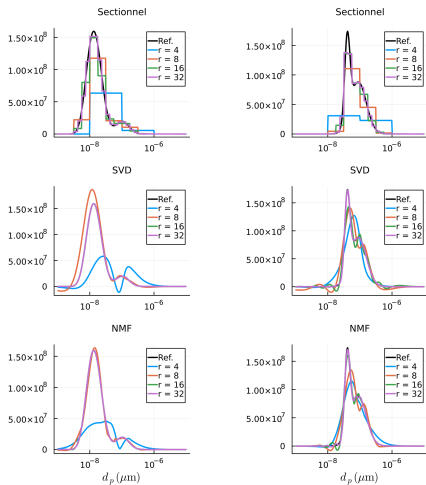


Figure 2. Comparaison temps-précision.

Environnement représentatifs :
[Seigneur and et al., 1986]

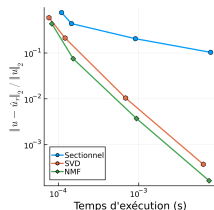
Autres conditions physiques

Evolution de la concentration en nombre d'aérosol [m^{-3}] après 6h de simulation.

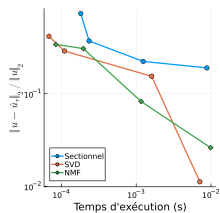


(a) Atmosphère dégagée

(b) Brouillard



(a) Atmosphère dégagée



(b) Brouillard

Figure 4. Comparaison temps-précision.

Stabilité

- Les réductions par SVD et NMF sont comparables en terme de précision.
- La stabilité en temps long n'est pas assurée, du fait de la possible non-positivité.
- On observe que NMF est *toujours* stable lorsque l'on effectue une projection positive sur la base choisie.

$$\Pi_+ \hat{u} = \underset{\{\lambda_i\}_{i=1,r} \geq 0}{\operatorname{argmin}} \|\varphi \lambda - \varphi \hat{u}\|_2$$

Conservation de la masse

La masse totale est un invariant de l'équation de Smoluchowski

$$\frac{dM}{dt} = \int_0^\infty x \frac{\partial u}{\partial t} dx = 0$$

→ Peut-on assurer que le modèle réduit conserve cet invariant ?

Il suffit que la fonction $x \mapsto x$ soit incluse dans le sous-espace réduit, la méthode de Galerkin assure ensuite

$$\left\langle x, \frac{\partial u}{\partial t} \right\rangle = 0 = \frac{dM}{dt}$$

Conservation de la masse

Limitation du modèle haute fidélité :

En discrétisant choisissant de discrétiser avec des fonctions constantes par morceaux, on ne peut reconstruire $x \mapsto x$ qu'à la limite où la résolution tend vers l'infini.

- En choisissant comme modèle haute fidélité une discrétisation type éléments finis \mathcal{P}_1 , on assure la conservation de la masse à *toute* résolution.
- On peut ensuite choisir $x \mapsto x$ comme premier élément de base, puis chercher le reste des éléments de base dans son complément orthogonal.
- On assure ainsi la conservation de la masse à *tout* de niveau de réduction.

Références

- [Cueille and Sire, 1998] Cueille, S. and Sire, C. (1998).
Droplet nucleation and smoluchowski's equation with growth and injection of particles.
Physical Review E, 881.
- [Debray and Sportisse, 2007] Debray, E. and Sportisse, B. (2007).
Solving aerosol coagulation with size-binning methods.
Applied Numerical Mathematics, 57(9):1008–1020.
- [Eckart and Young, 1936] Eckart, C. and Young, G. (1936).
The approximation of one matrix by another of lower rank.
Psychometrika, pages 211–218.
- [Lee and Seung, 2000] Lee, D. and Seung, H. (2000).
Algorithms for non-negative matrix factorization.
Proceedings of the 13th International Conference on Neural Information Processing Systems, page 535–541.
- [Lombart and Laibe, 2021] Lombart, M. and Laibe, G. (2021).
Grain growth for astrophysics with discontinuous galerkin schemes.
Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 501:4298–4316.
- [Quarteroni and al., 2015] Quarteroni, A. and al. (2015).
Reduced Basis Methods for Partial Differential Equations.
Springer Cham.
- [Seigneur and et al., 1986] Seigneur, C. and et al. (1986).
Simulation of aerosol dynamics: A comparative review of mathematical models.
Aerosol Science and Technology, 5:205–222.
- [Smoluchowski, 1916] Smoluchowski, M. V. (1916).
Drei vortage uber diffusion, brownische bewegung und koagulation von kolloidteilchen.
Physik, 17:557–585.