

Soutenance pour l'Habilitation à Diriger des Recherches

Simulations et méthodes numériques en mécanique des fluides incompressibles dans un environnement massivement parallèle

Stéphane Glockner

I2M, CNRS UMR 5295

`glockner@bordeaux-inp.fr`

`https://notus-cfd.org/glockner`

5 Juin 2018

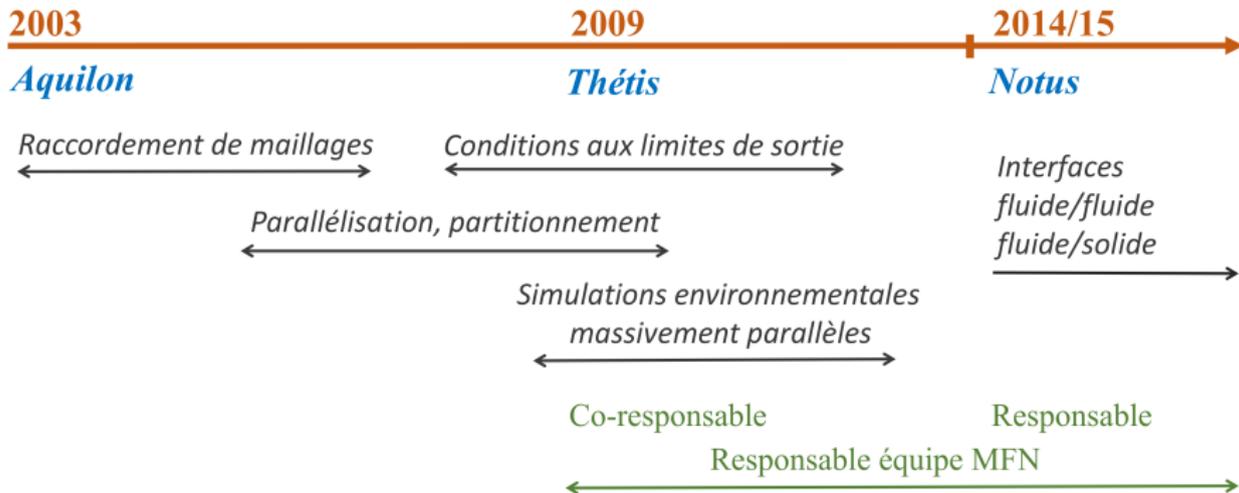


université
de BORDEAUX



Quelques éléments introductifs

Ingénieur de Recherche depuis 2003
I2M / Dpt TREFLE / **Équipe Mécanique des Fluides Numérique**



Projets / (co-)encadrements

- Projets : Région Aquitaine, Cluster CPU IdEX, ANR, GENCI, PRACE
- Doctorants (4), Post-doctorants (4), Ingénieurs (2)

- 1 Quelques éléments introductifs
- 2 Contexte logiciel
- 3 Autour des maillages
 - Partitionnement de maillages multiblocs conformes*
 - Raccordement de maillages non conformes*
- 4 Conditions aux limites de sortie
- 5 De l'intérêt du calcul massivement parallèle - déferlement des vagues
- 6 Autour des interfaces
 - Méthode des frontières immergées*
 - Calcul des forces de tension de surface*
 - Optimisation de la reconstruction d'interfaces*
 - Ligne triple*

Des codes fédérateurs - démarche historique au laboratoire

- **Rationaliser** des efforts de recherche, dans l'équipe et au-delà
- **Capitaliser** des modèles et méthodes numériques, un savoir-faire

Aquilon → Thétis, 2003-2015

- Utilisations **académique, pédagogique et industrielle**, extérieures au laboratoire
- Code reconnu, code "fermé"

Principales implications

- Parallélisation / Partitionnement de maillage
- Raccordement de maillages non-conformes
- Conditions aux limites de sortie
- Validation / Vérification

Mûrissement d'une démarche d'équipe

- Travail collaboratif
- Rôle d'un code
- Importance du calcul intensif au regard des applications visées
- Interconnexion des problèmes scientifiques

Constat (Rapport Comité Stratégique du Calcul Intensif 2008)

- La puissance des machines évolue plus vite que les méthodes numériques
- Coupure entre de nombreux domaines scientifiques et le calcul intensif
- Éparpillement national des efforts de recherche en mécanique des fluides numérique
- **Besoin d'outils généraux**, performants qui cachent le bas niveau de parallélisme

Notus - depuis 2015

- *From scratch*, **open-source**, libre → collaboratif
- **Massivement parallèle**, MPI / OpenMP / Vectorisation
- Communautés de la mécanique et des mathématiques
 - facile à utiliser et à développer (**masquer le parallélisme**, complexité, boîte à outils numériques)
 - intègre les avancées des méthodes numériques
 - **validé et vérifié** → code de référence
 - comparaisons et tests qualitatifs de méthodes sur des problèmes physiques bien identifiés
 - **vers l'expérimentation numérique**
- Ni un concurrent de... ni un outil commercial... ni un code clic bouton...

Mon rôle

- Initiateur du projet, définition des objectifs scientifiques
- Participer à l'intégration de 2 nouveaux chercheurs MDC
- Faire vivre et évoluer cette dynamique

Discrétisation

- Maillages cartésiens, **Volumes Finis** sur grilles décalées
- Discrétisation **implicite & explicite**

Navier-Stokes

- Couplage vitesse/pression: **time splitting** (Goda, Timmermans)
- Turbulence : LES

Écoulements multiphasiques

- Modèle 1-fluide - Forces de tension de surface : **modèle CSF**
- **Représentation de l'interface**
Volume-of-Fluid / PLIC / splitting directionnel
Moment-of-Fluid / backward advection
Level-set / WENO

Solveurs massivement parallèles

- Itératifs : Hypre (BiCGStab, préconditionneurs **multigrilles géométrique & algébrique**)
- Direct : MUMPS

Parallélisation du code débutée en 2005

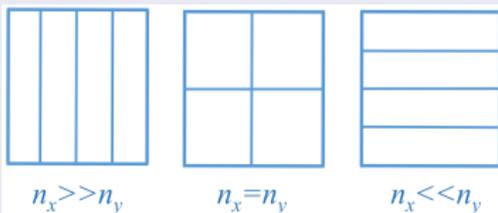
- Utiliser la **structure pyramidale du calcul intensif** en France
- Nombre de cœurs croissant, avènement des clusters
- Masquer autant que possible le parallélisme pour les utilisateurs
- → Travaux sur le **partitionnement**
Couplage avec des bibliothèques de solveurs (**Hypre, ...**)
Changement de méthodes de résolution du couplage vitesse / pression
Suppression des goulots d'étranglement si plusieurs milliers de cœurs (IO, partitionnement)
- Plusieurs projets de calculs intensifs depuis 2005
cluster équipe → **Mésocentre** → **GENCI** → **PRACE**
- Bénéfice pour l'équipe, mise en place d'une "culture" du calcul parallèle

Principes

- **Répartir les charges** de calcul sur plusieurs nœuds (mémoire non partagée)
 - Réduire les temps de calcul
 - Augmenter la taille des problèmes
- EDP, mémoire non partagée
 - Échanges de données entre processeurs à l'aide de la bibliothèque MPI

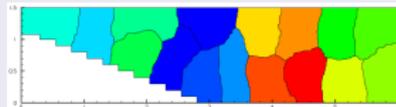
Maillage monobloc

- **Topologie cartésienne de processeurs**
- “Trivial” mais à effectuer avec soin pour réduire les communications



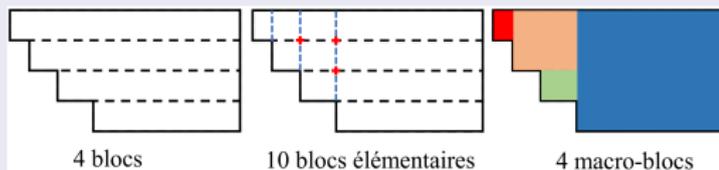
Géométries non rectangulaires

- **Partitionneurs généralistes non adaptés**
- Partitionnement non trivial



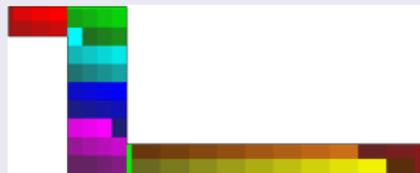
Un partitionneur 2D - Post-doc E. Ahusborde

- Découpage en **blocs élémentaires** par prolongement des limites
- Regroupement en **macro-blocs**
- Partitionnement standard des macro-blocs



Résultats : compétitifs / méthodes existantes

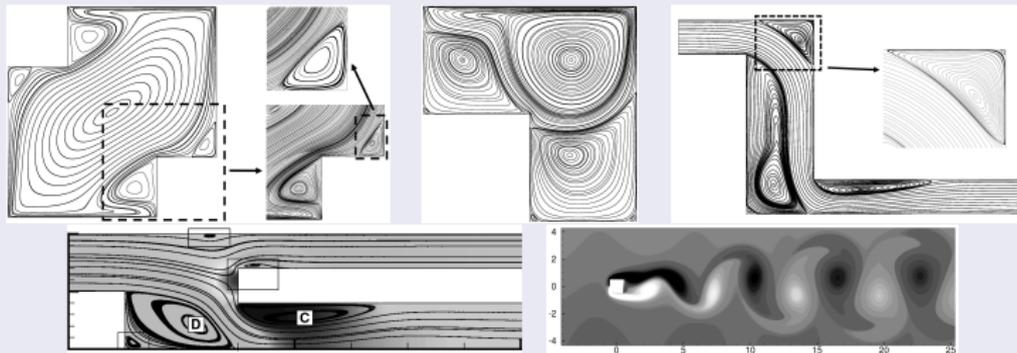
Méthode	Déséquilibre de charges (%)	Échanges	Nombre de blocs
<i>METIS</i>	3.1	11 700	64
<i>REB</i>	47.6	8 843	64
<i>GA</i>	4.9	13 756	91
Thétis	1.4	10 949	66



E. AHUSBORDE, S. GLOCKNER, A 2D block-structured mesh partitioner for accurate flow simulations on non-rectangular geometries, *Computers & Fluids*, vol. 43, no. 1, pp. 2-13, 2011.

Une démarche indispensable

- **Vérification** : confrontation à des solutions exactes → convergence
- **Validation** : confrontation à l'expérience
- Proposition de **solutions de référence** à des écoulements autour de géométries non standards



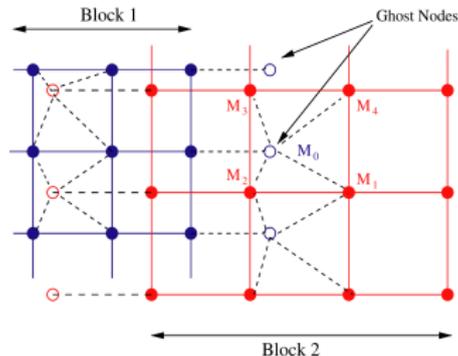
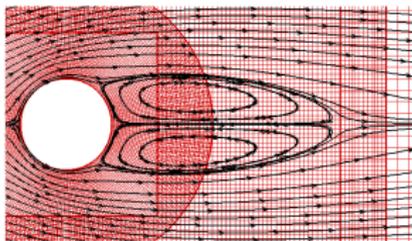
- Participation à un **benchmark national** sur la convection mixte 3D



X. NICOLAS ET AL., Benchmark Solution for a Three-Dimensional Mixed-Convection Flow, part 1 & 2, *Numerical Heat Transfer Part B-fundamentals* 2011a, 20011b.

Maillages multiblocs non-conformes

- Prise en compte de géométries plus complexes
- **Conditions de raccord aux interfaces** : méthode implicite (interpolation des solutions)
- Couplage vitesse/pression : *continuité de la pression, incompressibilité*
- → lagrangien augmenté, projection vectorielle, correction de pression



C. ROMÉ, S. GLOCKNER, J.P. CALTAGIRONE, Resolution of the Navier-Stokes equations on block-structured meshes, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 54 (10), pp. 1239-1268, 2007.

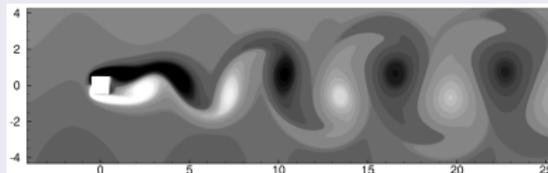


E. AHUSBORDE, S. GLOCKNER, An implicit method for the Navier-Stokes equations on overlapping block-structured grids, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 62, pp 784-801, 2010.

- 1 Quelques éléments introductifs
- 2 Contexte logiciel
- 3 Autour des maillages
 - Partitionnement des maillages multiblocs conformes*
 - Raccordement de maillages non conformes*
- 4 Conditions aux limites de sortie
- 5 De l'intérêt du calcul massivement parallèle - déferlement des vagues
- 6 Autour des interfaces
 - Méthode des frontières immergées*
 - Calcul des forces de tension de surface*
 - Optimisation de la reconstruction d'interfaces*
 - Ligne triple*

Problématique

- Limiter les perturbations de l'écoulement en sortie de domaine



- → **condition limite ouverte ou de traction**

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{t}$$

- Couplage vitesse/pression : méthode de time-splitting
→ **problème de convergence** (*review Guermond et al. 2006*)

Étape de prédiction sur \mathbf{u}^*

$$\rho \frac{3\mathbf{u}^* - 4\mathbf{u}^n + \mathbf{u}^{n-1}}{2\Delta t} - \mu \Delta \mathbf{u}^* + \nabla p^n = \mathbf{f}^{n+1} \quad \text{dans } \Omega \quad (1)$$

$$\mathbf{u}^* = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \leftarrow (2)$$

$$\left(\mu \nabla \mathbf{u}^* - \tilde{p}^{n+1} \text{Id} \right) \mathbf{n} = \mathbf{t}^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_N \leftarrow (3)$$

Étape de correction sur l'incrément de pression $\varphi = p^{n+1} - p^n$ Condition limite sur φ ?

$$\frac{\Delta t}{\alpha \rho} \Delta \varphi^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad \text{dans } \Omega, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} \varphi^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \leftarrow (5)$$

$$\text{B.C.}^{n+1} ? \quad \text{sur } \Gamma_N \leftarrow (6)$$

avec :

$$p^{n+1} = p^n + \varphi^{n+1} \quad \text{dans } \Omega, \quad (7)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho \alpha} \nabla \varphi^{n+1} \quad \text{dans } \Omega. \quad (8)$$

Méthode standard

- $\varphi^{n+1} = 0$ sur Γ_N
- **Blocage de la pression**
- \rightarrow Détérioration des ordres de convergence / CL Dirichlet (*review Guermond et al. 2006*)

		Méthode incrémentale standard			
		Espace		Temps	
		\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p
CL Dirichlet :	$\partial_n \varphi = 0$	2	2	2	3/2
CL Ouverte Standard :	$\varphi = 0$	1	1/2	3/2	1/2

Si viscosité constante \rightarrow méthode incrémentale rotationnelle (Timmermans)

- $\Delta \mathbf{u} = -\nabla \wedge (\nabla \wedge \mathbf{u}) + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u})$
- $p^{n+1} = p^n + \varphi^{n+1} - \mu \nabla \cdot \mathbf{u}^* \rightarrow$ amélioration des ordres de convergence

		Méthode rotationnelle			
		Espace		Temps	
		\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p
CL Dirichlet :	$\partial_n \varphi = 0$	2	2	2	2
CL Ouverte Standard :	$\varphi = 0$	2	2	3/2	1

Nouvelle condition à la limite ($\Gamma_N =$ limite droite)

$$\frac{\rho\alpha}{\Delta t} (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*) + \nabla\varphi^{n+1} = \mathbf{0} \quad \xrightarrow{\partial_x} \quad -\frac{\Delta t}{\alpha\rho} \partial_x^2 \varphi^{n+1} = \partial_x u^{n+1} - \partial_x u^* \quad (9)$$

or

$$\mu \partial_x u^{n+1} = \rho^{n+1} + t_x^{n+1} \quad (10)$$

$$\mu \partial_x u^* = 2\rho^n - \rho^{n-1} + t_x^{n+1} \quad (11)$$

$$\rho^{n+1} - \rho^n = \varphi^{n+1} \quad (12)$$

donc

$$\left(\frac{\Delta t}{\alpha\rho} \partial_x^2 + \frac{1}{\mu} \right) \varphi^{n+1} = \frac{\varphi^n}{\mu} \quad (13)$$

or

$$\frac{\Delta t}{\alpha\rho} \Delta \varphi^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (14)$$

→ dérivée seconde tangentielle à la limite

$$\left(\frac{\Delta t}{\alpha\rho} \partial_y^2 - \frac{1}{\mu} \right) \varphi^{n+1} = -\frac{\varphi^n}{\mu} + \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (15)$$

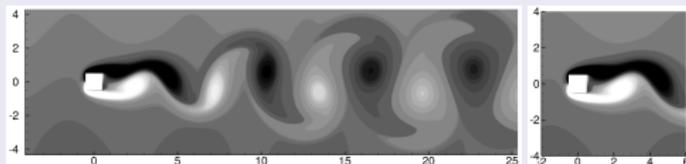


A. POUX, S. GLOCKNER, M. AZAIEZ, Improvements on open and traction boundary conditions for Navier–Stokes time-splitting methods, *Journal of Computational Physics*, vol. 230, pp. 4011-4027, 2011.

Vérification - convergence spatio-temporelle

		<i>Méthode incrémentale standard</i>				<i>Méthode rotationnelle</i>			
		Espace		Temps		Espace		Temps	
		\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p	\mathbf{v}	p
<i>CL Dirichlet</i> :	$\partial_n \varphi = 0$	2	2	2	3/2	2	2	2	2
<i>CL Standard</i> :	$\varphi = 0$	1	1/2	3/2	1/2	2	2	3/2	1
Proposition :	$\varphi = \varphi^*$	2	2	2	3/2	2	2	2	2

Validation - écoulement inst. autour d'un cylindre - $Re=100$



	St	C_{Dm}	C_{Lm}
Sohankar (1998)	0.146	1.46	0.139
Pavlov (2000)	0.150	1.51	0.137
Pontaza (2006)	0.140	1.48	0.141
Extrapol. 2nd ordre en temps	0.147166	1.478739	0.142647

- 1 Quelques éléments introductifs
- 2 Contexte logiciel
- 3 Autour des maillages
 - Partitionnement de maillages multiblocs conformes*
 - Raccordement de maillages non conformes*
- 4 Conditions aux limites de sortie
- 5 De l'intérêt du calcul massivement parallèle - déferlement des vagues
- 6 Autour des interfaces
 - Méthode des frontières immergées*
 - Calcul des forces de tension de surface*
 - Optimisation de la reconstruction d'interfaces*
 - Ligne triple*

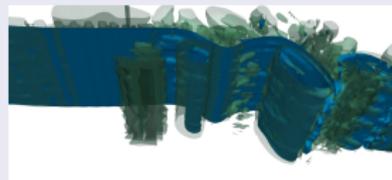
Déferlement (P. Lubin) : pourquoi avoir recours au calcul intensif ?

- Retournement d'une onde sur elle-même, éjection d'un jet impactant la face avant de la vague
- Génération d'un jet secondaire (splash-up)
- Entraînement de l'air dans l'eau, génération de turbulence
- Écoulement turbulent, au large spectre d'échelles spatio-temporelles
- Instrumentation compliquée
- Plusieurs types de macro-structures cohérentes, identification incomplète



Point de départ - 2005

- **1 processeur, 300 000 points, 3 mois de calcul !**
→ besoin de calcul massivement parallèle



2013 → Simulations de 600 millions de points sur Curie (TGCC)
8 192 processeurs, 5 jours

Identification de nouvelles structures

- Visualisation exploratoire pour l'identification de fins filaments aérés
- Structures tourbillonnaires aérées dans la direction de l'écoulement
- Ces filaments s'étirent et connectent le splash-up au rouleau
- Isolation d'un filament pour étudier le mécanisme de génération
- Étude paramétrique de différentes conditions de déferlement



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, pp. 364-393, selected as cover, 2015.

Se fixer de nouveaux objectifs

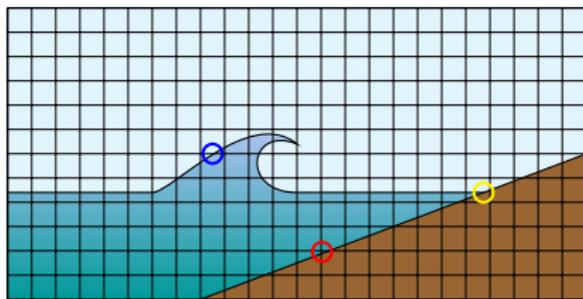
- **Augmenter l'amplitude de l'onde**
- Passage à des **géométries réelles** (plages, rivières)
- Rôle des forces de **tension de surface**

Bilans

- *Bilan de Thétis*
- *Bilan des projets de l'équipe*
 - Étude d'écoulements environnementaux (déferlement, mascaret)
 - Étude du microclimat dans les grottes ornées
 - Écoulements en milieux supercritiques
 - Mise en forme de matériaux, stockage de chaleur
- → Besoin d'améliorer nos méthodes pour les interfaces

De nouveaux projets depuis 2014

- → **3 post-docs Cluster CPU IdEX U-Bordeaux 2014-2016**
 - Tensions de surface (M. Coquerelle)
 - Reconstruction d'interfaces (A. Lemoine)
 - Frontières immergées (J. Picot)
- → **un nouveau code**



Interfaces

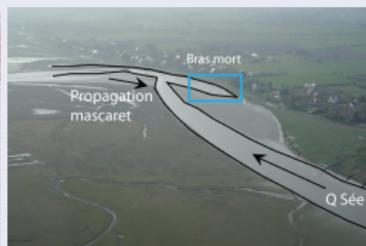
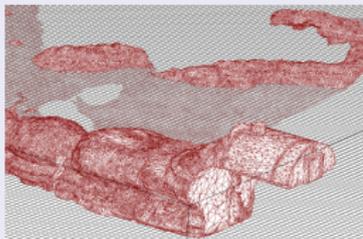
- Fluide / Fluide : advection, force de tension de surface
- Fluide / Solide : frontières immergées
- Ligne triple

Méthodes au 2nd ordre ? Efficaces ?

- Quelle représentation de l'interface ?
- Existe-t-il une méthode "idéale" à la fois pour l'advection, la conservation de la masse, le calcul de courbure ?
- Méthode des frontières immergées au 2nd ordre : efficace, couplage avec l'advection ?
- → Travaux dans plusieurs directions

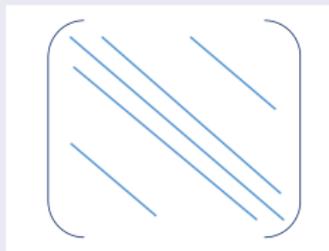
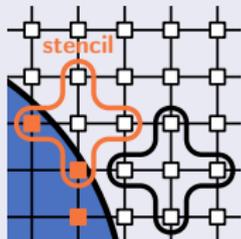
Plonger des objets de forme quelconque dans un maillage cartésien

- Étude du microclimat dans les grottes ornées (D. Lacanette)
- Déferlement sur plage, mascaret (P. Lubin)



Motivations / objectifs

- Éviter les maillages non-structurés plus complexes
- Utiliser les solveurs itératifs les plus performants
- Convergence au 2nd ordre **Stencils compacts (9/27 pts en 2D/3D)** → **Matrice à bandes**



Forçage direct

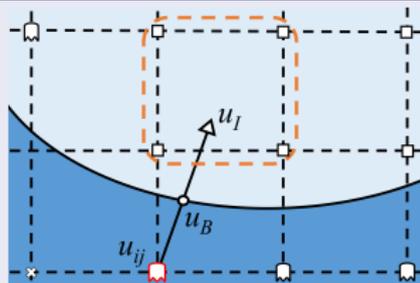
- **Extrapolation** des solutions sur les nœuds fantômes **compatible avec les conditions aux limites (Dirichlet/Neumann)**

Méthode linéaire: Mittal [JCP2008]

Relation linéaire entre le point fantôme et le point image

→ **stencil de taille ≥ 2**

$$\frac{u_{ij} + u_l}{2} = u_B + O(h^2)$$

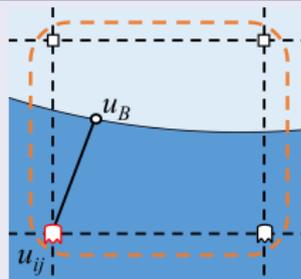


Méthode directe : Coco [JCP2013]

Utilisation de la condition à la limite en x_B

→ **stencils plus compacts ≥ 1**

$$\sum_{k,l \in I_A} \beta_{k,l} u_{k,l} = u_B + O(h^2)$$

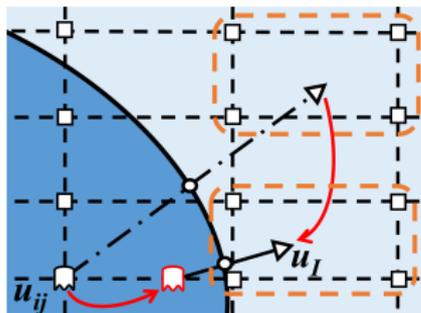


Compatibilité avec les grilles rectangulaires

- **La taille du stencil augmente avec le ratio des pas d'espace**
 - Perte de précision
 - Utilisation de solveurs moins performants (algébrique vs. géométrique)
 - Méthode directe (Coco) non utilisable

→ Méthode du décalage du point fantôme

- **Décaler le point fantôme vers la limite**
 - Même stencil qu'avec des cellules carrées
 - Méthode directe utilisable
 - **Stencil compact** : ordre 2 pour Dirichlet, 1 pour Neumann



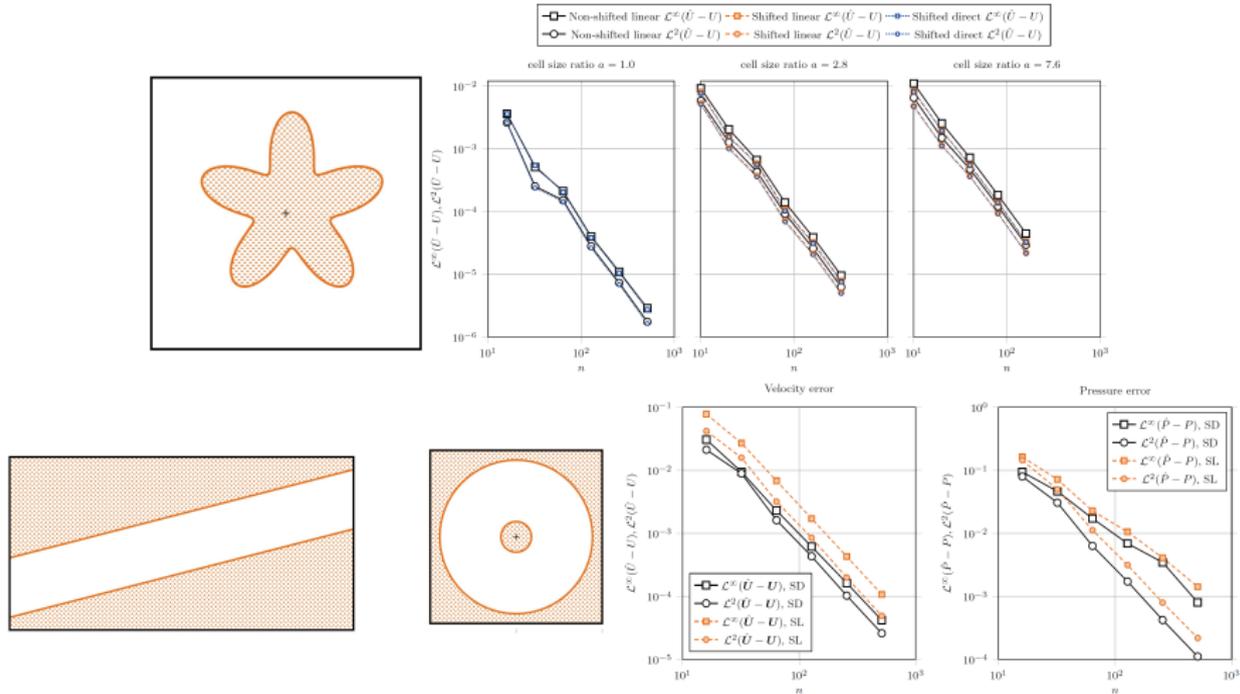
<i>Ratio des pas d'espace</i>	<i>Méthode</i>	<i>Dirichlet</i>	<i>Neumann</i>
1	Linéaire	2	3
	Directe	1	2
> 1	Linéaire	$\lceil 2a \rceil$	$\lceil 2a \rceil + 1$
	Directe	NA	NA
> 1	Décalage (linéaire)	2	3
	Décalage (directe)	1	2



J. PICOT, S. GLOCKNER, Discretization stencil reduction of direct forcing immersed boundary methods on rectangular cells: the ghost node shifting method, *Journal of Computational Physics*, vol. 364, pp. 18–48, 2018.

Vérification

- *Laplacien* : formes de cercle, fleur, Dirichlet & Neumann (2nd ordre, plus précis)
- *Navier-Stokes* : écoulements de Couette et de Poiseuille

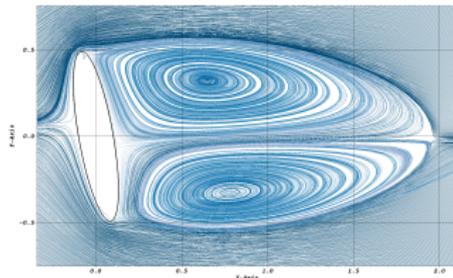
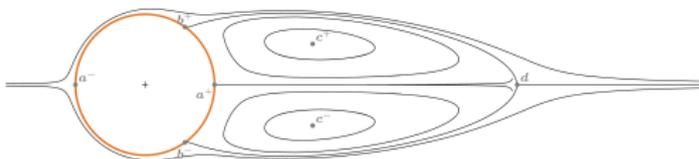


Validation

- Écoulements autour de cylindres de section circulaire ($Re=40$) et elliptique ($Re=20$)

Référence	ℓ/d	a/d	b/d	θ	C_D
Coutanceau (exp. 1977)	2.13	0.76	0.59	53.5	—
Linnick (ordre élevé 2005)	2.28	0.72	0.60	53.6	1.54
Le (immersed 2006)	2.22	—	—	53.6	1.56
Taira (immersed 2007)	2.30	0.73	0.60	53.7	1.54
Notus linéaire/directe	2.27	0.72	0.59	53.1	1.56

Référence	C_D	C_L
Dennis and Young	2.116	0.256
D'alesio and Dennis	2.089	0.255
Yoon et al.	2.102	0.252
Notus linéaire/directe	2.130	0.246



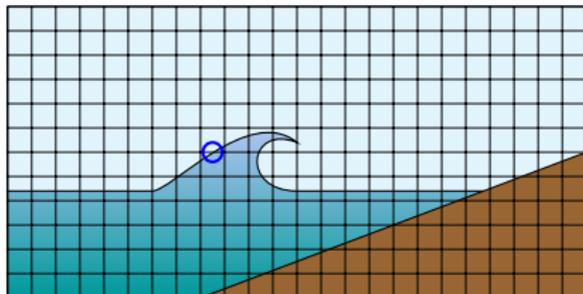
Cas test de la “fleur”, CL de Dirichlet

- Hypre GMRES, tolérance 10^{-10}
- **Méthode directe** : préconditionneur **multigrille géométrique** SMG
- **Méthode linéaire** : préconditionneur **multigrille algébrique** BoomerAMG
- **SMG 4x plus rapide que BoomerAMG**

→ Intérêt de combiner une recherche alliant performances et méthodes numériques précises

Perspective : optimisation et solveurs dans Notus

- “Notus” est parfaitement scalable sur 64000 cœurs (Blue Gene)
 - 80% du temps de calcul → solveurs
 - Bibliothèques extérieures pas toujours optimisées - généralistes - maillages non-structurés
 - *Optimisation du code* dans son ensemble : MPI / Open MP / Vectorisation
- **projet ANR Superfon (A. Erriguible), WP3 (avec A. Lemoine), stage I. Daoudi, post-doc A. Jost (sept. 2018)**



Interfaces

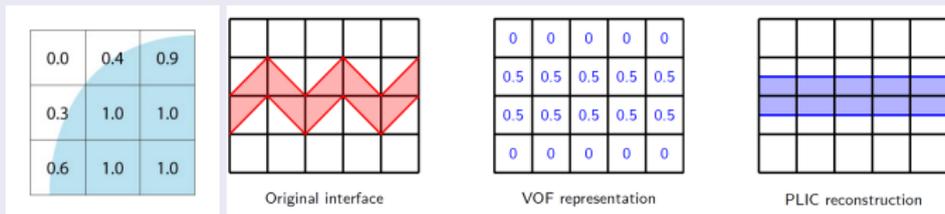
- Fluide / Solide : frontières immergées
- **Fluide / Fluide** : **représentation, advection**, force tensions de surface
- Ligne triple

→ Représentation de l'interface

- **Volume-of-Fluid & Moment-of-Fluid**
- Level-set

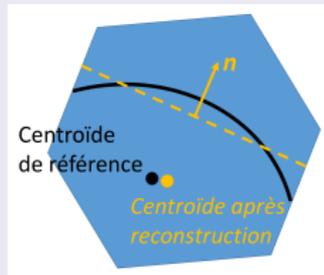
Volume-of-Fluid - PLIC

- Fraction volumique + **normale** à l'interface
→ reconstruction **linéaire** de l'interface dans la maille
- Nécessite un **stencil à 9 points** (2D)
- Conservatif



Moment-of-Fluid = Fraction volumique + **centroïde**

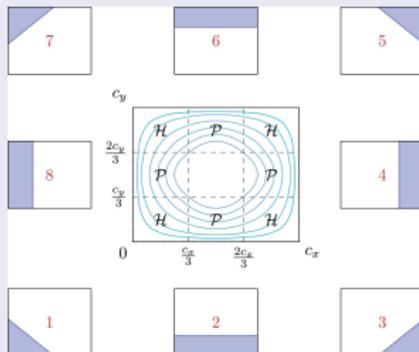
- Conserve la fraction volumique
- Minimise la distance entre les centroïdes de référence et reconstruits
- Propriétés
Stencil = 1 cellule !
ordre 2
2D/3D



d'après Dyadechko & Shashkov (JCP 2006)

Question : comment optimiser la méthode pour des mailles rectangulaires ?

- Pour une fraction volumique donnée, expression analytique des lieux des centroïdes possibles

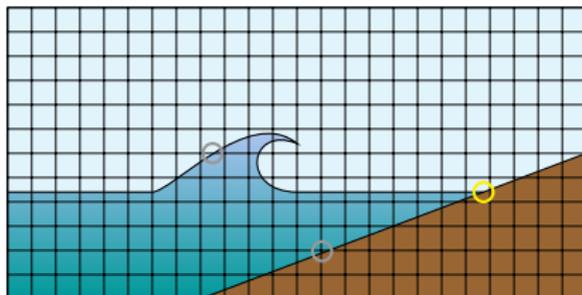


→ Suppression de la minimisation pour les mailles rectangulaires

- Centroïde approché = le point le plus proche du centroïde de référence
- → normale → reconstruction
- Résultat : de 20% à 300% plus rapide que l'algorithme initial



A. LEMOINE, S. GLOCKNER, J. BREIL, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 2D Cartesian Grids, *Journal of Computational Physics*, vol. 328, pp. 131–139, 2017.



Interfaces

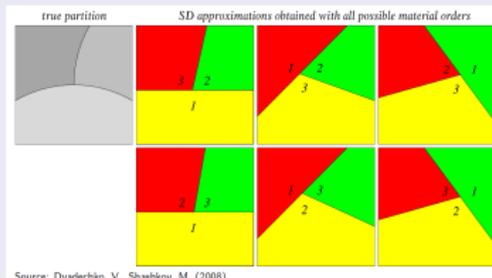
- Fluide / Solide : frontières immergées
- Fluide / Fluide : advection
- **Ligne triple**

→ Reconstruction linéaire d'une interface dans une maille partiellement solide

Couplage entre Moment-of-Fluid & Frontières immergées

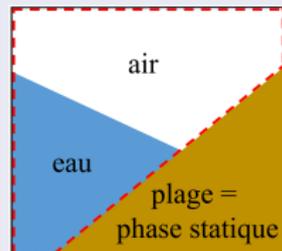
Méthode pour des cellules quelconques → généralisation à n matériaux

- **Importance de l'ordre de reconstruction**
- Reconstruire toutes les configurations
- Solution : minimise la *somme* des erreurs sur les centroïdes
- Solution exacte pour la *première* reconstruction seulement



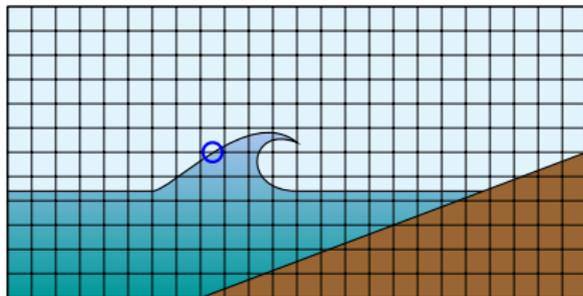
Couplage avec les frontières immergées

- 3 phases dans une maille : eau & air et solide (plage)
- → Considérer le solide comme une **phase statique**
- → Reconstruire l'interface air/eau dans le volume restant



Questions associées

- Advection, CL sur la vitesse..., capillarité...



Interfaces

- Fluide / Solide : frontières immergées
- **Fluide / Fluide : advection, force de tension de surface**
- Ligne triple

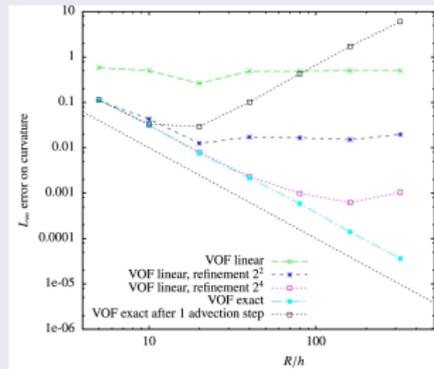
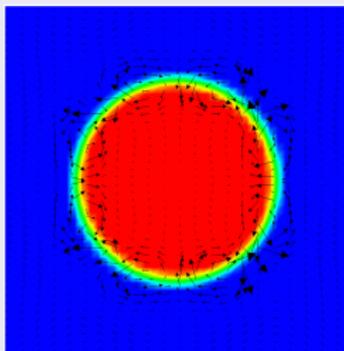
→ Représentation de l'interface

- Volume-of-Fluid & Moment-of-Fluid
- → **Level-set**

Contexte

- Modèle 1-fluide, **Continuum Surface Force [Brackbill]** $\rightarrow \sigma \kappa \nabla C$
- Calcul imprécis de κ \rightarrow courants parasites
- **Cas test d'un disque de fluide advecté** (équilibre forces de pression / tension de surface)

\rightarrow Volume-of-Fluid $\rightarrow 2^{nd}$ ordre \rightarrow pas de convergence



\rightarrow **Transport précis au moins au 4^{eme} ordre**

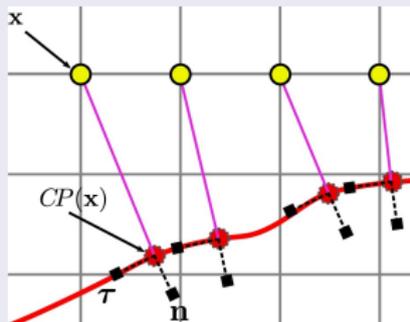
Représentation de l'interface par une méthode Level-set

Transport de la Level-set par WENO(5)

Principe

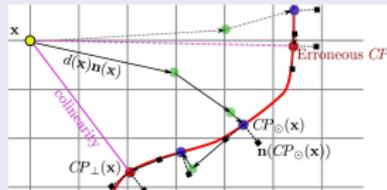
- Modèle 1-fluide, **Continuum Surface Force [Brackbill]** $\rightarrow \sigma \kappa \nabla C$
- $\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \right)$ sur des nœuds où κ n'est pas définie
- κ dans le domaine = κ sur le point le plus proche de Γ [Hermann JCP2008]
- \rightarrow **Extension de la courbure dans la direction normale à l'interface**

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



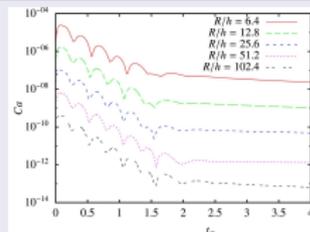
Contribution

- Recherche du Closest Point par algorithme de Newton
- Après advection, Level-set \neq fonction distance (redistanciation coûteuse)
- Perte de la **colinéarité à la normale à l'interface**
- \rightarrow Amélioration de l'algorithme de recherche de CP



Résultats

- Équilibre d'un disque : décroissance des courants parasites à l'ordre 4
- **Advection** d'un disque : ordre 4 (< 1 pour méthodes VOF)



Mais...

- Redistanciation... Connection d'interface... Conservation de la masse...

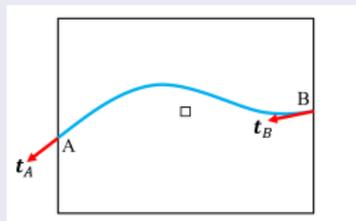


M. COQUERELLE, S. GLOCKNER, *A fourth-order accurate curvature computation in a level set framework for two-phase flows subjected to surface tension forces*, Journal of Computational Physics, vol. 305, pp. 838-876, 2015.

Utilisation de la relation de Frenet

- Intégrale de la force de tension de surface sur une portion de courbe

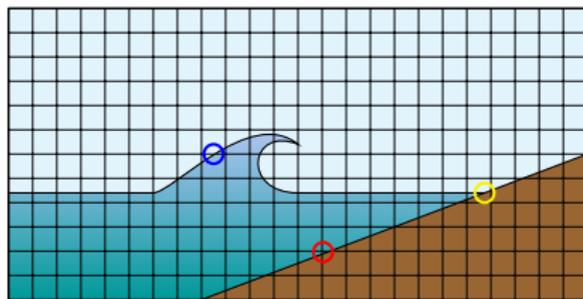
$$\int_A^B \sigma \kappa \mathbf{n} ds = \int_A^B \sigma d\mathbf{t} = \sigma(\mathbf{t}_B - \mathbf{t}_A)$$



- Pas de calcul de courbure
- Intéressant dans le cadre des volumes finis
- Utilisée dans le cadre des méthodes de front-tracking (récemment avec Level-Set)

Non convergence en espace avec VOF-PLIC → monter en ordre (Level-set)

- Couplage MOF/Level-set
MOF pour la conservation
Level-set pour la courbure



Les difficultés convergent vers la ligne triple...

Objectifs

- Petites échelles
→ impossible de descendre aux plus petites échelles dans une simulation NS 3D
- Approche macro/micro
- Mise en place d'un **cadre évolutif et comparatif de méthodes adéquates**
- Parois "parfaites", isothermes
- → Prise en compte de la **dynamique de la ligne triple**

Glissement de la ligne triple $Ca < 0.1$

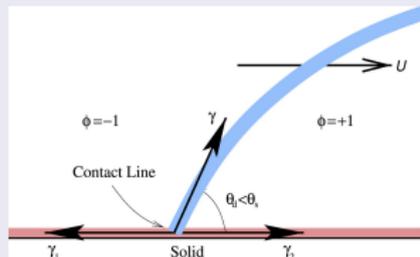
- Dynamique moléculaire [Qian et al. (Phys. Rev. E 2008)]
→ **Condition Limite Généralisée de Navier (GNBC)**

$$\beta v_{slip} = \tau_{wall}^{visc} + \tilde{\tau}^{Young}$$

$$\int_{int} \tilde{\tau}^{Young} dx = \gamma (\cos \theta_s - \cos \theta_d)$$

→ Force de rappel vers l'équilibre
 θ_d^{micro} ?

- Méthode phase field [Qian et al.]
- Méthode sharp [Ren & E (Phys. Fluids 2007)]
- Front-tracking** [Yamamoto et al. (IJMF2013)]



Qian 2010

Multiéchelles → approche *macro-micro*

- Loi de Cox $\theta_s < 3\pi/4$

$$(\theta_d^{micro})^3 = (\theta_d^{macro})^3 - 9Ca \ln \left(\frac{l_{macro}}{l_{micro}} \right)$$

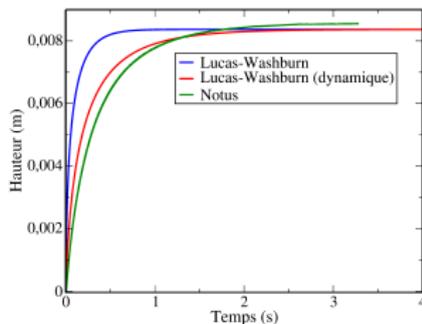
- macro = échelle de la grille → $l_{macro} = h$

Montée capillaire entre 2 plans (5mm)

- $\theta_s = 15^\circ$, Ethylène glycol ($\rho = 1000$, $\mu = 0.02$, $\gamma = 48.6$)
- Loi de Lucas-Washburn **modifiée**
- capture de la dynamique (régimes inertiel, visco-inertiel, visqueux, gravitationnel, équilibre)

Perspectives

- Montée dans un tube axisymétrique
- Comparaison avec d'autres approches (NBC)
- Validation sur d'autres configurations (goutte)
- $Ca > 0.1$?
- Extension à level-set, MOF, frontières immergées
- Généralisation à des géométries plus complexes



Dynamique récente autour des interfaces à poursuivre

- Quelques travaux méthodologiques entrepris et publiés
- Potentiel à exploiter / croisement de méthodes
- → **Vers une version 1.0.0 de Notus plus aboutie d'ici 2/3 ans**
- Meilleure maîtrise "réelle et appliquée" des méthodes au regard des enjeux de mécanique des fluides de l'équipe

Sans perdre de vue les applications

- Écoulements en milieux supercritiques
- Étude du micro-climat dans les grottes ornées
- Mascaret en rivière (prise en compte de la bathymétrie, berges)
- Changement d'état franc liquide/solide
- Écoulements atmosphériques : lois de paroi turbulentes pour les frontières immergées

À plus long terme

- Multiéchelle → **raffinement de maillage**
- Schémas d'ordres plus élevés ?
- **Consortium** autour de Notus