

Notus : un code pour la mécanique des fluides incompressibles

Stéphane Glockner,
Mathieu Coquerelle, Antoine Lemoine, Joris Picot

I2M, Université de Bordeaux, INP-Bordeaux, CNRS UMR 52 95
glockner@ipb.fr

22 mai 2015

1 Projet Notus

- Bref historique / bilan
- Pourquoi Notus
- Contexte de développement
- Objectifs en Recherche/ Enseignement / Industrie / HPC

2 Quelques projets / développements

- Conditions aux limites de sortie
- Frontières immergées
- Reconstruction d'interfaces MOF
- Level-set et tension superficielle

3 Roadmap

Aquilon (→ 2009), Thétis (2009-15)

- **Navier-Stokes en incompressible, volumes finis** curvilignes orthogonaux
- Écoulements **multiphasiques** (modèle 1-fluide)
- Equation de l'énergie, transport de scalaires passifs
- Turbulence (LES, RANS)

Quelques dates, travaux

- 1995, début des travaux sur les écoulements **multiphasiques** (VOF-PLIC, TVD)
- 1997, modèles de turbulence RANS
- 1998, interface texte : code de recherche → code de **production**
- 2001, **curviligne orthogonal**
- 2002, Simulation des grandes échelles (LES)
- 2005, AMR, **multiblocs** conformes et non conformes avec recouvrement
- 2007, **parallélisation** → s'appuyer structure pyramidale du calcul intensif
- 2008, interface graphique (enseignement ENSCBP)
- 2008, frontières immergées
- 2009, effort de **documentation**
- 2011, conditions aux limites de sortie
- 2013, **projet PRACE** sur le déferlement

Bilan...

- Plusieurs dizaines d'articles depuis 5 ans s'appuient sur Thétis
- **Projets** Rég. Aquitaine (4), ANR (2+2), Europe (2), coll. institutionnelles et industrielles (ARCELOR, SNECMA, CEA, Hérakles, etc.), DRAC, IdEx
- Et au-delà, **exemples d'utilisation** passés ou présents : SIAME, INRA, LEMTA, IMFT, ICMCB, LOMC, P', LTN, GEPEA, etc.
- Utilisé pour l'**enseignement** de la mécanique des fluides (ENSCBP, UPPA, ...)

... positif mais...

- **Evolutions successives**, empreinte de plusieurs développeurs
- Beaucoup de fonctionnalités, pas toujours compatibles
- Développements guidés par les contrats, code fermé

Notus (2015), repartir de zéro dans un contexte différent et simplifié

- Accepter certaines limites
- Mettre le code au centre d'une démarche logicielle sur le long terme
- Code compact, cartésien, **massivement parallèle** (10^5 coeurs)
- **Open source**, mieux documenté, en anglais
- **Ordre 2** en temps et espace "partout"
- Conserver le quadruple objectif **Recherche / Industrie / Enseignement / HPC_i**

Outils de développement

- **Fortran 90** (gcc, ifort, xlf90) et **MPI** (openMPI, SGI MPT, MPIXL, BullXMPI)
- Gestionnaire de version **Git**
- Compilation : **cmake**
- **Portages**
 - avakas MCIA
 - occigen CINES
 - turing IDRIS
 - curie TGCC
- Solutions "identiques" quels que soient compilateurs/MPI et la machine
- Documentation : **doxygen**, markdown (html et pdf)
 - installation
 - développement
 - numérique
 - vérification / validation
 - théorique

Un code mais aussi une boîte à outils

- Architecture **modulaire**
- Construire ses équations
- Rajouter des schémas facilement, ...

Vérification

En rapport avec les mathématiques, vise à analyser la solution numérique d'un modèle numérique

Validation

Vise à analyser la capacité des modèles à représenter un phénomène physique réel

Une des briques de base

- **Indispensable** pour tout lien durable avec l'industrie
- Permet de **tester et comparer** les schémas et méthodes rapidement et précisément
- Permet une prise en main rapide du code, démontre le potentiel

Bibliothèque de cas tests de non régression

- Documentés (200 pages dans Thétis)
- Cas tests académiques, cas réels (déferlement, goutte, etc.)
- **Cas massivement parallèle**
- Solutions identiques compilateurs/MPI/machine
- Scripts de calcul de convergence / performance
- Validation unitaire

① Projet Notus

- Bref historique / bilan
- Pourquoi Notus
- Contexte de développement
- Objectifs en
 - Recherche
 - Enseignement
 - Industrie
 - HPC

② Quelques développements

- Conditions aux limites de sortie
- Frontières immergées
- Reconstruction d'interfaces MOF
- Level-set et tension superficielle

③ Roadmap

Liens forts avec la mécanique

- Finalité est la **recherche en mécanique des fluides et transferts**
- Le code est un outil
- Utiliser ou proposer des méthodes numériques, précises, efficaces, **adaptées à la physique**

Projets

- **Stockage de l'énergie solaire** (M. Azaiez, C. Le Bot)
 - Mise au point d'un simulateur de matériaux virtuels à changement de phase (coll. industrielle Abengo Research)
- Modélisation numérique des **écoulements supercritiques** et proches du point critique (S. Amiroudine, J.P. Caltagirone, A. Erriguible)
 - Problèmes de synthèse de matériaux en milieu supercritique (coll. ICMCB, CBMN, Labex AMADEus)
- Mise au point de **matériaux composites** (É. Arquis, C. Le Bot - coll. industrielle Hérakles)
- Modélisation du **micro climat dans les grottes ornées** (D. Lacanette, coll. PACEA, projet MicroPaGO inter Labex CPU/LaScArBx)
 - Aide la conservation de notre patrimoine archéologique
- **Écoulements environnementaux** diphasiques (P. Lubin, S. Glockner)
 - Déferlement, Mascaret, atténuation de la houle par la pluie
 - Meilleure compréhension des phénomènes
 - Alimenter / valider des modèles à plus grande échelle

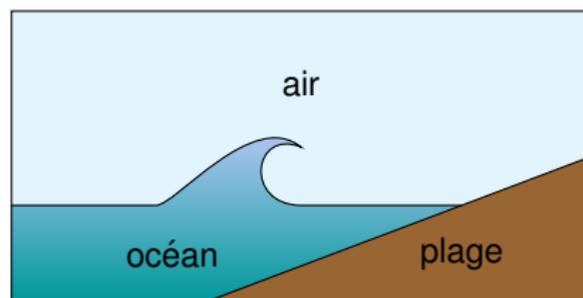
→ Expérimentation numérique grâce au HPC

Identification des filaments

- 600 millions de points, 8192 processeurs, en 2013, 5 jours de calcul
- Visualisation exploratoire, difficile en raison du caractère chaotique de l'écoulement et de sa forte aération
- Étude paramétrique de différentes conditions de déferlement
- Isolation d'un filament pour étudier le mécanisme de génération



P. LUBIN, S. GLOCKNER, *Numerical simulations of three-dimensional plunging breaking waves : generation and evolution of aerated vortex filaments*, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 767 / March 2015, pp 364 - 393



Interfaces

- Interfaces fluide / fluide (transport d'interface, discrétisation $O(2)$, tensions de surface)
- Interfaces fluide / solide (frontière) et fluide / poreux (interface)
- Au delà, interfaces évanescentes, mouillage

Ordre 2 "partout" ? Efficace en terme de HPC ?

- Schémas d'ordre 2 mais ordre 2 aux interfaces ?
- Frontières immergées à l'ordre 2, mais scalable ?
- Reconstruction d'interfaces à l'ordre 2, même dans une maille avec frontière immergée ?
- Reconstruction d'interfaces à l'ordre 2, et la courbure ?
- ...

① Projet Notus

- Bref historique / bilan
- Pourquoi Notus
- Contexte de développement
- Objectifs en
 - Recherche
 - Enseignement
 - Industrie
 - HPC

② Quelques développements

- Conditions aux limites de sortie
- Frontières immergées
- Reconstruction d'interfaces MOF
- Level-set et tension superficielle

③ Roadmap

Enseignement de mécanique des fluides et transferts

- Ecoles généralistes (ENSCBP) ou plus spécialisées (ENSEIRB-MATMECA)
- TP de mécanique des fluides
- Modéliser et simuler un problème physique
- Importance des choix des méthodes numériques
- Validation, convergence

Enseignement des méthodes numériques

- ENSEIRB-MATMECA
- Programmation d'un schéma
- Comparaison / benchmark
- Confrontation directe avec le calcul //, MCIA (bibliothèque de cas tests)

Possibilités

- Stages / thèses / post-doc
- Outil de référence et de comparaison
- Outil d'étude et de recherche par des industriels
- Utilisation sur sites industriels plus grande (+/- autonome)

Vers un consortium d'industriels

- Support
- Aide au développement en interne
- Développement de nouveaux modules en concertation entre industriels
- ...

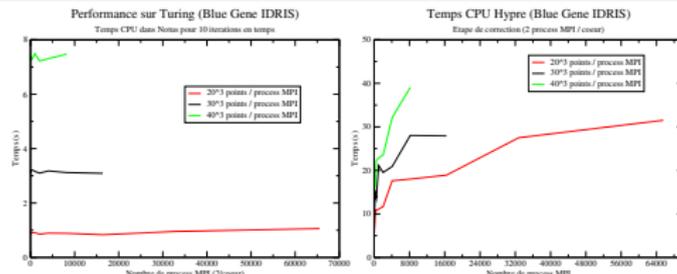
Favoriser l'accès des chercheurs / étudiants / industriels au calcul intensif

- Réduire la coupure entre de nombreux domaines scientifiques et le calcul intensif
- Besoin d'**outils généraux**, performants qui cachent le bas niveau de parallélisme
- La puissance des machines évolue plus vite que les méthodes numériques

Comment ?

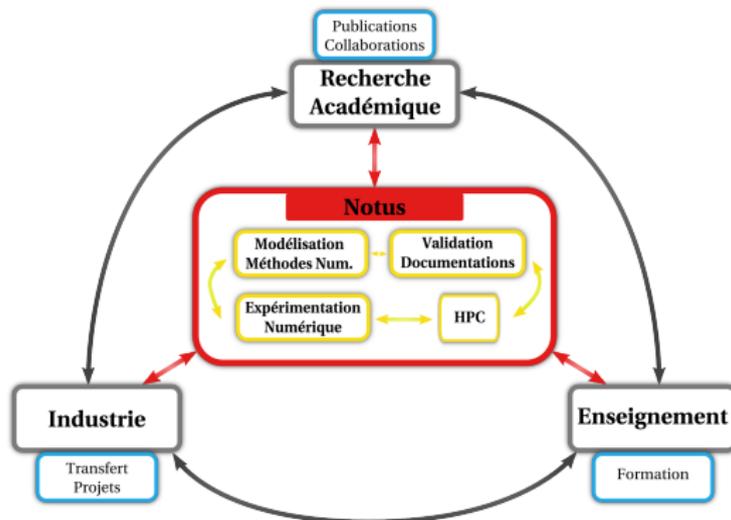
- **Masquer le parallélisme MPI**, utiliser des bibliothèques dédiées (Hypré, ADIOS, ...)
- **Portage** sur un grand nombre de plates-formes (mesocentre, GENCI, PRACE)
- Possibilité de tester très vite des méthodes, schémas vs. massivement parallèle par une **bibliothèque de cas tests validées**
- Effort d'optimisation : vectorisation et openMP

Poursuite de cet effort en cours, challenge IDRIS juin 2015



Bilan

- Rationaliser nos (des) efforts de recherche
- Tirer partie des synergies entre recherche / enseignement / industrie / HPC
- Benchmarker les méthodes sur des problèmes physiques moteurs
- Accélérer les développements
- Outil certifié pour l'expérimentation numérique



1 Projet Notus

- Bref historique / bilan
- Pourquoi Notus
- Contexte de développement
- Objectifs en Recherche/ Enseignement / Industrie / HPC

2 Quelques développements

- Conditions aux limites de sortie
- Frontières immergées
- Reconstruction d'interfaces MOF
- Level-set et tension superficielle

3 Roadmap

Méthodes de correction de pression

Étape de **prédiction** sur \mathbf{u} - Condition limite de contrainte nulle (ou de traction)

$$\rho \frac{\alpha \mathbf{u}^{n+1/2} + \beta \mathbf{u}^n + \gamma \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} - \mu \Delta \mathbf{u}^{n+1/2} + \nabla p^n = \mathbf{f}^{n+1} \quad \text{dans } \Omega \quad (1)$$

$$\mathbf{u}^{n+1/2} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (2)$$

$$\left(\mu \nabla \mathbf{u}^{n+1/2} - \check{p}^{n+1} \text{Id} \right) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t}^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_N \quad (3)$$

Étape de **correction** sur l'incrément de pression.

$$\frac{\rho \alpha}{\Delta t} \left(\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1/2} \right) + \nabla \varphi^{n+1} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \Omega \quad (5)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (6)$$

$$\partial_n \varphi^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (7)$$

$$\varphi^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N \quad (8)$$

Actualisation de la pression

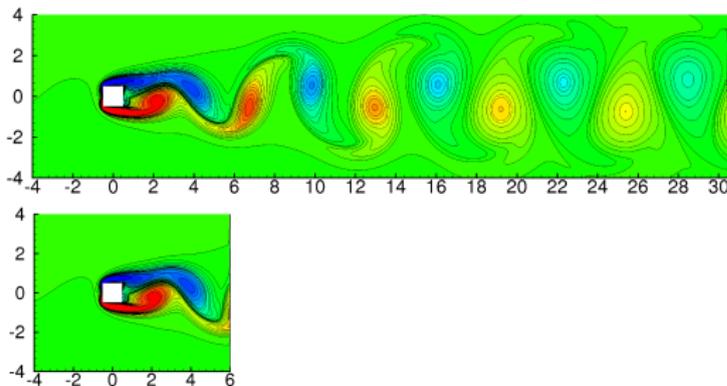
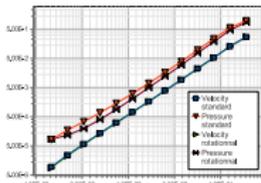
$$p^{n+1} = p^n + \varphi^{n+1} - \chi \mu \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} \quad \text{dans } \Omega \quad (9)$$

Nouvelle condition limite. Par exemple sur la limite droite :

$$\left(\frac{\Delta t}{\alpha \rho} \partial_{x_2^2} - \frac{1}{\mu} \right) \varphi^{n+1} = (1 - \chi) \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} \quad (10)$$

Conditions aux limites de sortie pour les méthodes de time splitting

Condition limite	Standard				Rotationnel			
	Espace		Temps		Espace		Temps	
	\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p
Dirichlet : $\partial_n \varphi = 0$	2	2	2	3/2	2	2	2	2
Standard : $\varphi = 0$	1	1/2	3/2	1/2	2	2	3/2	1
Proposition : $\varphi = \varphi^*$	2	2	2	3/2	2	2	2	2

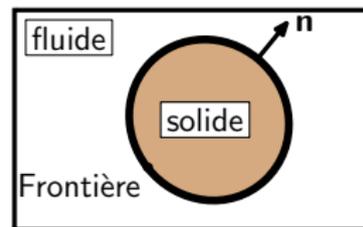


A. POUX, S. GLOCKNER, M. AZAÏEZ, *Improvements on open and traction boundary conditions for Navier–Stokes time-splitting methods*, Journal of Computational Physics, vol. 230, pp. 4011-4027 (2011).

Projets inter Labex sur le Micro-climat dans les grottes ornées

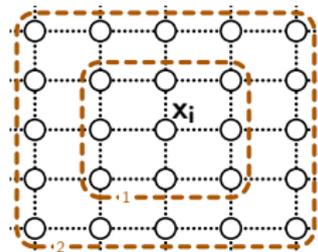
D. Lacanette, T. Milcent, S. Glockner

- Prise en compte d'**obstacles de formes quelconques** dans un maillage cartésien
- Le problème cible est $\Delta u = f$ avec des CL Dirichlet ou Neumann



Méthodes existantes d'ordre 2

- Mittal et al. JCP (2008)
- Coco et al. JCP (2013)
- → **Stencils non compacts**

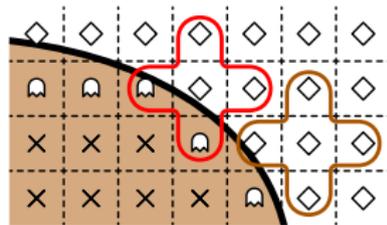


→ Généralisation des méthodes aux maillages rectilinéaires (stretchés)

- Conservation d'un stencil compact à 9 (ou 25 pts) en 2D
- Tirer partie des **solveurs multigrilles géométriques** (Hypre)

Principe d'une IBM

- Domaine numérique séparé *fluide / solide*
- Équation de Poisson dans le fluide $\Delta u = f$
- C. L. de Dirichlet *ET* de Neumann
- Existence de **points fantômes**
- **Extrapolation** de la solution dans le fluide sur les points fantômes **compatible avec les CL**

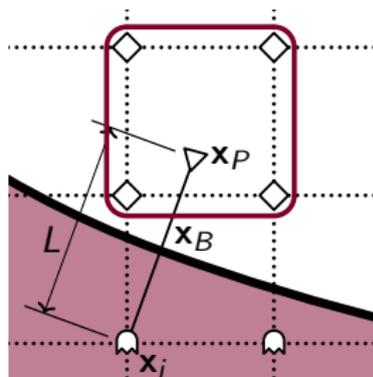


Utilisation de différences finies

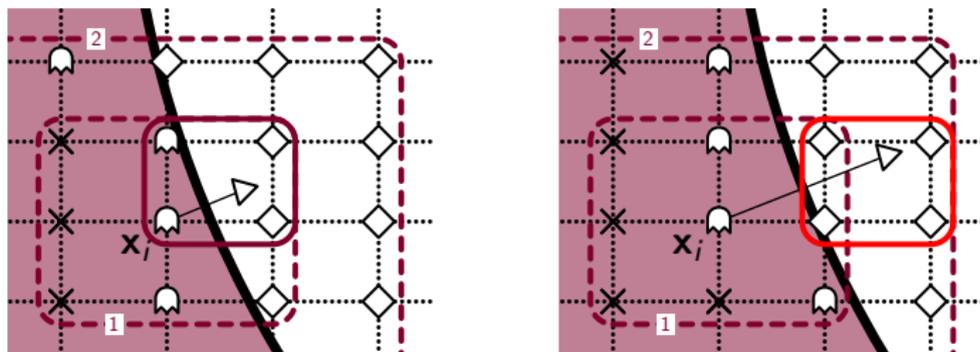
- Dirichlet : $\frac{U_i + u_P}{2} = u_B$
- Neumann : $\frac{u_P - U_i}{L} = \frac{\partial u_B}{\partial n}$

Avec :

- $\mathbf{x}_B, \mathbf{x}_P$ déterminés par levelset en \mathbf{x}_i
- u_B et $\frac{\partial u_B}{\partial n}$ donnés par C. L.
- u_P écrit sous forme d'une interpolation $u_P = \sum b_j U_j$

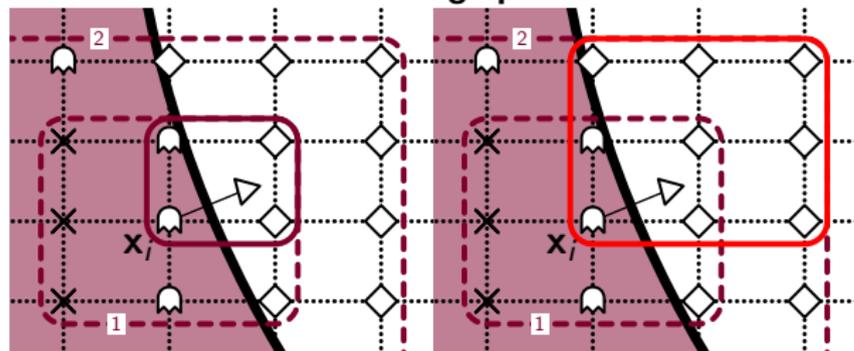


1 Le stencil n'est pas compact d'ordre 1 :

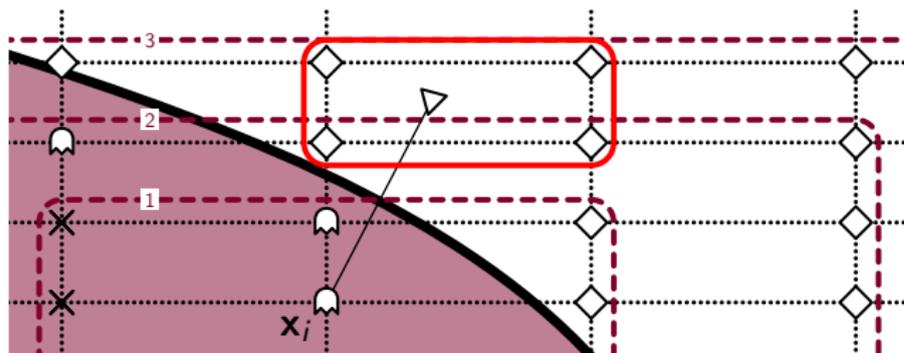


Des points d'interpolation sortent du domaine C^1 quand \mathbf{x}_P est loin de \mathbf{x}_i .

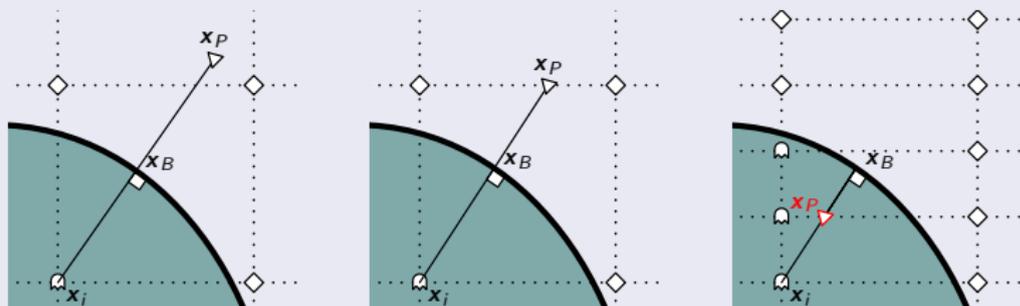
- 1 Le stencil n'est pas compact d'ordre 1
- 2 Le cas Neumann ne converge pas au 2e ordre



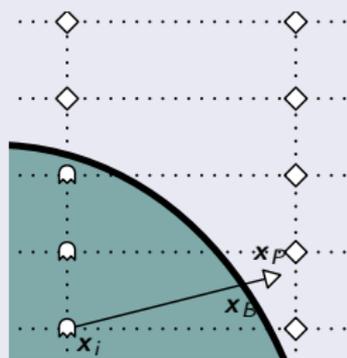
- 1 Le stencil n'est pas compact d'ordre 1
- 2 Le cas Neumann ne converge pas au 2e ordre
- 3 L'anisotropie du maillage réduit la compacité
 - Dans le cas ci-dessous, x_P sort du domaine C^2



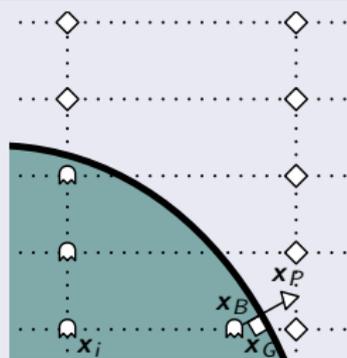
Point image au bord du domaine compact



Point image au centre de masse

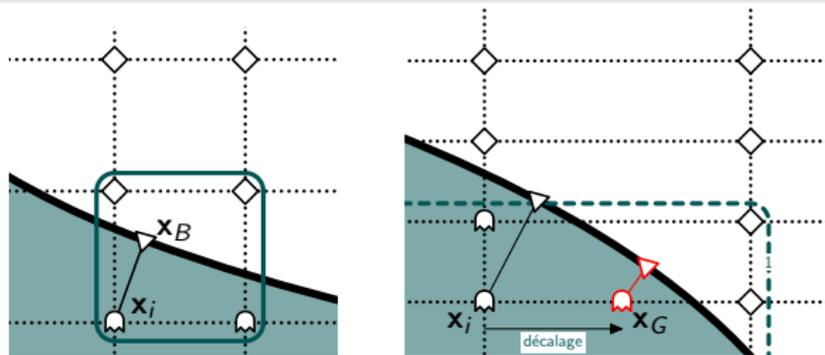


Décalage du point fantôme



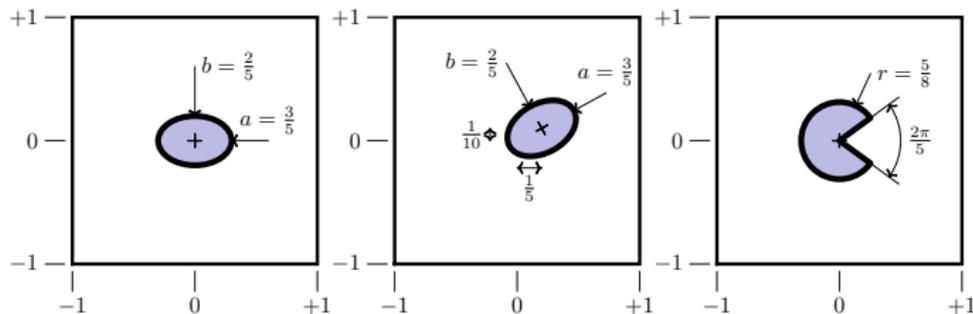
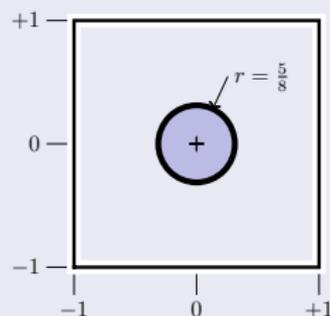
Interpolation de u_B directement

- Dirichlet : $u_B = \sum b_j U_j$
- Neumann : $\frac{\partial u_B}{\partial \mathbf{n}} = \sum (\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{n}_j) U_j$
avec $\partial_x u_B = \sum d_{xj} U_j$ $\partial_y u_B = \sum d_{yj} U_j$
- Les points d'interpolation de u_B sont plus proches de \mathbf{x}_i que ceux de u_P
- Pour les maillages isotropes seulement



Cas tests 2D

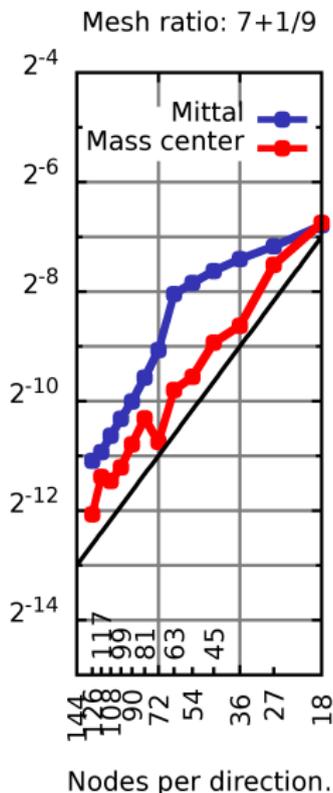
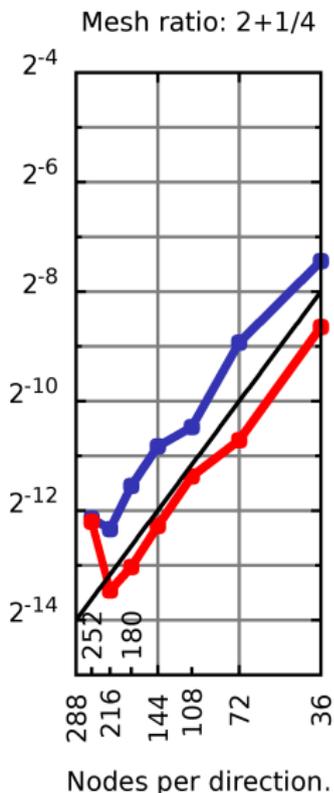
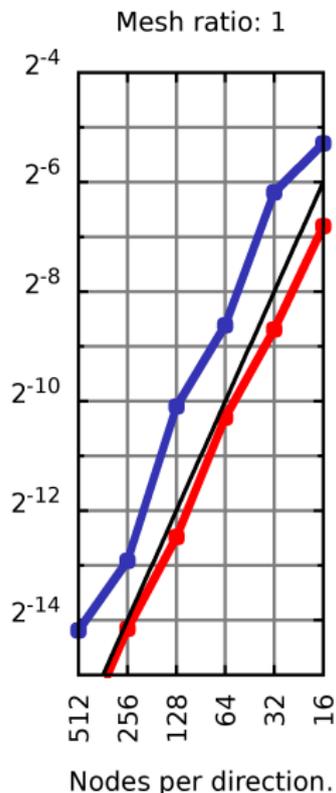
- Équation de Poisson 2D
- Interface sphérique $r = \frac{5}{8}$
- Solution parabolique
- Conditions de Dirichlet aux bords du domaine cartésien



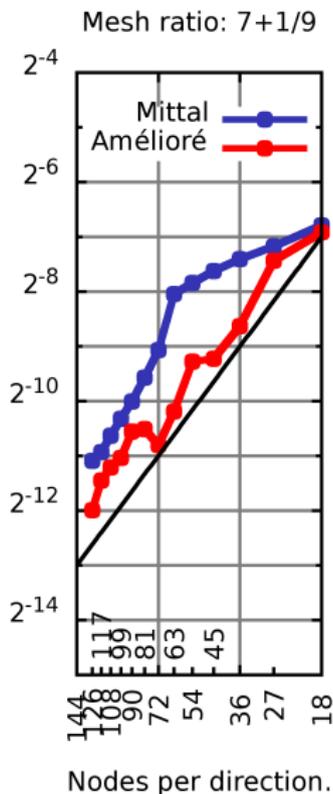
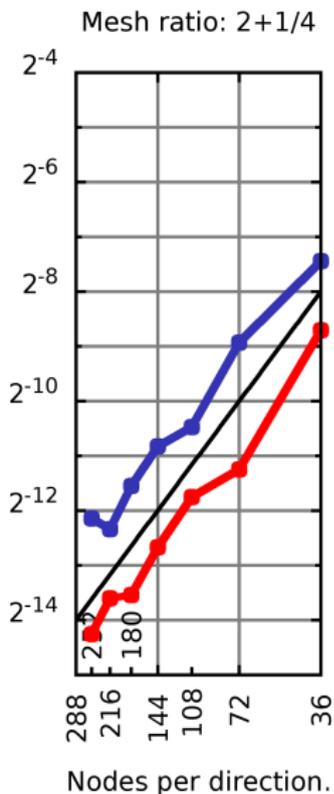
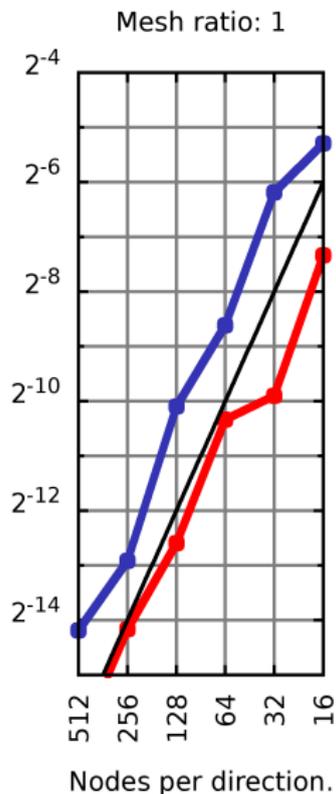
Cas tests 3D

- Sphère / cylindre

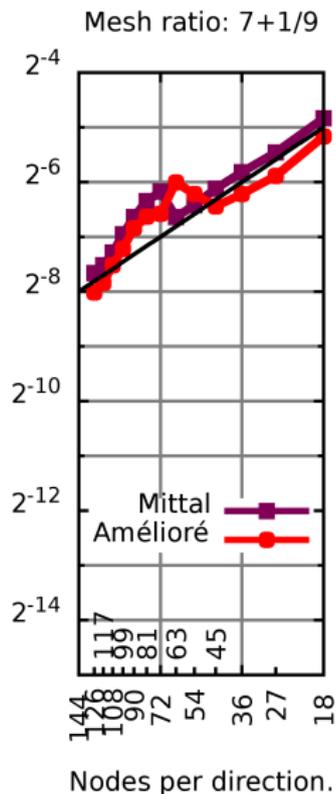
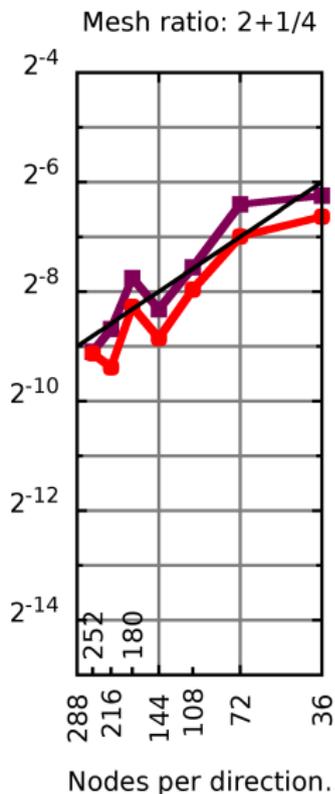
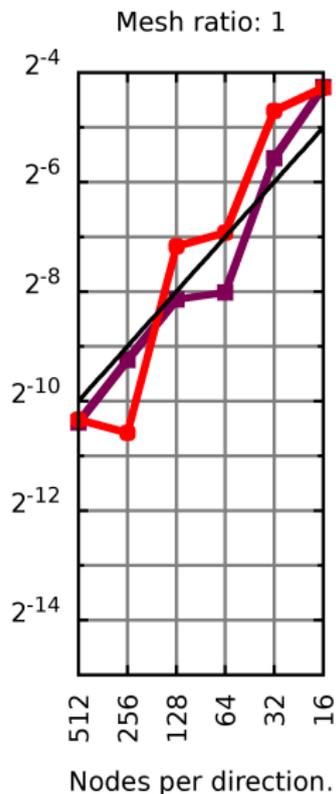
Exemple : utilisation du centre de masse (Dirichlet)



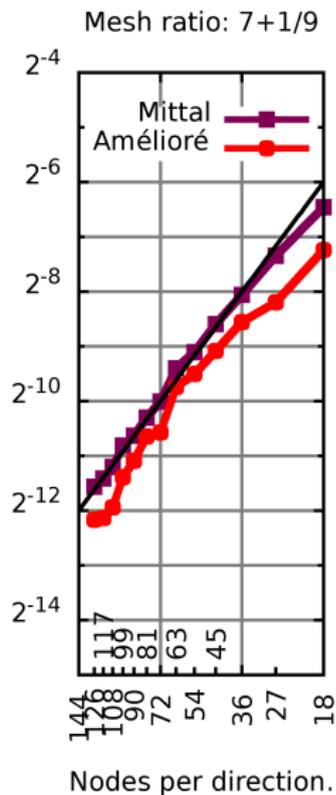
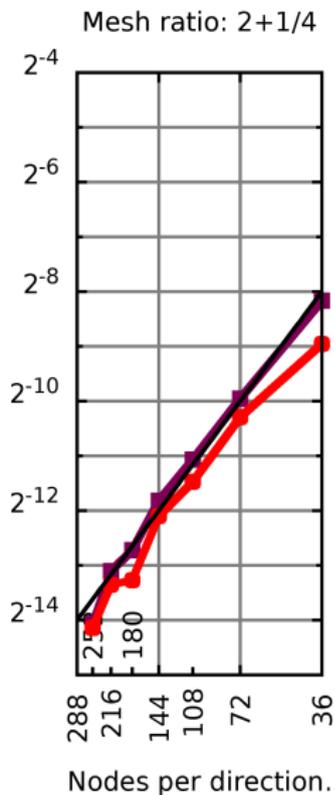
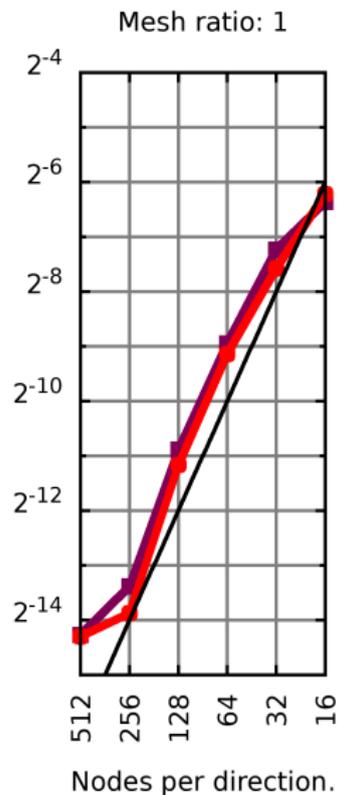
Exemple : Interpolation directe (Dirichlet)



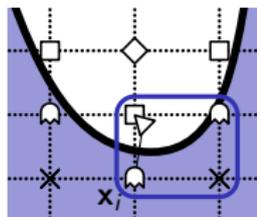
Exemple : Interpolation directe (Neumann - stencil 9pts)



Exemple : Interpolation directe (Neumann - stencil 25pts)



- 1 On a mis au point une IBM compacte d'ordre 1 (stencil 9 pts)
 - convergente au 2e ordre pour des conditions de Dirichlet
 - convergente au 1e ordre pour des conditions de Neumann
- 2 On a également une IBM compacte d'ordre 2 (stencil 25 pts)
 - convergente au 2e ordre pour des conditions de Neumann
- 3 Ces méthodes supportent les maillages anisotropes
- 4 Implémentation pour Navier-Stokes en cours
- 5 Impact des frontières immergées sur les solveurs
- 6 Gestion des cas particuliers



1 Projet Notus

- Bref historique / bilan
- Pourquoi Notus
- Contexte de développement
- Objectifs en Recherche/ Enseignement / Industrie / HPC

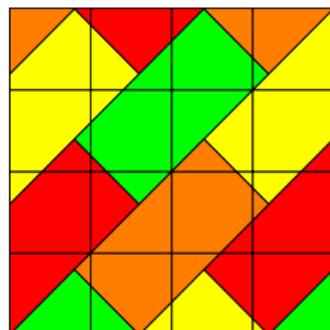
2 Quelques développements

- Conditions aux limites de sortie
- Frontières immergées
- Reconstruction d'interfaces MOF
- Level-set et tension superficielle

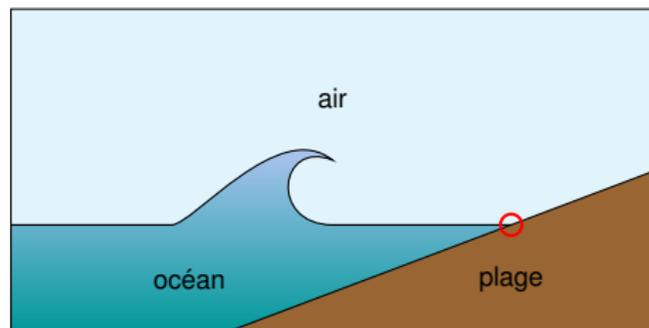
3 Roadmap

Moment of Fluid (MOF)

- Méthode récente
- Similaire à VOF-PLIC + centres de masse
- Reconstruction de l'interface possible dans une seule cellule
- Ordre 2
- Gestion native de nombreuses phases simultanément
- Réduction du fractionnement
- **Simplification de la méthode en cartésien ?**



Dyadechko & Shashkov (2006)



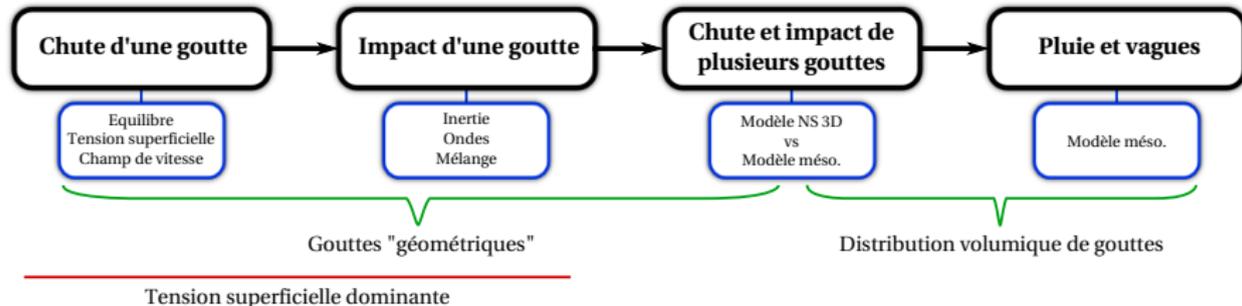
Mailles mixtes

- MOF (ordre 2)
→ **plage : phase comme les autres**
- Frontière immergée d'ordre 2
- Globalement d'ordre 2

Atténuation de la houle par la pluie

coll. F. Véron (Delaware), L. Mieussens (IMB), P. Lubin & S. Glockner (I2M)

- Modélisation, méthodes numériques, calcul intensif → Expérimentation numérique
- Pour une meilleure compréhension des phénomènes physiques en complément des expériences

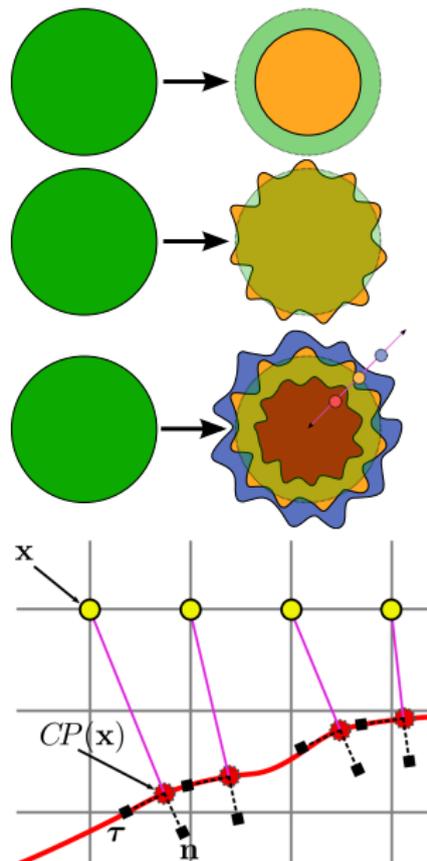


Tension superficielle dominante

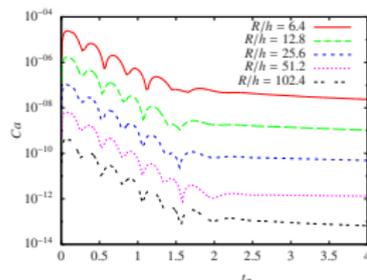
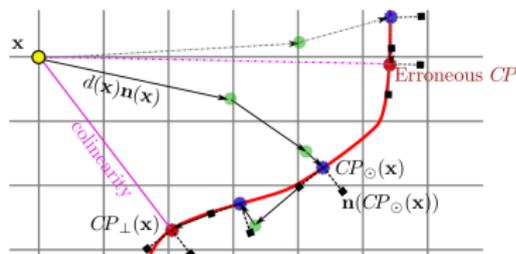
- Gouttes
- Déferlement (tubes secondaires)
- Remontées capillaires

- Problème surfacique dans une équation volumique
- **Continuum Surface Force [Brackbill]** : $\sigma \kappa \nabla C$
- Travail réalisé dans le cadre **Level-set / WENO**
- Calcul de la courbure $\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right)$ sur des points de maillage ou κ n'est pas défini \rightarrow extension
- Calcul de κ précis
 - précision par rapport à la courbure exacte
 - variation minimale le long de la surface
 - variation minimale le long de la normale
- κ dans le domaine = κ du point de Γ le plus proche [Hermann]
- \rightarrow **Étendre la courbure dans la direction normale**

$$\kappa_{CP}(\mathbf{x}) = \kappa(CP(\mathbf{x}))$$



- Level-set \neq fonction distance
- Amélioration de la méthode pour assurer en plus la **colinéarité à la normale**



- Courbure de l'ellipse : convergence à l'ordre 4 (au lieu de 2 pour CP standard)
- Disque à l'équilibre : diminution des courants parasites - convergence à l'ordre 4 en espace
- Disque advecté : **convergence à l'ordre 4 en espace** (contre à peine 1 pour les méthodes VOF)

- Utiliser le point le plus proche pour la **redistanciation**



M. COQUERELLE, S. GLOCKNER, *A fourth-order accurate curvature computation in a level set framework for two-phase flows subjected to surface tension forces*, Soumis à Journal of Computational Physics.

Validation en cours

- Remontée d'une bulle
- Chute libre d'une goutte
- Impact d'une goutte

Impact de plusieurs gouttes

Aujourd'hui

- Navier-Stokes implicite (ordre 2) ou semi-implicite (WENO5)
- Equation de l'énergie
- Equation d'advection de n fluides : VOF-PLIC 2D/3D, level-set (WENO) 2D/3D, redistanciation
- Tensions de surface 2 fluides
- LES échelles mixtes
- Frontières immergées (Energie)
- Interpolation polynomiale (Lagrange)
- Git, cmake, début des documentations
- Massivement parallèle, porté sur MCIA, CINES, IDRIS, TGCC

Oct./nov. 2015

- Frontières immergées (Navier-Stokes et énergie)
- Documentations
- MOF 2D
- → version 1.0.0 (diffusion restreinte)

2016 - Consolidation / Exploitation

- MOF 3D
- Particle/Level-set, MOF/Level-set
- Tensions de surface / Closest Point / Redistanciation
- Interfaces immergées
- Modèles RANS
- Couplage fluide/structures déformables
- Oct. 2016 → version 2.0.0 diffusable

3 posts-doc CPU → Demande ing. valorisation 18 mois

- La diffusion des travaux de recherche demande du temps
- Rencontrer quelques industriels, identifier des besoins, réponses techniques
- Support
- Compatibilité des développements, documentations, validations, scripts
- Solveurs, optimisation (vectorisation, openMP)
- Interface graphique

