

Mémoire scientifique
présenté à

L'UNIVERSITÉ DE BORDEAUX
ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR

STÉPHANE GLOCKNER
Ingénieur de Recherche à Bordeaux-INP

pour l'obtention de
L'HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES
SPÉCIALITÉ : MÉCANIQUE

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

Soutenue le : 5 juin 2018

Après avis de :

MM.	Frédéric Hecht	Professeur, Université Pierre et Marie Curie, Paris	Rapporteur
	Mario Ricchiuto	Directeur de recherche, INRIA Bordeaux Sud-Ouest	Rapporteur
	Jie Shen	Professeur, Purdue University	Rapporteur

Devant la commission d'examen composée de :

MM.	Mejdi Azaiez	Professeur, Bordeaux-INP	Examineur
	Georges-Henri Cottet	Professeur, Université Joseph Fourier, Grenoble	Président
	Frédéric Hecht	Professeur, Université Pierre et Marie Curie, Paris	Rapporteur
	Pierre Lubin	Professeur, Bordeaux-INP	Examineur
	Mario Ricchiuto	Directeur de recherche, INRIA Bordeaux Sud-Ouest	Rapporteur
	Jie Shen	Professeur, Purdue University	Rapporteur

Table des matières

Introduction	5
1 Curriculum Vitæ	7
1.1 Parcours professionnel	7
1.2 Responsabilités collectives	7
1.3 Formation	8
1.4 Prix	8
1.5 Encadrements	8
1.6 Projets financés	8
1.7 Publications	8
2 Synthèse des responsabilités, des activités de recherche et d’encadrement	11
2.1 Responsabilités collectives	11
2.2 Projets de recherche financés	11
2.3 Projets (collaboratifs) de logiciels	13
2.4 Collaborations	14
2.5 Encadrements	14
2.6 Activités d’enseignement	17
2.7 Activités d’expertise	17
3 Synthèse des travaux de recherche	19
3.1 Contexte logiciel	21
3.1.1 Projet Aquilon/Thétis [2003-2015]	21
3.1.2 Projet Notus [depuis 2015]	22
3.1.3 <i>Corpus</i> des méthodes numériques	23
3.2 Simulations parallèles et solutions de référence	25
3.2.1 Contexte	25
3.2.2 Écoulements environnementaux	25
3.2.3 Benchmarks et solutions de référence	28
3.3 Partitionnement de maillages multiblocs conformes	39
3.3.1 Contexte	39

3.3.2	Partitionnement de maillages monoblocs	40
3.3.3	Partitionnement de maillages multiblocs	45
3.4	Raccordement de maillages non conformes	53
3.4.1	Contexte	53
3.4.2	Méthode de lagrangien augmenté	53
3.4.3	Méthode de correction de pression	56
3.5	Méthodes des frontières immergées pour la prise en compte de géométries complexes	59
3.5.1	Contexte	59
3.5.2	Frontières immergées et maillages rectangulaires	60
3.5.3	Résultats sur l'équation de Poisson	64
3.5.4	Extension aux équations de Navier-Stokes	67
3.6	Conditions aux limites de sortie	69
3.6.1	Contexte	69
3.6.2	Amélioration des ordres de convergence	69
3.6.3	Convergence en espace ($\omega = 0$)	73
3.6.4	Convergence en temps	73
3.6.5	Extension des travaux à la méthode de correction de vitesse	74
3.7	Interfaces fluide/fluide	77
3.7.1	Contexte	77
3.7.2	Calcul de la courbure pour l'estimation des forces de tension de surface, approche level-set	78
3.7.3	Méthode Moment-of-Fluid sur des maillages cartésiens	81
3.8	Conclusion générale et perspectives	87

4 Liste des publications et communications 91

Introduction

Ce mémoire a pour objectif de présenter mes activités de recherche, d'encadrement et d'administration depuis ma prise de fonction en 2003, comme Ingénieur de Recherche à Bordeaux INP (ENSCBP), affecté à l'UMR CNRS 8508 TREFLE, devenue Institut de Mécanique et d'Ingénierie - Bordeaux (UMR CNRS 5295), au sein de l'équipe de recherche Mécanique des Fluides Numérique.

Cette équipe aborde la mécanique des fluides exclusivement par la voie de la simulation numérique. Elle regroupe des projets alliant modélisation, développement de méthodes numériques et simulations massivement parallèles. Trois champs applicatifs sont abordés : les écoulements de fluides supercritiques, les écoulements environnementaux, les matériaux. Ils reposent sur une interaction forte entre mécaniciens/thermiciens et numériques, ainsi que sur le développement d'outils et de méthodes numériques adaptées. Au titre de responsable de cette équipe depuis 2009, je cherche à renforcer et développer les synergies entre les thématiques, les chercheurs, les projets de logiciels (Thétis et Notus) et les moyens matériels (un supercalculateur), dans le but de répondre à des enjeux de mécanique des fluides complexes et actuels, et de faire de la simulation numérique un outil d'expérimentation et d'exploration fiable et efficace.

Dans ce mémoire, j'ai fait le choix de synthétiser mes travaux de recherche, afin d'en faciliter la lecture et l'analyse, pour juger de mon expérience dans l'animation d'une recherche, conformément aux textes en vigueur. Les articles les plus représentatifs de mes travaux figurent en annexe et permettent, si besoin est, une lecture plus détaillée.

Le document est organisé autour des cinq sections suivantes :

- un curriculum vitæ ;
- une synthèse des responsabilités, des activités de recherche et d'encadrement ;
- une synthèse des travaux de recherche ;
- une liste des publications et communications ;
- les principales publications *in extenso*.

L'aboutissement d'un travail de recherche est un processus fin, complexe, personnel mais aussi collaboratif, nécessitant une prise de risque, de la ténacité et aussi beaucoup d'énergie. J'ai toujours travaillé avec des enseignants-chercheurs, des doctorants ou des post-doctorants, et j'ai participé à des projets de recherche portés aussi bien par moi-même que par des collègues. Ces travaux sont d'abord le fruit d'intuitions et d'idées, puis s'inscrivent dans une démarche de leurs approfondissements et de leurs mises en œuvre associées à une validation exigeante et à la rédaction d'articles rigoureux. Ces étapes sont au cœur de ma conception de la recherche et sont aussi force de motivation. Ma contribution personnelle porte, selon les travaux, plus particulièrement sur certains points, mais de manière globale sur l'ensemble des étapes que je viens d'évoquer. C'est aussi une démarche que j'ai essayée d'inculquer aux étudiants et post-doctorants avec lesquels j'ai travaillé.

1 Curriculum Vitæ

Né le 9 juin 1971 à Limoges, marié, un enfant.

I2M

16, av. Pey-Berland

33 607 Pessac Cedex

Tél : 05 40 00 66 82

E-mail : glockner@bordeaux-inp.fr

Page professionnelle : <https://notus-cfd.org/glockner>

1.1 Parcours professionnel

2003- Ingénieur de Recherche en Calcul Scientifique à Bordeaux INP / ENSCBP, en fonction à l'Institut de Mécanique et d'Ingénierie - Bordeaux (I2M), département Fluides et Transferts (TREFLE), équipe Mécanique des Fluides Numérique (MFN) :

— 2011, IR 1ère classe (examen professionnel national, 5/127) ;

— 2015, IR hors classe (examen professionnel national, 26/65).

2001-2003 Ingénieur post-doctorant, société GERTRUDE (Bordeaux) ;

1997-2000 Ingénieur doctorant, bourse CIFRE, société GERTRUDE et laboratoire TREFLE (Université Bordeaux 1).

1.2 Responsabilités collectives

2017- Porte-parole du groupe technique en charge de l'appel d'offre du renouvellement du supercalculateur du Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain MCIA ;

2015- Responsable du logiciel de mécanique des fluides Notus ;

2010- Membre des comités scientifique et technique du MCIA ;

2009- Responsable de l'équipe de recherche MFN du département TREFLE de l'I2M (11 permanents, une dizaine de doctorants/post-doctorants) ;

2009- Membre du conseil scientifique du département TREFLE de l'I2M ;

2008- Correspondant technique des centres de calcul GENCI ;

2008-2015 Co-responsable du logiciel de mécanique des fluides Thétis.

1.3 Formation

1997-2000 Doctorat en mécanique, Université Bordeaux 1 : « contribution à la modélisation de la pollution atmosphérique dans les villes », soutenue le 14 déc. 2000 devant un jury composé de :

- P. Morel, Professeur, Université Bordeaux 1, Président
- E. Villenave, Maître de Conférence, Université Bordeaux 1, Examineur
- G. Lauriat, Professeur, Université de Marne-la-Vallée, Rapporteur
- Y. Brunet, Directeur de Recherche, INRA-Bordeaux, Rapporteur
- J-P. Caltagirone, Professeur, Université Bordeaux 1, Directeur
- F. Fournier, Ingénieur société GERTRUDE, Examineur

1994-1997 Magistère Matméca, Université Bordeaux 1 ;

1997 DEA de Mécanique, Université Bordeaux 1.

1.4 Prix

Prix mésochallenge 2014 (avec P. Lubin) : simulation 3D du déferlement de vagues, Journée Mésochallenges, 9 sept. 2014, Institut Henri Poincaré, Paris.

1.5 Encadrements

- (Co-)directeur de 4 thèses de doctorat, soutenues en 2006 et 2012, 2017, une en cours ;
- (Co-)responsable de 4 post-doctorants, 2009-10, 2015, 2016 ;
- (Co-)responsable de 2 ingénieurs, 2009-10 et 2013.

1.6 Projets financés

- Porteur de projets Région Aquitaine (1), PRACE (2), Carnot MIB (1), IdEx Cluster CPU (2) ;
- Participations à des projets Région Aquitaine (3), ANR (3), GENCI (3), IdEx (1), Européens (1).

1.7 Publications

19 articles dans des revues int. de rang A. 5 articles les plus significatifs :

- 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*, 364, pp18–48, 2018.
 → Une méthode pour le traitement des frontières immergées au stencil de discrétisation compact.
- A. Lemoine, S. Glockner, J. Breil, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 2D Cartesian Grids, *Journal of Computational Physics*, 328, pp131–139, 2017.
 → Optimisation de la méthode Moment-of-Fluid pour les maillages cartésiens (30 à 200 % plus rapide grâce à la suppression d’une étape de minimisation).
 - 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*, 305, pp. 838-876, 2015.
 → Amélioration de la méthode Closest-Point pour le calcul de la courbure d’une interface représentée par une fonction Level-Set. Passage de l’ordre 2 à l’ordre 4 en espace.
 - P. Lubin, S. Glockner, Numerical simulations of three-dimensional plunging breaking waves : generation and evolution of aerated vortex filaments, *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 767, pp 364-393, selected as cover, 2015.
 → Mise en évidence, dans le déferlement, de fins filaments de Vortex grâce au calcul massivement parallèle.
 - A. Poux, S. Glockner, M. Azaiez, Improvements on open and traction boundary conditions for Navier-Stokes time-splitting methods, *Journal of Computational Physics*, 230, pp4011-4027, 2011.
 → Augmentation des ordres de convergence sur la vitesse et la pression de la méthode de correction de pression dans le cadre de conditions aux limites ouvertes.

27 communications diverses. 3 com. les plus significatives (orateurs en italique) :

- P. Lubin, S. Glockner, Simulation 3D du déferlement de vagues, *Journée Mésochallenges 2014* et prix associé, Institut Henri Poincaré, Paris, 2014.
 → Présentation des simulations massivement parallèles du déferlement des vagues (filaments de vortex).
- S. Glockner, P. Lubin, Évolutions d’un solveur Navier-Stokes massivement parallèle pour la simulation du déferlement de vagues, *Journée Succès*, Institut de Physique du Globe de Paris, nov. 2013.
 → Présentation des travaux et de l’évolution du code de calcul, de 1 à 8192 processeurs, application au déferlement des vagues.
- S. Glockner, E. Ahusborde, Multiphase flow simulations in a block-structured framework, Conférence invité, *High Accuracy Flow Simulations*, EPFL, Lausanne, 2010.
 → Présentation d’un partitionneur de maillages multiblocs minimisant les échanges entre processeurs et vérifiant l’équilibre des charges.

h-index (Scopus) : 10

2 Synthèse des responsabilités, des activités de recherche et d'encadrement

2.1 Responsabilités collectives

- Responsable de l'équipe de recherche Mécanique des Fluides Numérique du département TREFLE de l'I2M, depuis septembre 2009 ;
- Membre des comités scientifiques et d'utilisateurs du mésocentre MCIA de l'Université de Bordeaux, depuis 2010 ;
- Porte-parole du groupe technique en charge de l'appel d'offre du renouvellement du supercalculateur du MCIA, depuis 2017 ;
- Correspondant technique des centres de calcul GENCI, depuis 2008 ;
- Membre du Conseil de Département TREFLE de l'I2M, depuis 2009 ;
- Responsable du projet Notus (<https://notus-cfd.org>), depuis 2015 ;
- Co-responsable du projet Thétis, 2008-2015.

2.2 Projets de recherche financés

Projets en cours

- ANR Superfon « Sustainable SUPERcritical Processing of Fluorescent Organic Nanocrystals through a complementary experimental and numerical approach ». Responsable du Work Package WP3 *Modelling and simulation of the SAS process in microfluidic device and at larger scale*, encadrement (50%) avec A. Lemoine (I2M) d'un post-doctorat en cours de recrutement.

Projets achevés

- Cluster CPU de l'IdEx de l'Université de Bordeaux « Adaptation et optimisation de la méthode Moment-of-Fluid aux maillages cartésiens ». Porteur du projet, encadrement (75%) avec J. Breil (CEA/CELIA) du post-doctorat d'Antoine Lemoine, 2015-2016. Production scientifique : une publication, un congrès international, deux conférences invitées.
- Cluster CPU de l'IdEx de l'Université de Bordeaux « Méthode des frontières immergées sur des maillages cartésiens irréguliers ». Porteur du projet, encadrement (100%) du post-doctorat de Joris Picot, 2016. Production scientifique : une publication, une conférence invitée.
- MicroPaGO de l'IdEx de l'Université de Bordeaux « Restitution microclimatique et morphologique des conditions de réalisation des œuvres pariétales d'une grotte ornée de Dordogne (Lascaux) ».

- Participation au projet porté par D. Lacanette (I2M), 2014-2015. Encadrement (75%) avec T. Milcent (I2M) du post-doctorat de J. Picot sur les frontières immergées.
Production scientifique : un congrès international avec actes, deux séminaires.
- Cluster CPU « Ocean surface waves attenuation by falling rain : Modelling, Numerical Simulations and Laboratory data analysis ».
Porteur avec P. Lubin (I2M), partenaires : Institut de Mathématiques de Bordeaux, University of Delaware (2013). Encadrement (100%) du post-doctorat de M. Coquerelle sur les tensions de surface, 2014-2015.
Production scientifique : une publication.
 - Région Aquitaine « CIME calcul intensif pour les matériaux et l’environnement ».
Porteur du projet de l’équipe MFN, renouvellement du supercalculateur (300 k€) et encadrement (50%) en collaboration avec N. Audiffren (CINES) de H. Ouvrard (ingénieur), 2012-2015.
 - PRACE Sixth Regular Call RA1229 (10 millions d’heures de calcul), « Massively Parallel Navier-Stokes Solver for Breaking Waves ».
Porteur du projet, réalisation des travaux de recherche avec Pierre Lubin (I2M) sur le déferlement des vagues, 2013.
Production scientifique : une publication, un congrès international, une conférence invitée.
 - ANR « MASCARET - Étude hydro-sédimentaire des mascarets par mesures in situ, études physiques de laboratoires et simulations numériques ».
Participation au projet porté par P. Lubin (I2M), partenaires : Institut Pprime de Poitiers, Laboratoire M2C de Caen, University of Queensland, 2010-2014.
Production scientifique : une publication, deux congrès avec actes.
 - GENCI, participation depuis 2009 à plusieurs dotations de millions d’heures de calcul. (projet x2012026104, 2009-2016 : « Simulation numérique d’écoulements environnementaux diphasiques turbulents - application au déferlement des vagues et aux mascarets » ; projet x2009026115, S. Vincent, 2006-2014 : « Simulation numérique d’écoulements turbulents en interaction avec des interfaces » ; projet c20142b6393, C. Le Bot, 2011-2014-2016 : « Simulation numérique de la sédimentation d’une particule avec prise en compte du changement de phase »).
 - PRACE, accès préparatoire « MAPAW - Massively Parallel Navier-Stokes Solver for air/water environmental flows » PRACE-RI (Partnership for Advanced Computing in Europe Research Infrastructure) : Preparatory access PA0937 (250 000 heures de calcul), 2012.
Porteur du projet, en collaboration avec le CINES (N. Audiffren), un rapport technique.
 - Région Aquitaine dans le cadre du Réseau de Recherche Littorale Aquitain « AE-CEG : Approche de l’Évolution Contemporaine de l’Estuaire de la Gironde sous modifications des forçages hydroclimatiques et des contraintes anthropiques » - sous la coordination d’A. Sottolichio (EPOC - Université Bordeaux 1).

- Participation au second volet, porté par P. Lubin (I2M) : « Les mascarets d'Aquitaine : conditions d'existence, processus et impacts », 2009-2012.
Production scientifique : trois publications.
- Carnot-MIB « Simulations numériques intensives : I/O, visualisation et parallélisation ». Porteur du projet, encadrement (100%) du post-doctorat d'E. Ahusborde, 2009-2010 ;
Production scientifique : deux publications.
 - Européen « Tsunami Risk ANd Strategies For the European Region » - partenaire du Laboratoire des Sciences Appliquées au Génie Civil et Côtier (LaSAGeC2) de Pau.
Participation à la réalisation de simulations numériques, 2006-2009.
Production scientifique : une publication, une communication avec actes.
 - ANR « Simulation, Turbulence et Interfaces ».
Projet porté par J.P. Caltagirone (I2M), aide à la réalisation de simulations numériques, parallélisation du code, 2006-2009.
 - Région Aquitaine dans le cadre du Réseau de Recherche Littorale Aquitain « Qualité des espaces littoraux en Aquitaine et Pays Basque espagnol : flux de contaminants et évolution du trait de côte ».
Projet sous la coordination de P. Maron (LaSAGeC2 - Université de Pau et des Pays de l'Adour), 2006-2009.
Aide à la réalisation de simulations numériques. Production scientifique : 1 publication, 2 communications avec actes.
 - Région Aquitaine « Simulations numériques appliquées à la rentrée atmosphérique des engins spatiaux et aux écoulements turbulents diphasiques industriels et environnementaux ».
Projet de l'équipe MFN porté par M. Azaiez pour le renouvellement du supercalculateur (600k€), co-rédaction du projet, 2006-2008.

2.3 Projets (collaboratifs) de logiciels

- **Aquilon/Thétis : 2003-2015**
 - Recherche et développement de méthodes numériques ;
 - Parallélisation ;
 - Architecture, portage ;
 - Interfaces (texte, graphique) ;
 - Documentations (web, utilisation, développement) ;
 - Support ;
 - Co-responsable à partir de 2008.

— **Notus : depuis 2015**

- Responsable du projet :
 - Définition du cadre et des objectifs ;
 - Montage et suivi.
- Recherche et développement de méthodes numériques ;
- Parallélisation ;
- Architecture, portage ;
- Processus de vérification et validation ;
- Support ;
- Web ;
- Documentations.

2.4 Collaborations

Sont listées ci-après les collaborations nationales et internationales que j'ai développées ou auxquelles j'ai participé :

- Stéphane Abadie, Denis Morichon, Laboratoire des Sciences Appliquées au Génie Civil et Côtier (LaSAGeC2 - Université de Pau et des Pays de l'Adour), une publication ;
- Etienne Ahusborde, LMA (Pau), une publication, un congrès international ;
- Nicole Audiffren, CINES (Montpellier), un rapport technique ;
- Jérôme Breil, CEA/CELIA (Bordeaux), une publication soumise, un congrès international ;
- Hubert Chanson, Division of Civil Engineering (University of Queensland - Australie), trois publications, deux congrès avec actes ;
- Marc Médale, IUSTI (Marseille) et Xavier Nicolas, LETEM (Marne la Vallée), deux publications ;
- Luc Mieussens, IMB (Bordeaux) et Fabrice Véron, Air-sea Interaction Laboratory (University of Delaware - USA).

2.5 Encadrements

Depuis mon arrivée au laboratoire, j'ai eu l'opportunité d'encadrer des doctorants, post-doctorants et ingénieurs dont voici un tableau récapitulatif :

	% Encadrement	h.mois
Thèses		
N.T. Le (en cours)	50	12
C. Romé	75	27
A. Poux	75	27
J. Deborde	25	7,5
Post-doctorats		
A. Lemoine	75	12,6
J. Picot	75	16,8
M. Coquerelle	100	16,5
E. Ahusborde	100	24
Ingénieurs		
J. Fréchet	100	24
H. Ouvrard	50	5
Total		
		161,5

Thèses

- Christophe Romé - Méthode de raccordement de maillages non conformes pour la résolution des équations de Navier-Stokes. Co-encadrement (75%) avec Jean-Paul Caltagirone - Financement laboratoire - 2003 / 2006. C. Romé est actuellement ingénieur en CDI chez EDF.

Deux publications et un congrès national avec actes ont été publiés. La durée de la thèse a été de 3 ans, la composition du jury étant la suivante :

- C-H. Bruneau, Professeur, Université Bordeaux 1, Président
- R. Eymard, Professeur, Université de Marne-la-Vallée, Rapporteur
- F. Hecht, Professeur, Université de Paris VI, Rapporteur
- J-P. Lambelin, Ingénieur CEA, Invité
- J-P. Caltagirone, Professeur, Université Bordeaux 1, Directeur
- S. Glockner, Ingénieur de Recherche, Université Bordeaux 1, Co-Directeur
- Alexandre Poux - Conditions limites de sortie pour les méthodes de time-splitting appliquées aux équations de Navier-Stokes. Co-encadrement (75%) avec Mejdji Azaiez - Bourse de l'école doctorale SPI de l'Université de Bordeaux 2009-2012. A. Poux est actuellement ingénieur de recherche au CORIA.

Trois publications et un congrès international avec actes ont été publiés. La durée de la thèse a été de 3 ans, la composition du jury étant la suivante :

- M. Jean-Luc Guermond, Professeur, Texas A&M University, Rapporteur
- M. Marc Medale, Professeur, IUSTI, Marseille, Rapporteur
- M. Charles-Henri Bruneau, Professeur, IMB, Bordeaux, Examineur

- M. Xavier Nicolas, Maître de Conférences, LETEM, Marne-La-Vallée, Examineur
- M. Richard Pasquetti, Directeur de Recherche du CNRS, Nice, Président
- M. Mejdj Azaiez, Professeur, I2M, Bordeaux, Directeur
- M. Stéphane Glockner, Ingénieur de Recherche, I2M, Bordeaux, Co-Directeur
- Julien Deborde - Modélisation et simulation de l'interaction fluide-structure élastique : application à l'atténuation des vagues. Modélisation et simulation de l'interaction fluide / structure élastique - co-encadrement (25%) avec Pierre Lubin (25%) et Thomas Milcent (50%) - Bourse de l'école doctorale SPI de l'Université de Bordeaux 2013-2017. J. Deborde est en recherche de post-doctorat.
Une publication soumise, un congrès international. La durée de la thèse a été de 3 ans et demi, la composition du jury étant la suivante :
 - M. Aurélien Babarit, Maître de conférence, École Centrale Nantes, Rapporteur
 - M. Cédric Galusinski, Professeur, Université de Toulon, Rapporteur
 - M. Mario Ricchiuto, Directeur de recherches, INRIA, Président
 - M. Mourad Ismaël, Maître de conférences, Université Grenoble Alpes, Examineur
 - M. Fabrice Véron, Professeur, University of Delaware, Examineur
 - M. Pierre Lubin Professeur, Bordeaux INP, Directeur
 - M. Thomas Milcent, Maître de conférence, ENSAM, Co-directeur
 - M. Stéphane Glockner, Ingénieur de recherche, Bordeaux INP, Co-directeur
- Nhan Thanh Le - Modélisation et simulation de la ligne triple - direction (100%), co-encadrement 50% avec M. Coquerelle (I2M) - Bourse de l'école doctorale SPI de l'Université de Bordeaux débutée en 2016.

Post-doctorats

- Antoine Lemoine - Adaptation et optimisation de Méthode Moment-of-Fluid aux maillages cartésiens. Co-encadrement (75%) avec J. Breil (CEA/CELIA) ; 1 publication, 1 congrès international ; financement IdEx ; mai 2015 - nov. 2016. A. Lemoine est maintenant Maître de Conférence (Bordeaux INP).
- Joris Picot - Méthode des frontières immergées sur des maillages Cartésiens irréguliers. Co-encadrement (75%) avec T. Milcent (I2M) en 2015, encadrement à 100% en 2016 ; 1 publication, 1 congrès international ; financement IdEx ; sept 2014 - déc 2016 ; J. Picot est maintenant Ingénieur de Recherche à l'ENS de Lyon.
- Mathieu Coquerelle - Calcul de courbure pour l'estimation des tensions de surface. Encadrement à 100%, 1 publication, financement IdEx, 2014-2015. M. Coquerelle est maintenant Maître de Conférence (Bordeaux INP).

- Etienne Ahusborde - Méthode de raccordement de maillages non conformes pour la résolution des équations de Navier-Stokes, partitionnement de maillage multiblocs et couplage avec des solveurs parallèles; encadrement à 100%, financement Institut Carnot; 2 publications; 2009-2010. E. Ahusborde est maintenant Chargé de Recherche CNRS (LMA).

Ingénieurs

- Jocelyn Fréchet - Développement d'une interface graphique pour le code Thétis. (Encadrement à 100%); financement Institut Carnot; 2009-2010. J. Fréchet a été ensuite ingénieur CDD en informatique (IUT de Bordeaux).
- Hilde Ouvrard - Tests de nouveaux solveurs massivement parallèles de résolution de systèmes linéaires, et I/O parallèles. Co-encadrement à 50% avec N. Audiffren (CINES); financement Région Aquitaine / CINES, 2013. H. Ouvrard est maintenant enseignante dans le secondaire (Montpellier).

2.6 Activités d'enseignement

Depuis 2003, j'effectue 16 à 32 heures de Travaux Pratiques par an de simulation numérique à l'ENSCBP (utilisation des codes Aquilon/Thétis et d'Ansys depuis 2017)

2.7 Activités d'expertise

Jurys de thèses

- Lionel Trovalet - *Résolution numérique des transferts par rayonnement et conduction au sein d'un milieu semi-transparent pour une géométrie 3D de forme complexe.* Doctorat de l'Université Henri Poincaré - Nancy Université, soutenu le 21 octobre 2011 devant le jury composé de :
 - Véronique Feldheim, Professeur, Faculté Polytechnique de Mons, Belgique, rapporteur
 - Denis Lemonier, Directeur de recherche CNRS, Institut P', Poitiers, rapporteur
 - Jean-Pierre Chabriat, Professeur, Université de la Réunion, LE2P Saint Denis, examinateur
 - Pedro J.M. Coelho, Professeur, Instituto Superior Technico, Lisbon, examinateur
 - Stéphane Glockner, Ingénieur de recherche, TREFLE Bordeaux, examinateur
 - Daniel Rousse, Professeur, Ecole de Technologie Supérieure, Montreal, examinateur
 - Gérard Jeandel, Professeur, Université Henri Poincaré, LEMTA Nancy, directeur

- Fatmir Asllanaj, Chargé de recherche CNRS, HDR, LEMTA Nancy, co-directeur
- Jonathan Desombre - *Modélisation VOF de l'écoulement de jet de rive en surface et dans une plage perméable*. Doctorat de l'université de Pau et des Pays de l'Adour soutenu le 17 décembre 2012 devant le jury composé de :
 - Domenico Gallipoli, Professeur, Université de Pau et des Pays de l'Adour, examinateur
 - Rivoalen Elie, Professeur, Université du Havre, rapporteur
 - Eric Arquis, Professeur, Université de Bordeaux, rapporteur
 - Dubravk Pokrajac, Reader, University of Aberdeen (IK), examinateur
 - Stéphane Glockner, Ingénieur de recherche, Université de Bordeaux, examinateur
 - Mathieu Mory, professeur, Université de Pau et des Pays de l'Adour, directeur
 - Denis Morichon, Maître de conférence, Université de Pau et des Pays de l'Adour, co-directeur

Rapporteur

- Journaux à comité de lecture (Computers & Fluids, Journal of Computational Science);
- Conférences (SFT).

Comités de sélection d'ingénieurs

- Ingénieur de Recherche, concours externe CNRS, membre expert, 2011, Caen;
- Ingénieur d'étude, concours NOEMI CNRS, membre expert, 2015, Bordeaux.

Contrats industriels

- Participation à la réalisation d'un contrat pour Arcelor-Mittal (2008) porté par J-P. Caltagirone : simulations massivement parallèles du plate-out (lubrification par dépôt d'huile sur une tôle);
- Participation à la réalisation de trois contrats pour le CEA (2005-2006) porté par J-P. Caltagirone : parallélisation d'Aquilon, raccordement de maillages multiblocs 3D pour des géométries axisymétriques, et applications internes;
- Support, aide et conseils sur d'autres contrats du laboratoire (Herakles, Cap-Ingélec, etc.).

3 Synthèse des travaux de recherche

Mes activités de recherche portent principalement sur les méthodes numériques pour la mécanique des fluides incompressibles, convergeant à l'ordre 2 en espace et en temps, et basées sur des maillages structurés. Ces travaux sont réalisés dans le cadre d'une *démarche logicielle*, structurante pour le laboratoire, que je présente dans un premier temps. J'articule ensuite cette synthèse autour de 2 axes : le premier est centré sur la *simulation parallèle* qui a été déterminante pour réaliser des projets d'études numériques d'écoulements environnementaux, mais aussi pour établir un ensemble de solutions numériques de référence à différents écoulements académiques ; ces solutions proviennent de la validation de mes travaux sur des *méthodes numériques* qui constituent le second axe et le cœur de ma recherche. Plus précisément, je développerai les points suivants :

- contexte logiciel ;
- simulations parallèles et solutions de référence ;
- partitionnement de maillages multiblocs conformes ;
- raccordement de maillages multiblocs non conformes ;
- méthodes des frontières immergées pour la prise en compte de géométries complexes ;
- conditions aux limites de sortie dans le cadre des méthodes de correction de pression ;
- interfaces fluide/fluide : reconstruction géométrique d'interface, calcul des forces de tension de surface.

Mes travaux sont ici synthétisés pour faire ressortir au mieux les points de blocages de certaines méthodes, les stratégies originales pour les améliorer et les principaux résultats obtenus. Je propose en annexe sept articles auxquels le lecteur pourra se référer pour plus de détails. Cités ci-dessous, ils constituent l'essentiel de mes travaux numériques :

- 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.
→ Un partitionneur efficace de maillages 2D multiblocs conformes.
- 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.
→ Une méthode implicite de raccordement de maillages multiblocs non conformes.
- 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.
→ Extension et amélioration de la méthode de raccordement de maillages multiblocs non conformes.
- A. Poux, S. Glockner, M. Azaiez, Improvements on open and traction boundary conditions for Navier-Stokes time-splitting methods, *Journal of Computational Physics*, 230, pp. 4011-4027, 2011.

- Augmentation des ordres de convergence sur la vitesse et la pression de la méthode de correction de pression dans le cadre de conditions aux limites ouvertes.
- 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*, 305, pp. 838-876, 2015.
 - Amélioration de la méthode du Closest-Point pour le calcul de la courbure d'une interface représentée par une fonction level-set. Passage de l'ordre 2 à l'ordre 4 de la méthode.
- A. Lemoine, S. Glockner, J. Breil, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 2D Cartesian Grids, *Journal of Computational Physics*, 328, pp131–139,2017.
 - Optimisation de la méthode Moment-of-Fluid pour les maillages cartésiens (30 à 200 % plus rapide grâce à la suppression d'une étape de minimisation) ;
- 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*, 364, pp18–48, 2018.
 - Une méthode pour le traitement des frontières immergées au stencil de discrétisation compact dans le cadre de maillages rectangulaires.

3.1 Contexte logiciel

L'ensemble de mes projets s'inscrit dans un cadre logiciel, présent au laboratoire depuis sa création dans les années 90 sous l'impulsion de J-P. Caltagirone. D'abord, il y a eu le projet Aquilon jusqu'en 2008, renommé à partir de cette date en Thétis. Suite à la restructuration de l'équipe de recherche MFN et à une réflexion de fond sur le cadre à donner à un projet logiciel dans un laboratoire de recherche, j'ai initié *ex nihilo* le projet Notus en 2015. Il s'agit bel et bien d'un nouveau code même si l'expérience acquise par le passé n'y est pas étrangère pour autant.

3.1.1 Projet Aquilon/Thétis [2003-2015]

Aquilon et Thétis sont des codes de calcul de mécanique des fluides développés et utilisés pendant plus de 20 ans au sein de l'équipe MFN de l'I2M / TREFLE. Ils résolvent les équations de Navier-Stokes pour des écoulements incompressibles, mono ou multiphasiques, laminaires ou turbulents, avec la prise en compte des effets thermiques et le transport éventuels de scalaires passifs ou réactifs. Ils ont été utilisés pour la recherche académique, l'enseignement et les collaborations industrielles. Thétis s'inscrit dans la continuité du projet Aquilon porté par J-P. Caltagirone jusqu'en 2008. J'ai participé à son développement depuis 2003, et j'ai été le co-responsable de Thétis avec Stéphane Vincent (I2M). Ce sont des codes dans lesquels, au fil du temps, le savoir-faire numérique et physique du laboratoire développé par les permanents et doctorants a été capitalisé. Ils ont été utilisés à la fois par d'autres laboratoires en France (SIAME, INRA, LEMTA, IMFT, ICMCB, LOMC, P', LTN, GEPEA), par des écoles d'ingénieurs et des universités pour l'enseignement de la mécanique des fluides (ENSCBP, UPPA), et par des partenaires industriels ou institutionnels (ARCELOR, SNECMA, CEA, Herakles, Cap Ingélec, DRAC, etc.). Ils ont été utilisés dans plusieurs dizaines d'articles et de nombreux projets pour lesquels l'I2M a été le laboratoire porteur ou partenaire : projets région Aquitaine, projets ANR, projets européens, institutionnels et industriels. Aquilon a été reconnu comme une des seules expériences de cette nature en France pour la mécanique des fluides incompressibles¹.

Initialement monobloc et séquentiel, j'ai fait évoluer ces codes pour permettre l'utilisation de machines massivement parallèles (jusqu'à 8192 cœurs) et me suis intéressé plus particulièrement au partitionnement de maillages multiblocs et raccordement de maillages multiblocs non conformes, ainsi qu'aux conditions aux limites de sortie.

Dans la suite de ce document, je ne mentionnerai plus que de Thétis pour évoquer les deux codes Aquilon et Thétis, par souci de clarté et puisque que le dernier n'est que l'évolution du premier.

1. Veynante D., Nominé J.-Ph., Colloque Penser Pétaflops CEA-CNRS. Atelier No 2. Mutualisation des codes et des grands outils logiciels. CNRS, Institut National des Sciences de l'Univers. 2008. <http://www.insu.cnrs.fr/co/files/Atelier2-Mutualisation-Rapport.Fin-08.11.13.pdf>

3.1.2 Projet Notus [depuis 2015]

Si le code Thétis a largement fait ses preuves, il n'en est pas moins exempt de défauts : citons l'inhomogénéité du code source, des fonctionnalités parfois incompatibles, des développements contraints par des contrats industriels et parfois incomplets en raison de l'arrêt des financements associés, mais également le fait que le code soit fermé. À partir de 2015, conscient de ces limites, j'ai décidé de changer d'approche et de lancer le projet collaboratif Notus (<https://notus-cfd.org>), *open-source* et à vocation fédératrice, dont les objectifs sont les suivants :

- proposer à la communauté de la mécanique/physique/chimie un code facile à utiliser et à adapter, basé sur l'état de l'art des méthodes numériques ;
- proposer à la communauté des mathématiques appliquées un code offrant un cadre efficace de vérification et de validation sur des écoulements réels ;
- simplifier autant que possible les difficultés de programmation liées au parallélisme ;
- porter le code sur les calculateurs massivement parallèles (mésocentre, GENCI, PRACE) ;
- offrir des outils numériques efficaces et facilement utilisables pour créer et valider de nouvelles méthodes numériques ou résoudre de nouvelles équations ;
- proposer une documentation complète et utilisable, ainsi qu'un cadre rigoureux de validation.

Notus s'inscrit comme Thétis dans une recherche de synergies entre Recherche / Industrie / Enseignement / Calcul intensif, dans le but de tendre vers un outil d'expérimentation numérique pour des problèmes de mécanique des fluides et de transferts. Ce projet a obtenu les financements de 3 post-doctorants (54 h.mois) que j'ai encadrés dans le cadre du cluster CPU (*Numerical Certification and Reliability*) de l'IdEx de l'Université de Bordeaux : Mathieu Coquerelle et Antoine Lemoine (tous deux actuellement Maîtres de Conférence à l'I2M, recrutés pour effectuer leurs recherches en mécanique des fluides numérique dans le contexte de Notus), Joris Picot (maintenant Ingénieur de Recherche à l'ENS de Lyon). Ce projet a été reconnu comme une réalisation du cluster CPU dans le rapport d'activité 2016-17 de l'IdEX.² Le développement de Notus est toujours en cours, une première version publique ayant été réalisée début 2017, et une seconde étant prévue au printemps 2018.

C'est dans ce cadre que je me suis intéressé, d'un point de vue de la recherche, aux méthodes numériques pour le traitement des interfaces (frontières immergées, interfaces fluide/fluide, fluide/solide), avec pour objectif d'atteindre un ordre de convergence spatio-temporel de 2 sur l'ensemble des méthodes, qui doivent en outre rester compatibles avec un contexte de calcul massivement parallèle.

2. Initiative d'Excellence, Université de Bordeaux, rapport d'activité 2016-2017 https://www.u-bordeaux.fr/content/download/67369/522522/version/1/file/Rapport%20activit%C3%A9%20IdEx%202016-2017_VF.pdf

3.1.3 *Corpus des méthodes numériques*

Notus et Thétis sont tous les deux basés sur la méthode des volumes finis associée à des maillages décalés en vitesse/pression. Thétis repose sur des maillages multiblocs curvilignes orthogonaux alors que Notus est basé sur des maillages cartésiens monoblocs. Une autre différence notable entre les deux est que Thétis possède les inconnues scalaires (pression, température) aux coins des cellules alors que pour Notus j'ai adopté une approche plus classique de positionnement de ces inconnues au centre des cellules. Les composantes du vecteur vitesse sont dans les deux cas disposées au centre des faces des cellules.

La discrétisation des équations est implicite en temps, d'ordre 1 ou 2 (schémas d'Euler ou de Gear).

Le couplage vitesse/pression est résolu par la méthode de lagrangien augmenté³ ou des méthodes de type correction de pression^{4,5}.

Les termes de diffusion sont discrétisés par un schéma centré d'ordre 2 espace. Les termes d'advection sont discrétisés soit par des schémas implicites centrés, QUICK, Upwind ou Hybride, soit par des schémas explicites d'ordre élevé WENO.

Dans le cadre d'écoulements diphasiques non miscibles, le modèle *1-fluide* est adopté (les caractéristiques des fluides sont calculés en fonction de la fraction volumique de chaque fluide présent dans la maille). La représentation des interfaces se fait par les méthodes Volume-of-Fluid (Thétis et Notus), Moment-of-Fluid⁶ (Notus) ou Level-Set (Thétis et Notus). Le calcul des forces de tension de surface est fait par une approche de type Continuum Surface Force⁷.

Des obstacles de forme quelconque peuvent être immergés dans un maillage cartésien et leur prise en compte dans l'écoulement traité par des méthodes de pénalisation volumique d'ordre 1 en espace (terme de Brinkman ajouté aux équations de Navier-Stokes⁸) ou de frontières immergées d'ordre 2 en espace⁹.

Les systèmes linéaires sont résolus par les bibliothèques tierces (*hypre*, *mumps* et *lis*) dont la précision et l'efficacité sont avérées.

3. Fortin M, Glowinski R., Méthodes de lagrangien augmenté. Applications à la résolution de problèmes aux limites. *Collection Méthodes Mathématiques de l'Informatique*. Ed. Dunot, 1982.

4. Goda K., A multistep technique with implicit difference schemes for calculating two- or three-dimensional cavity flows, *Journal of Computational Physics*, 30, 76–95, 1979

5. Timmermans et al., An approximate projection scheme for incompressible flow using spectral elements, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 22, 673–688, 1996

6. Vadim Dyadechko, Mikhail Shashkov, Reconstruction of multi-material interfaces from moment data, *Journal of Computational Physics*, Volume 227, Issue 11, Pages 5361-5384, 2008.

7. J.U. Brackbill, D.B. Kothe, C. Zemach, A continuum method for modeling surface tension, *J. Comput. Phys.* 100 (1992) 335354.

8. Arquis E, Caltagirone JP. Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-milieu poreux : application 4 la convection naturelle. *CR Acad. Science de Paris* 1984 ; 299(1 Série II) : 1–4.

9. R. Mittal, G. Iaccarino, Immersed Boundary Methods, *Annual Review of Fluid Mechanics* 37 (1) (2005) 239–261, doi : 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743. R. Mittal, H. Dong, M. Bozkurttas, F. M. Najjar, A. Vargas, A. von Loebbecke, A versatile sharp interface immersed

3.2 Simulations parallèles et solutions de référence

3.2.1 Contexte

L'utilisation des supercalculateurs est restée assez longtemps réservée aux spécialistes jusqu'au début des années 2000. La multiplication des *clusters* massivement parallèles, disposant, à coût identique, de plus de processeurs Intel (ou AMD) que de processeurs classiques (SGI, IBM, CRAY par exemple), a largement contribué à la démocratisation du calcul parallèle. De ce point de vue, la France a eu un certain retard dans sa dotation de telles machines, puisque ce n'est qu'en 2008 que le CINES s'équipa de la machine Jade pourvue d'une dizaine de milliers de processeurs. Sensible à l'essor des clusters de calcul qui s'opérait à l'étranger, j'ai commencé en 2005 à paralléliser le code de calcul. L'objectif que je me suis fixé alors - nouveau pour le laboratoire qui n'en n'avait pas la culture - a été d'ajouter à la modélisation numérique d'un problème physique la composante du calcul massivement parallèle afin de répondre aux enjeux de la mécanique des fluides. C'est ainsi qu'une collaboration étroite avec Pierre Lubin (I2M) a été initiée sur l'étude des écoulements environnementaux et plus particulièrement sur le déferlement des vagues, dans laquelle l'apport du calcul intensif a été déterminant à une description précise et une meilleure compréhension de ces phénomènes.

J'ai également exploité l'intérêt du calcul parallèle pour l'établissement de solutions de références à certains écoulements académiques, dans le cadre d'un benchmark national sur un problème tridimensionnel de convection mixte, et dans celui d'une validation précise et exigeante de travaux de recherche plus méthodologiques.

3.2.2 Écoulements environnementaux

En 2005, une simulation du déferlement d'une vague demandait trois mois de calcul sur un processeur, assurant seulement une description des plus grosses structures de l'écoulement (dont le rouleau principal dans lequel une grande quantité d'air est emprisonnée). La *parallélisation du code* que j'ai effectuée a conduit à des simulations utilisant 800 millions points de discrétisation sur 8192 processeurs pour seulement 4 jours de temps de calcul. Ceci a permis de mettre en évidence, pour la première fois en 2013, de *fins filaments de vortex aérés*, connectant, dans la direction de l'écoulement, le rouleau principal du déferlement à la surface libre en aval de celui-ci (cf. figure 3.1). Notons que ces filaments n'avaient jamais été encore étudiés, y compris expérimentalement. Plusieurs intensités de déferlement ont été simulées pour confirmer ou non leur apparition. Leur mode de création a été identifié et les filaments, une fois formés, ont été caractérisés. La figure 3.2 montre la contrarotativité des filaments grâce aux valeurs de la composante horizontale de la vorticité plaquée sur l'isosurface du critère Q . La figure 3.3 montre les trajectoires complexes autour d'un filament.

Un article dans *Journal of Fluid Mechanics* a été publié sur ce sujet [Lubin & Glockner, 2015] et plusieurs communications ont été réalisées. Ces travaux nous ont valu en 2014 un prix mésochallenge (organisé par le GENCI entre les différents mésocentres de France),

mais les plus gros calculs ont été réalisés en 2013 dans le cadre d'un projet européen PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) de 10 millions d'heures de calcul.

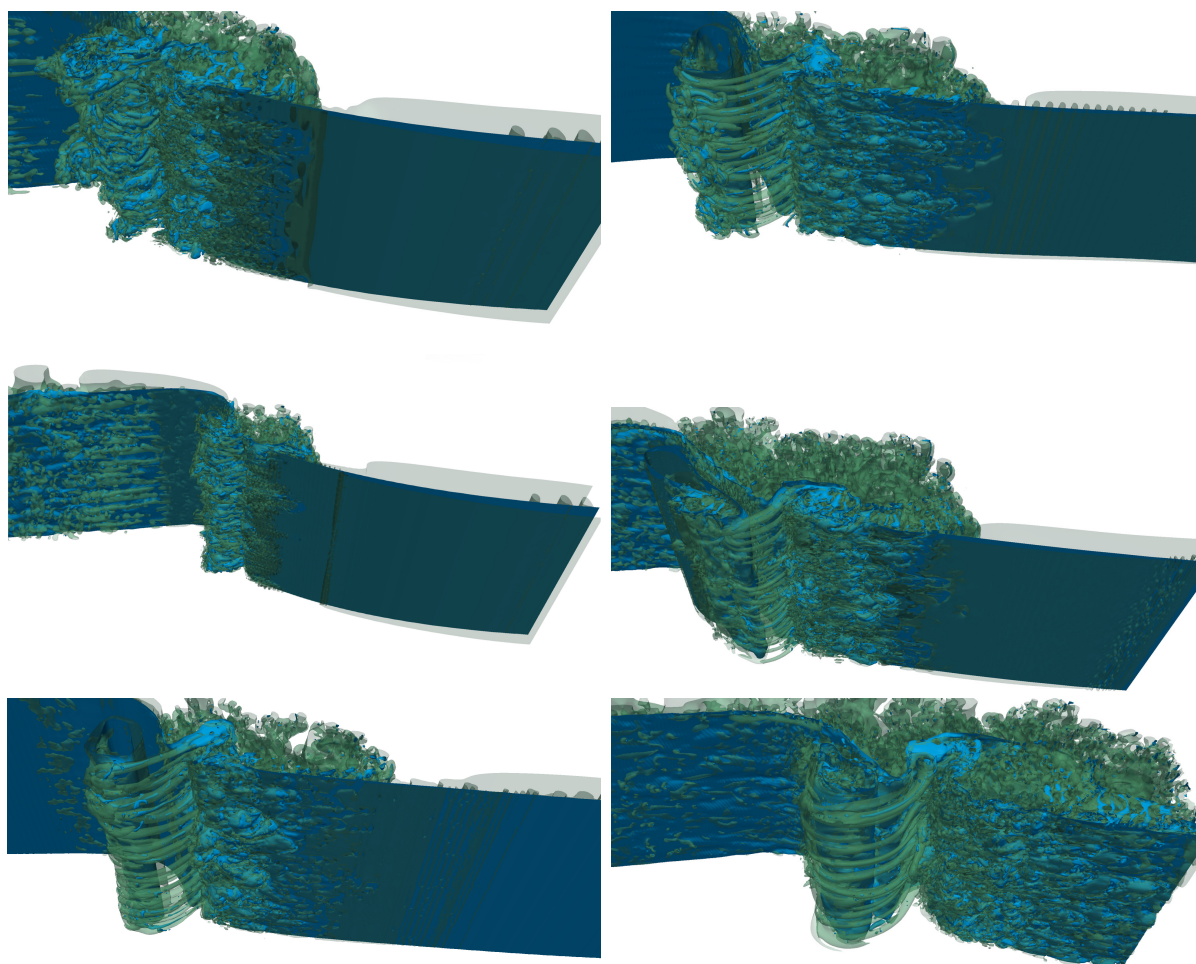


FIGURE 3.1 – Déferlement des vagues. Mise en évidence de fins filaments de vortex aériés. En vert une isosurface du critère Q caractérisant les structures turbulentes, en bleu l'isosurface de la surface libre entre l'air et l'eau. Différentes intensités de déferlement sont présentées ; sur les deux premiers, les filaments ne sont pas mis en évidence.

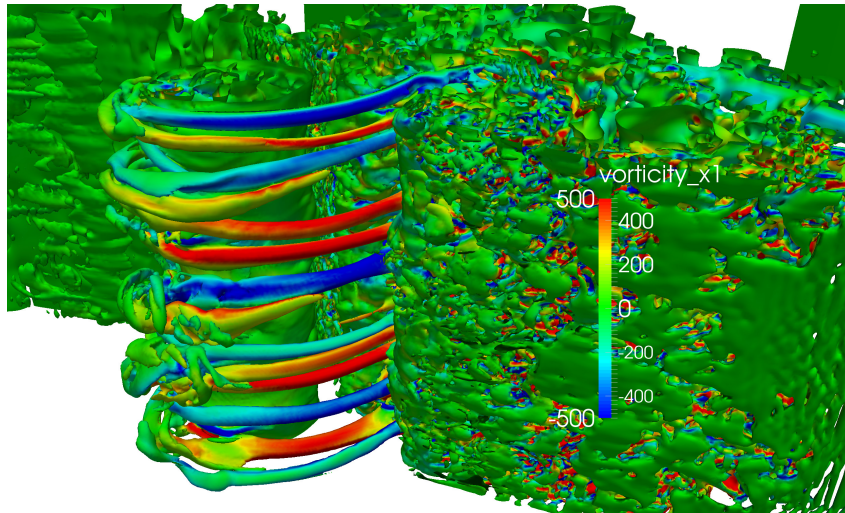


FIGURE 3.2 – Déferlement d’une vague : composante horizontale de la vorticité plaquée sur l’isosurface du critère Q .

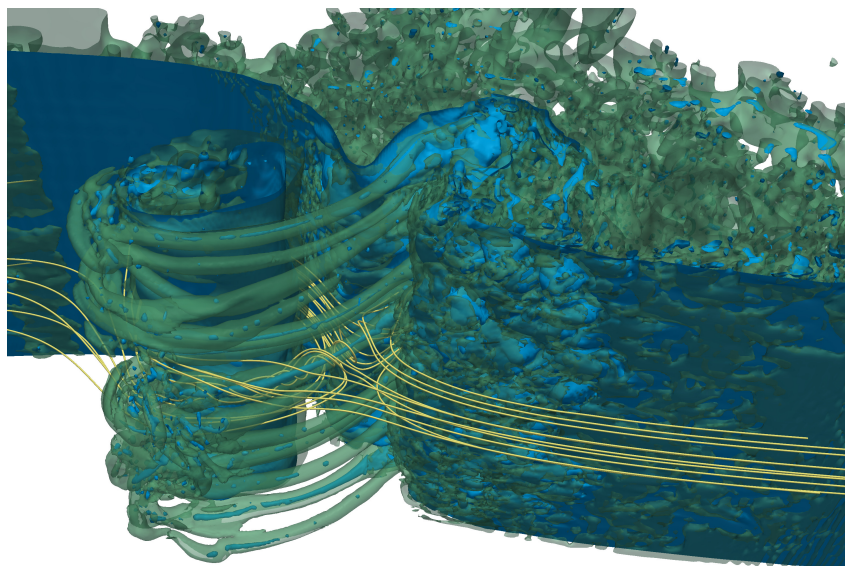


FIGURE 3.3 – Déferlement d’une vague : trajectoires autour d’un filament.

Grâce à ces travaux sur le parallélisme et les méthodes numériques associées, toujours dans le cadre de ma collaboration avec P. Lubin, j’ai également contribué à une meilleure compréhension d’un autre phénomène naturel, le mascaret, ondulant ou déferlant, en 2D puis en 3D [Lubin & al., 2010a, 2010b]. Ces travaux ont été initiés dans le cadre d’une collaboration internationale avec P. Lubin, Hubert Chanson (Queensland University), sans demande de projet associée. L’investissement réalisé a ensuite permis le dépôt et l’obtention du projet ANR MASCARET.

Sur le thème des écoulements environnementaux, je voudrais aussi citer ma collaboration avec l'équipe de S. Abadie (SIAME) sur la génération de Tsunami par glissement de terrain [Abadie et al., 2010] dans le cadre du projet européen « Tsunami Risk AND Strategies For the European Region » (2006-09). Une application directe à la génération d'un Tsunami sur l'île de la Palma a été réalisée, les simulations 3D ayant servi de données d'entrée à des modèles océaniques de propagation d'onde.

Ces travaux sur la parallélisation du code, l'adaptation des méthodes numériques, le choix des solveurs, etc., effectués dans le cadre de simulations pour les écoulements environnementaux, ont bénéficié directement aux autres chercheurs de l'équipe MFN et aux utilisateurs extérieurs, universitaires ou industriels. Cela fait partie des synergies qu'il est possible de mettre en œuvre au sein d'une équipe qui partage un code commun. Ils ont largement contribué à améliorer la précision des simulations et des résultats scientifiques qui en découlent. Techniquement, le développement et les campagnes de simulations se sont appuyés progressivement sur le cluster de l'équipe, sur celui du mésocentre MCIA mais aussi sur des projets GENCI récurrents (plus de 20 millions d'heures de calcul cumulées depuis 2005 par l'équipe MFN) et un projet PRACE (10 millions d'heures sur le déferlement). Ainsi, les travaux sur le parallélisme ont permis de proposer un code parallèle de production tirant parti de l'*architecture pyramidale* du calcul intensif en France.

3.2.3 Benchmarks et solutions de référence

L'élaboration d'un code de calcul se décompose en plusieurs étapes dont celles de *vérification et de validation*. La vérification, en lien avec les mathématiques appliquées, vise à analyser la qualité de la solution d'un modèle numérique par comparaison à une solution exacte des équations. La précision et les ordres de convergence spatio-temporels sont calculés. La validation analyse quant à elle la capacité d'un code à représenter un phénomène physique en comparant les solutions numériques aux données issues de l'expérience, mais aussi parfois à celles d'autres codes de calculs (benchmark). La bibliographie est riche sur ces concepts, ces articles^{10 11} et ouvrages^{12 13} étant particulièrement intéressants.

Ces deux étapes de vérification et de validation sont indispensables à l'élaboration de tout code de calcul de recherche et permettent aussi de tester et de comparer les méthodes numériques avec précision. La réalisation d'un ensemble de cas tests de non régression permet une prise en main rapide et efficace du code et en démontrent le potentiel. Dans le cadre des projets Thétis et Notus, un soin particulier a été apporté à la réalisation de ces tâches, des documentations et des procédures de non régression associées. J'ai aussi sensibilisé mes étudiants et post-doctorants à cette pratique.

10. C.J. Roy. Review of code and solution verification procedures for computational simulation. Journal of Computational Physics 205 (2005) 131-156.

11. Richardson L.F., Gaunt J.A., The Deferred Approach to the Limit. Transactions of the Royal Society of London, Series A : Mathematical and Physical Sciences, Vol. 226, 1927 ; 299-361.

12. W. L. Oberkampf & T. G. Trucano. Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics. Sandia National Laboratories Report. SAND2002-0529.

13. P.J. Roache. Verification and Validation in Computational Science and Engineering. Hermosa Publishers, Albuquerque, NM, 1998.

Dans la suite de cette partie, je présenterai d’abord les résultats d’un exercice national de comparaison de codes (benchmark) qui a porté sur l’établissement d’une solution de référence à un écoulement tridimensionnel de convection mixte. Puis, je présenterai les solutions de référence à certains problèmes académiques. Notons qu’elles ont été établies grâce à l’utilisation de maillages très fins associées au calcul parallèle. Elles ont servi à la validation rigoureuse de méthodes numériques que je présenterai à partir de la section 3.3.

Benchmark de convection mixte 3D

Le benchmark organisé par X. Nicolas (LETEM) et M. Médale (IUSTI) visait à proposer une solution de référence à l’écoulement tridimensionnel de convection mixte (Poiseuille-Rayleigh-Bénard) dans un canal rectangulaire. Cet écoulement est stationnaire pour des nombres de Rayleigh et de Reynolds respectivement de 5000 et de 50 ; il est composé de rouleaux thermoconvectifs longitudinaux (cf. figure 3.4). Les équations de Navier-Stokes et de l’énergie sont résolues en utilisant l’approximation de Boussinesq. Nous avons proposé une solution de référence (à 4 ou 5 chiffres significatifs) obtenue à partir de simulations parallèles sur 4 codes basés sur des méthodes différentes (différences finies, volumes finis, et éléments finis). Le maillage le plus fin utilisé est de 44 millions de points, les simulations ayant tournées sur 152 processeurs.

L’extrapolation de Richardson est au cœur de ces travaux, même si elle n’est pas toujours utilisable, notamment en raison de la discontinuité du champ de température sur la limite inférieure (due à la présence d’une condition de Neumann sur la première partie de la limite suivie d’une condition de Dirichlet). Quand l’ordre de convergence spatial mesuré est celui attendu, la solution de référence a alors été établie comme étant la moyenne arithmétique des solutions extrapolées des différentes méthodes.

La solution de référence a tout d’abord portée sur des quantités globales : perte de pression entre l’entrée et la sortie, énergie cinétique et température moyennes, flux de chaleur et de quantité de mouvement aux limites. Puis nous nous sommes intéressés à établir des solutions de référence sur les *extrema* de profils à la fois de température, de composantes du vecteur vitesse et du nombre de Nusselt (profils tracés le long de certains segments transverses et longitudinaux du domaine). La méthodologie a consisté à établir les solutions sur des maillages de plus en plus raffinés. Puis, le long de chaque segment, les solutions ont été interpolées par des fonctions d’interpolation d’ordre élevé sur le maillage le plus fin, afin de pouvoir utiliser l’extrapolation de Richardson, quand elle était possible, en chacun des points des segments. En effet, on observe sur la figure 3.5 deux cas de figure : un premier pour lequel l’extrapolation est possible et conduit au calcul de la valeur extrapolée de l’*extremum* (partie gauche de la figure) ; un second cas pour lequel on observe un croisement des solutions à proximité de l’*extremum* rendant l’extrapolation impossible.

Ce travail a fait l’objet d’un premier article dans *Numerical Heat Transfer Part B-fundamentals* [X. Nicolas et al. 2011a], mais la coexistence des conditions de Dirichlet et de Neumann sur la limite inférieure a réduit les possibilités d’application de l’extrapolation de Richardson et a compliqué l’établissement et l’analyse d’une solution de référence. Dans un

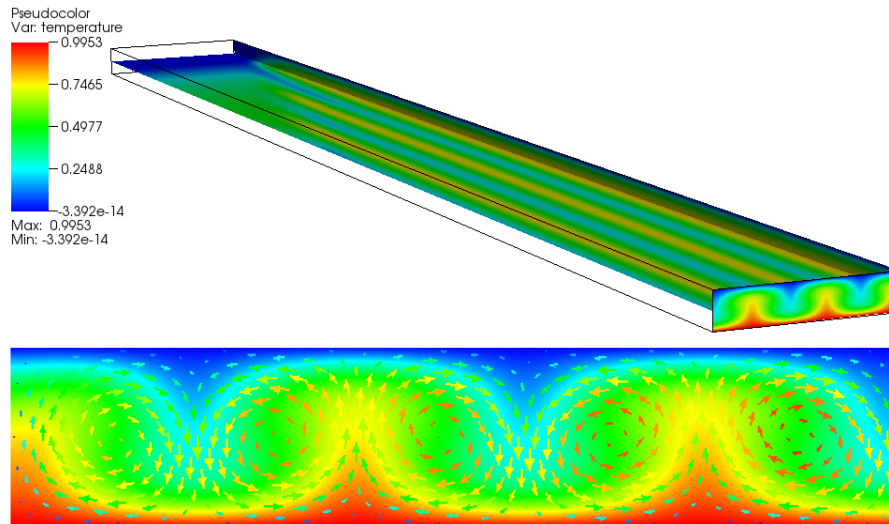


FIGURE 3.4 – Convection mixte : champs de température dans le plan horizontal médian et dans le plan de sortie de domaine ; champs de température et du vecteur vitesse dans le plan vertical en sortie de domaine.

second article dans *Numerical Heat Transfer Part B-fundamentals* [Nicolas et al., 2011b] nous avons analysé les conséquences de cette singularité sur l’extrapolation de Richardson des solutions. Nous avons montré qu’elle permet d’améliorer la précision des solutions, surtout pour les codes d’ordre 2 en espace, dans certaines parties du canal et pour certaines gammes de coefficients d’extrapolation. Une correction du développement de Taylor utilisé dans le formalisme de Richardson a été proposée pour prendre en compte la singularité et expliquer la majorité des comportements observés dans le processus d’extrapolation.

Il est intéressant de noter que les quatre approches numériques ont montré leur propre sensibilité au problème, et, quand l’extrapolation de Richardson a été possible, que l’ordre de convergence dépend de la quantité observée (variable primitive, dérivée) et de la définition de la norme. La singularité de la solution doit être prise en compte et peut, de manière significative, détériorer le processus d’extrapolation. Néanmoins, si des précautions sont prises, comme le démontrent ces travaux, il est tout à fait possible de définir une solution de référence précise.

Autres solutions de référence

Dans le cadre de la validation des méthodes numériques qui seront présentées à partir de la section suivante, j’ai travaillé sur des écoulements bien connus comme celui de la cavité entraînée ou celui autour d’un cylindre. Mais j’ai également étendu la validation jusqu’à proposer des solutions de référence à des écoulements dans des *géométries moins étudiées* dans la littérature, afin de varier les configurations d’étude et de contribuer à cet effort collectif de validation des codes.

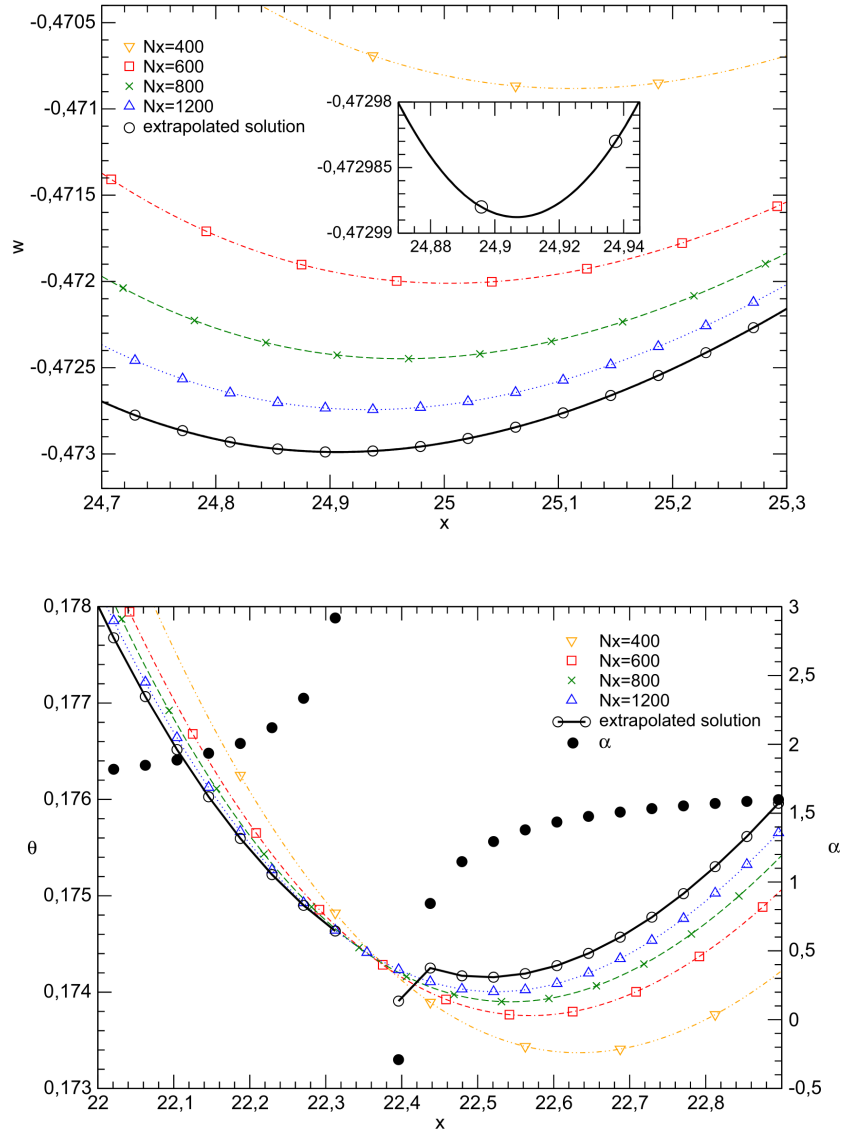


FIGURE 3.5 – Convection mixte : extrapolation de Richardson le long d’un segment, point par point ; (haut) extrapolation possible ; (bas) extrapolation impossible en raison du croisement des courbes.

Dans un article sur le partitionnement de maillages multiblocs [Ahusborde & Glockner, 2011] nous avons étudié l'écoulement dans un *canal en forme de Z* (cf. figure 3.6) à $Re = 200$. Nous avons mesuré avec précision les coordonnées des points de décollement et de recollement des tourbillons principaux, primaires et secondaires qui constituent cet écoulement (les points P_i sur la figure 3.6), et ceci pour 3 grilles de plus en plus raffinées allant de 4000 à 2,4 millions de cellules. La vorticit   a   galement   t   mesur  e en leur centre.

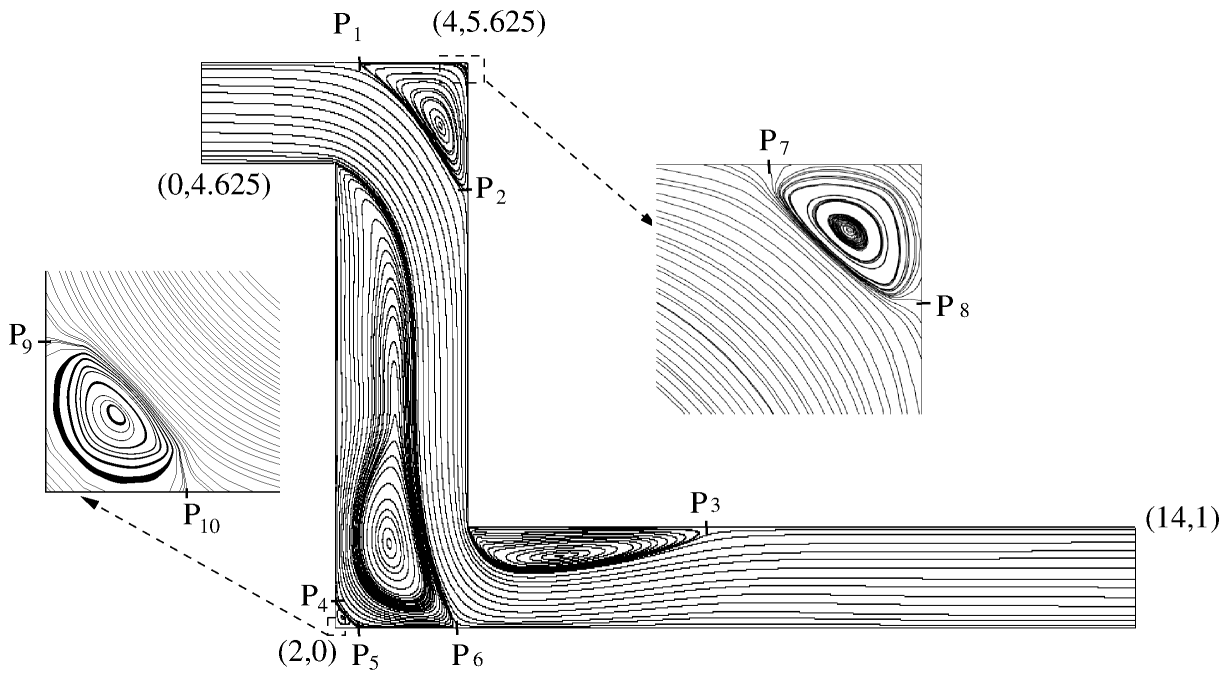


FIGURE 3.6 –   coulement dans un canal en forme de Z    $Re = 200$: lignes de courant et rep  rage des points de d  collement et de recollement.

D'autres solutions de r  f  rence ont   t   propos  es pour l'  coulement stationnaire    $Re = 1000$ de la *cavit   entra  n  e en forme de L* (cf. figure 3.7) et pour celui de la *cavit   doublement entra  n  e* (cf. figure 3.8). Quatre maillages ont   t   utilis  s, les derniers   tant respectivement de 8 et 4 millions de cellules. Pour ces deux g  om  tries, les tourbillons ont aussi   t   identifi  s et caract  ris  s. Pour le cas de la *cavit   doublement entra  n  e*, le Reynolds critique au-dessus duquel l'  coulement devient instationnaire a   t   encadr   avec pr  cision ($3480 < Re < 3500$). Une   tude a   galement   t   men  e    haut nombre de Reynolds - $Re = 5000$ (cf. figure 3.9) et 10 000 - portant sur la trajectoire de phase dans le plan des composantes du vecteur vitesse $u_1 - u_2$, et sur l'analyse spectrale du champ instationnaire (cf. figure 3.10).

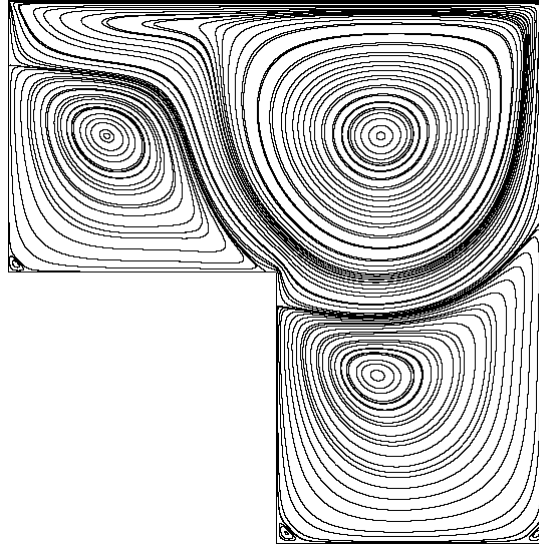


FIGURE 3.7 – Cavité entraînée en forme de L à $Re = 200$: lignes de courant.

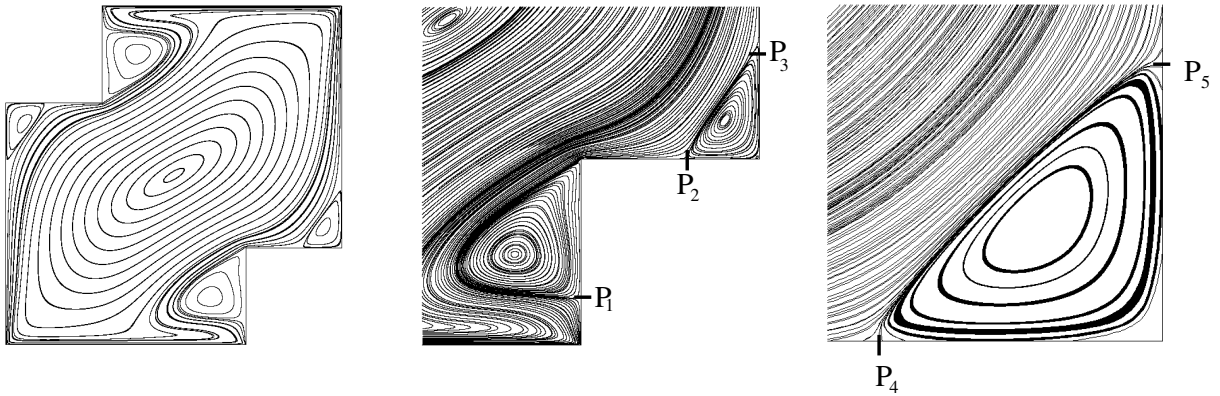


FIGURE 3.8 – Cavité doublement entraînée à $Re = 1000$: lignes de courant.

Dans le cadre de la mise en œuvre de méthodes de raccordement de maillages non conformes [Ahusborde & Glockner, 2010], nous avons proposé des solutions de référence à l'écoulement stationnaire autour d'un *obstacle fin* (cf. figure 3.11) et aux écoulements autour d'un cylindre de section *triangulaire*, stationnaire ($Re = 40$) ou instationnaire ($Re = 100$, cf. figure 3.12). Pour ce dernier, les coefficients moyens de traînée, de portance et le nombre de Strouhal ont été mesurés.

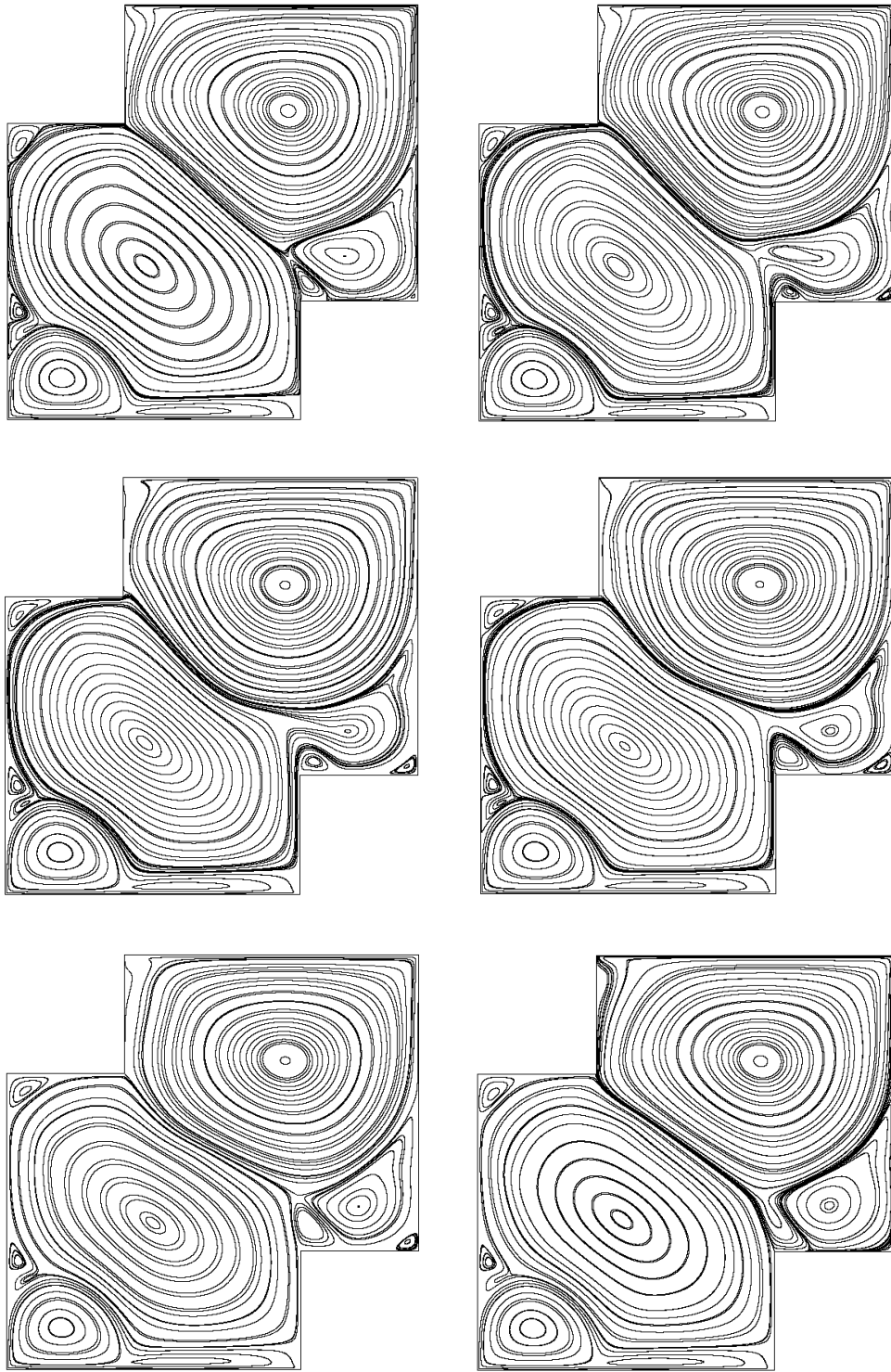


FIGURE 3.9 – Cavité doublement entraînée à $Re = 5000$. Évolution des lignes de courant sur une période (de gauche à droite et verticalement).

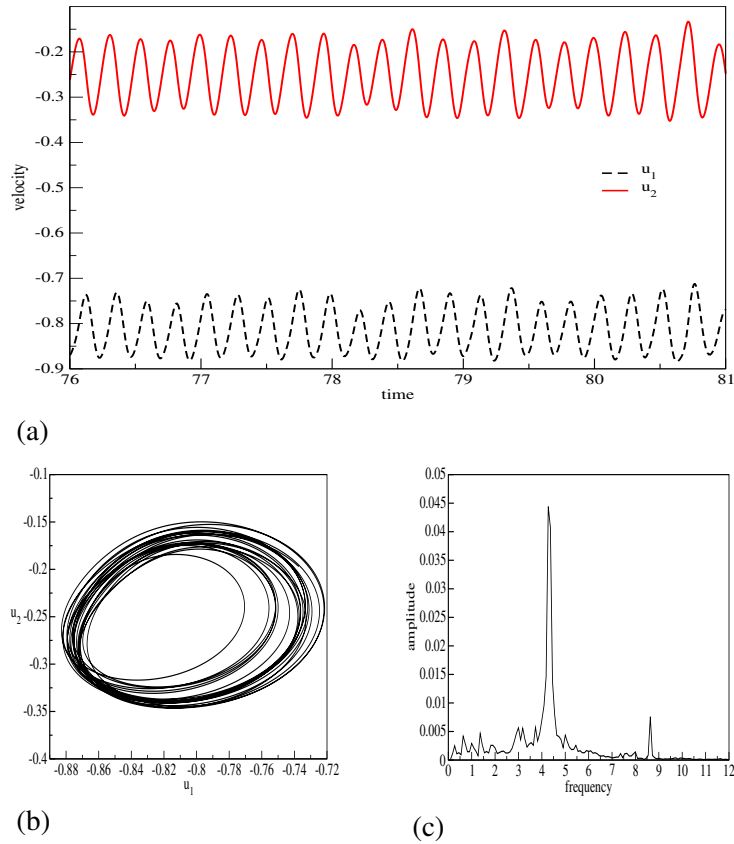


FIGURE 3.10 – Cavité doublement entraînée à $Re = 10000$. (a) variations temporelles des composantes du vecteur vitesse u_1 et u_2 en une position donnée (b) diagramme de phases dans le plan $u_1 - u_2$ (c) analyse spectrale sur u_1 .

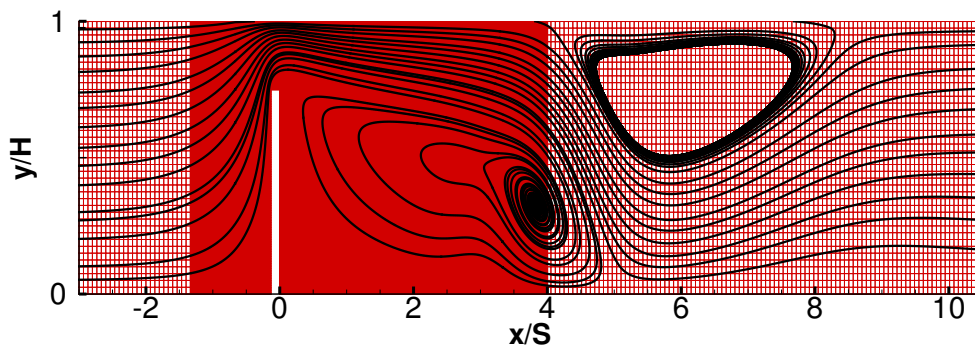


FIGURE 3.11 – Lignes de courant de l'écoulement stationnaire autour d'un obstacle fin. Un bloc de maillage plus fin est placé autour de l'obstacle, et jusqu'au centre de la première recirculation pour vérifier la bonne qualité du raccordement des solutions entre les blocs non conformes.

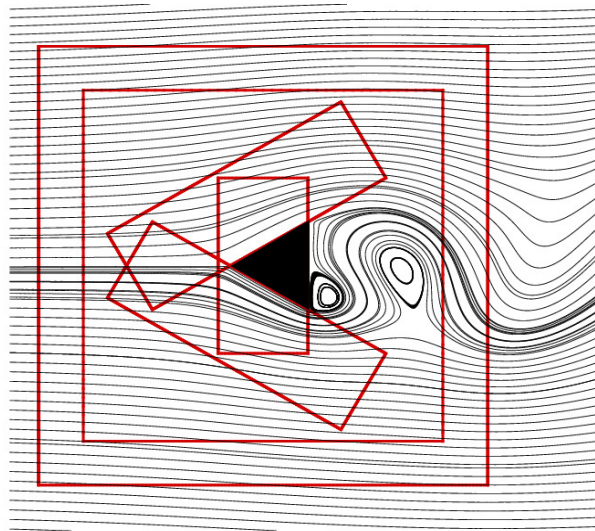


FIGURE 3.12 – Lignes de courant de l'écoulement instationnaire autour d'un cylindre de section *triangulaire* à un instant donné. Emboîtement des différents blocs non conformes autour du triangle.

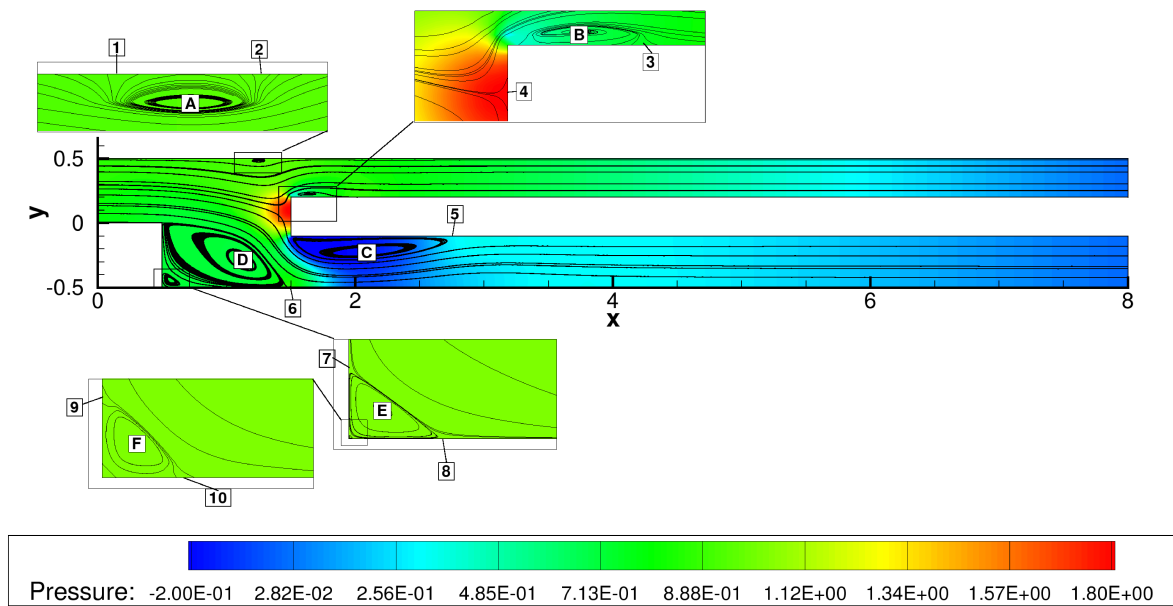


FIGURE 3.13 – Écoulement stationnaire dans une *bifurcation* (pression, lignes de courant et repérage des tourbillons).

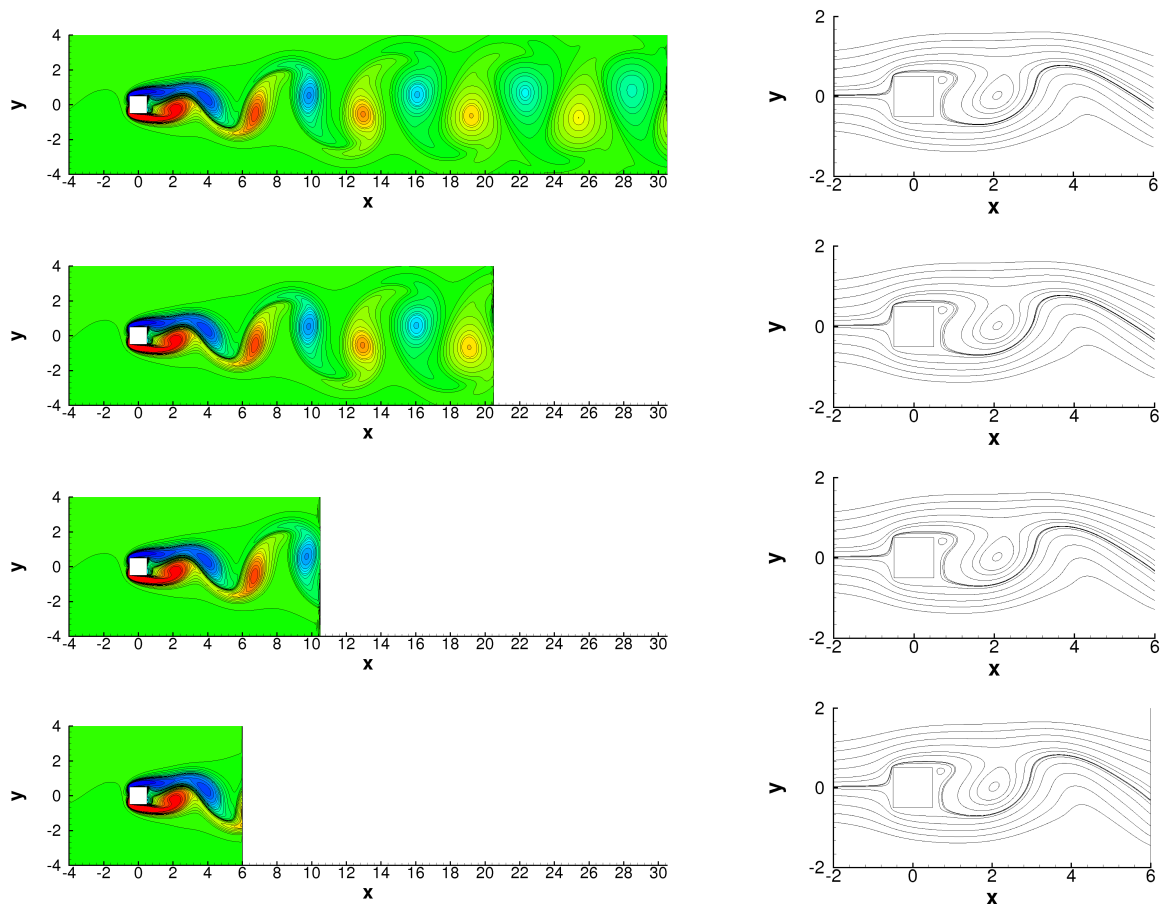


FIGURE 3.14 – Écoulement instationnaire autour d'un cylindre de section *carrée* : impact du rapprochement de la condition de sortie sur la vorticité (gauche) et les lignes de courant (droite).

Une solution de référence de l'écoulement dans *un canal à trois branches* (une entrée, 2 sorties, cf. figure 3.13) pour un nombre de Reynolds de 600 a été établie [Poux et al., 2011]. Les caractéristiques des tourbillons (intensités et positions) ont été mesurées et l'extrapolation de Richardson a été utilisée pour calculer l'énergie cinétique moyenne, les flux en sortie et les pertes de charge. Enfin, dans ce même article portant sur les conditions aux limites ouvertes, l'écoulement instationnaire autour d'un cylindre de section *carrée* a été étudié avec une grande précision par une étude de convergence *temporelle* à l'ordre 2 portant sur les coefficients de traînée et de portance, et sur le nombre de Strouhal. Il faut noter la présence, pour ces deux écoulements, de conditions aux limites ouvertes qui seront présentées d'un point de vue méthodologique dans la section 3.6. Il a été aussi mesuré l'impact quasi négligeable de la position de la sortie en la rapprochant de l'obstacle jusqu'à 6 fois la valeur du côté du carré (cf. figure 3.14).

Enfin, dans le cadre de la proposition d'une méthode de frontières immergées adaptée aux mailles rectangulaires [Picot & Glockner, 2017], nous avons étudié l'écoulement

stationnaire autour d'un cylindre de *section elliptique* à $Re = 20$ (ajouté à celui plus classique de section circulaire), pour lequel les coefficients de traînée et de portance ont été relevés (en détaillant les contributions de la pression et du cisaillement), ainsi que les coordonnées des points de décollement et de recollement (cf. figure 3.15).

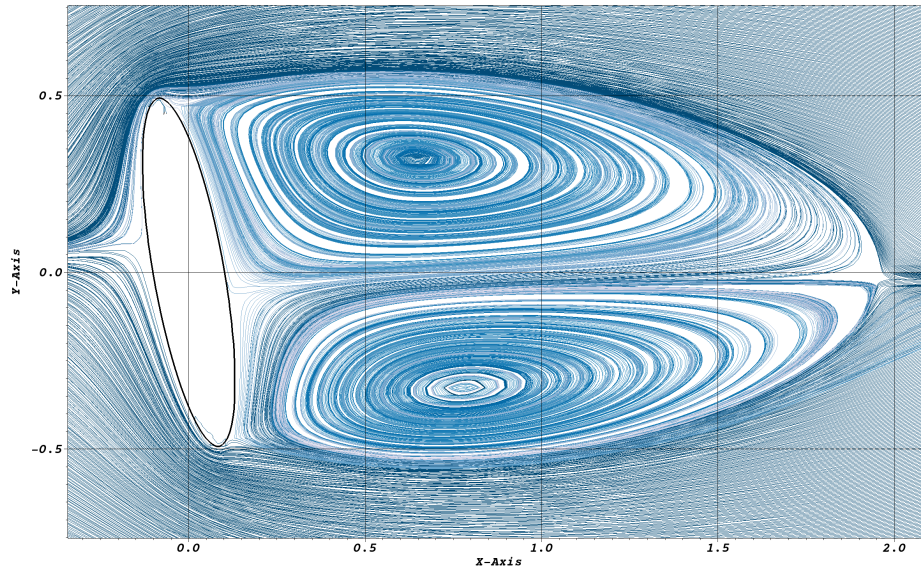


FIGURE 3.15 – Lignes de courant de l'écoulement stationnaire autour d'un cylindre de section elliptique à $Re = 20$ avec un maillage rectangulaire

3.3 Partitionnement de maillages multiblocs conformes

3.3.1 Contexte

La représentation discrète d'un domaine géométrique peut être envisagée par des maillages qui suivent le contour de la géométrie ; ceux-ci peuvent être à caractère non structuré, structuré monobloc et multiblocs, conformes ou non. Ces méthodes doivent satisfaire deux contraintes : une prise en compte du contour de la géométrie (les limites) et de la nature de la condition à la limite (conditions de Dirichlet, Neumann, Robin, etc.). Il est intuitif que les éléments du maillage suivent le contour de la géométrie, comme c'est le cas par exemple avec des maillages non structurés ou curvilignes. Mais il est aussi possible d'utiliser une autre approche qui consiste à plonger des objets dans le maillage, et à utiliser les méthodes de pénalisation volumique à l'ordre 1 en espace¹⁴, ou des méthodes de type frontières immergées¹⁵, précises par exemple à l'ordre deux. La figure 3.16 montre une géométrie simple prise en compte par une technique de pénalisation volumique, par un maillage à deux blocs conformes et par un maillage à deux blocs non conformes.

Dans Thétis, le choix s'est porté sur les maillages curvilignes orthogonaux multiblocs, conformes et non conformes. Ces derniers offrent plus de souplesse du fait de leur caractère non conforme sur certaines faces du maillage. Je me suis alors intéressé à deux questions en rapport avec ces maillages : comment raccorder les solutions sur des maillages non conformes (c'est l'objet de la prochaine section), et comment partitionner le maillage afin de résoudre les équations sur des machines parallèles.

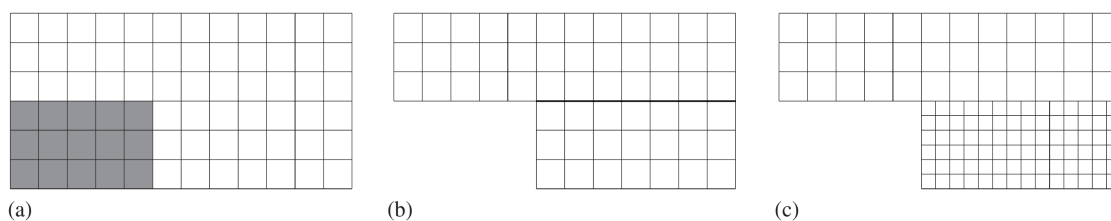


FIGURE 3.16 – Différents types de maillage : (a) *monobloc*, avec pénalisation du volume grisé (qui est maillé) (b) *multiblocs conformes* : le volume grisé en (a) n'est plus maillé. Le domaine est décomposé en deux blocs cartésiens de résolution identique (c) *multiblocs non conformes* : les deux blocs ont des résolutions différentes.

La parallélisation d'un code de calcul sur des machines de type cluster nécessite de répartir le maillage et les données sur différents processeurs qui ne partagent pas un espace

14. Arquis E, Caltagirone JP. Sur les conditions hydrodynamiques au voisinage d'une interface milieu fluide-milieu poreux : application 4 la convection naturelle. *CR Acad. Science de Paris* 1984 ; 299(1 Série II) : 1–4.

15. R. Mittal, G. Iaccarino, Immersed Boundary Methods, *Annual Review of Fluid Mechanics* 37 (1) (2005) 239–261, doi : 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743. R. Mittal, H. Dong, M. Bozkurttas, F. M. Najjar, A. Vargas, A. von Loebbecke, A versatile sharp interface immersed

de mémoire physique commun. Ils sont donc appelés à communiquer explicitement pour toute étape du calcul nécessitant l'information d'une cellule appartenant à un processeur voisin (calcul d'un gradient, d'un produit scalaire, etc.). Deux contraintes doivent alors être satisfaites : une *répartition équilibrée* des charges de calcul et une *minimisation des communications* entre les processeurs. La première contrainte a pour objectif qu'aucun processeur ne soit à l'arrêt alors que d'autres calculent ; elle maximise donc l'utilisation des ressources. La seconde contrainte a pour objectif de repousser au maximum la perte d'efficacité du parallélisme inhérente à nos méthodes. En effet, pour un maillage donné, lorsque le nombre de processeurs augmente, la taille locale des données à traiter diminue ; le volume des communications entre processeurs augmente, jusqu'à réduire l'efficacité globale si le temps passé à échanger les données devient non négligeable par rapport au temps de calcul des opérations internes à chaque processeur.

Nous présentons dans les deux sous-sections suivantes la méthode utilisée pour le partitionnement d'un maillage monobloc ainsi qu'une étude de scalabilité des solveurs des bibliothèques *hypre*¹⁶ et *lis*¹⁷, puis des travaux de recherche portant sur le partitionnement de maillages multiblocs conformes.

J'ai réalisé les premiers travaux dans le cadre de la parallélisation de Thétis, approche reproduite plus tard dans Notus. Comme nous en avons déjà discuté ils ont contribué à différents travaux de l'équipe. Dans Thétis, la stratégie a été de s'orienter vers des maillages multiblocs, essentiellement en raison d'une collaboration avec le CEA-Cesta dans lequel nous devons aborder des géométries complexes. Les travaux sur le parallélisme en monobloc ont été si encourageants en terme de temps de calcul que j'ai déposé un projet auprès de l'Institut Carnot pour les étendre au cas de maillages multiblocs qui a donné lieu au post-doctorat d'E. Ahusborde.

3.3.2 Partitionnement de maillages monoblocs

Pour un maillage cartésien monobloc, le partitionnement est plutôt trivial mais doit tout de même être effectué avec soin et efficacité, notamment pour des simulations sur des milliers de processeurs. L'objectif est de créer une *grille cartésienne de processeurs*, telle que le nombre de cellules associées à chaque processeur conduise à une répartition précise des charges de calcul entre processeurs. Parmi les partitionnements possibles qui équilibrent les charges, celui qui minimise le nombre de cellules à l'interface entre les processeurs est retenu afin de réduire les communications. Prenons le simple cas d'un domaine carré à répartir sur 4 processeurs. On peut imaginer un découpage en 4 bandes verticales (ou horizontales) ou bien un découpage en croix. Tous deux conduisent à un équilibre de charge mais à des quantités de communication différentes. Dans le premier cas nous avons 3 lignes de communication, dans l'autre seulement 2. Le choix final à faire dépend bien entendu du nombre de mailles dans chaque direction de l'espace.

Le partitionnement général d'un maillage monobloc consiste à tester l'ensemble des

16. https://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/

17. <http://www.ssisc.org/lis/>

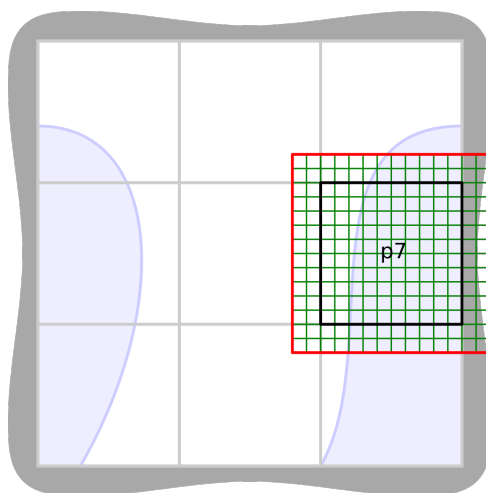


FIGURE 3.17 – Partitionnement d’un domaine en 9 sous-domaines ; maillage associé au processeur 7 et zone de recouvrement (entre les lignes noires et rouge).

partitionnements *équilibrés* possibles, et retenir celui qui *minimise les communications*, c’est à dire le nombre de cellules à l’interface entre les processeurs.

Une fois le partitionnement réalisé, il est nécessaire de construire le recouvrement du maillage entre les processeurs (cf. figure 3.17), puis, à l’aide de la librairie MPI, les procédures d’échanges de données pour être en mesure de calculer les solutions sur l’ensemble du domaine, sur un processeur comme sur des dizaines de milliers. Notons qu’il est possible de masquer de manière avancée le parallélisme, par l’encapsulation des appels aux procédures de la librairie MPI dans des procédures de plus haut niveau, ce qui facilite la prise en main du code de calcul par les non spécialistes du parallélisme.

Cette approche a été adoptée dans Thétis et dans Notus ; le temps de calcul pour réaliser le partitionnement est extrêmement faible bien que certaines étapes soient séquentielles. La résolution des systèmes linéaires est externalisée vers les solveurs des librairies *hypre*, *mumps*¹⁸ ou plus récemment *lis*. Il est important de savoir les utiliser à bon escient, selon les méthodes numériques, mais aussi selon la taille du problème global et le supercalculateur utilisé. Les trois études suivantes visent à répondre à quelques-unes de ces questions.

Scalabilité faible de Notus et des solveurs de la librairie *hypre*

Une étude de scalabilité faible consiste à fixer un nombre de cellules de maillage constant par cœur, et à augmenter le nombre de cœurs. Ainsi, la taille globale du problème augmente. Une scalabilité parfaite conduit à un temps de calcul constant quel que soit le nombre de processeurs. La figure suivante (3.18) représente une étude de scalabilité faible portant sur Notus et sur les solveurs de la librairie *hypre*, effectuée sur deux supercalculateurs (Curie du TGCC et Occigen du CINES), pour un nombre de processeurs allant de 16 à 4096. On observe :

18. <http://mumps.enseeiht.fr/>

- une scalabilité parfaite de Notus, c'est-à-dire pour les étapes de discrétisation des équations, de remplissage des matrices, de transport d'interface par la méthode VOF-PLIC, d'échanges des solutions, etc.
- une bonne scalabilité associée aux solveurs de *hypre* (interfaces *sstruct* pour Navier-Stokes et *struct* pour la pression), qui est celle attendue pour de tels problèmes. On n'observe pas de différence particulière entre les deux partitions d'Occigen Haswell et Broadwell. Enfin, une meilleure scalabilité est mesurée sur Curie comme le montre le tableau 1 dans lequel nous avons reporté le ratio des temps mesurés sur plusieurs nœuds à celui mesuré sur un nœud. Il est possible que cette différence provienne du mode de remplissage des nœuds de calcul par les processus MPI (par *core*, *socket*, etc.).

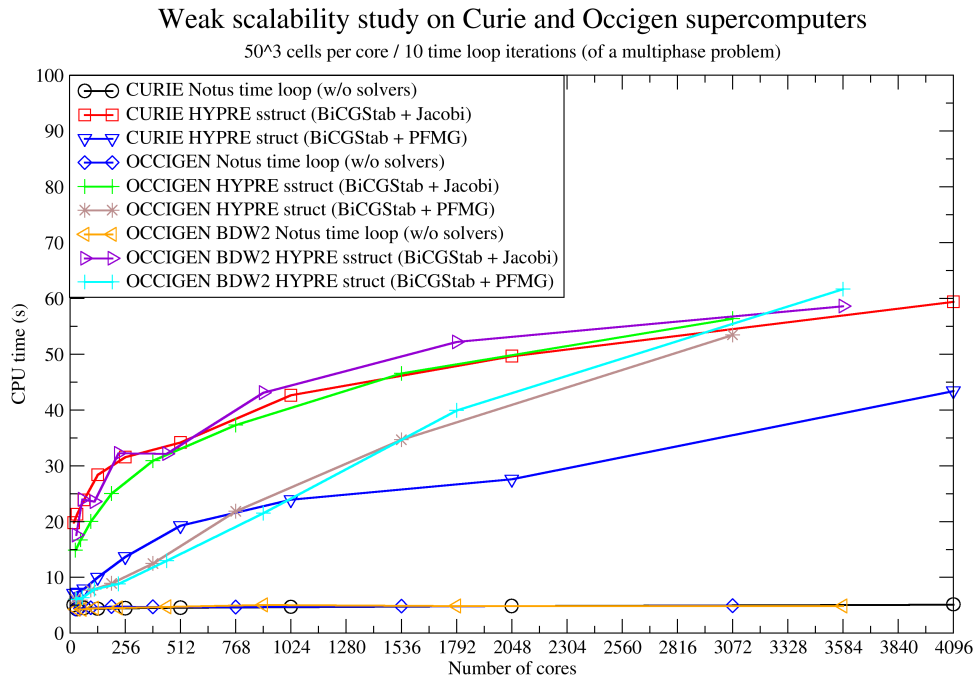


FIGURE 3.18 – Étude de scalabilité faible sur Curie et Occigen (partition standard et BDW2) sur 10 itérations en temps d'un problème diphasique. 50³ cellules sont attribuées à chaque cœur de processeur. Nous mesurons les temps passés strictement dans Notus (*w/o solvers*) et ceux passés dans les différents solveurs utilisés pour les étapes de prédiction (*hypre sstruct*) et de correction (*hypre struct*) de résolution des équation de Navier-Stokes.

Comparaison des scalabilités faibles du BiCGStab de *hypre* et de *lis*

Les solveurs de *hypre* sont développés pour être efficaces sur des dizaines de milliers de processeurs mais peuvent être moins performants que d'autres sur un nombre réduit de processeurs. La figure suivante (3.19) compare les temps CPU des BiCGStab de *lis* et de *hypre*. Elle montre qu'au-dessus de 2048 processeurs l'implémentation de *hypre* est

	<i>hypre</i> BiCGStab + Jacobi (sstruct)			<i>hypre</i> BiCGStab + PFMG (struct)		
Nb de nœuds	Curie	Occigen HSW	Occigen BDW	Curie	Occigen HSW	Occigen BDW
1	1	1	1	1	1	1
2	1.1	1.1	1.4	1.0	1.0	1.1
4	1.2	1.3	1.3	1.1	1.3	1.3
8	1.4	1.7	1.8	1.4	1.5	1.5
16	1.6	2.1	1.8	1.9	2.0	2.1
32	1.7	2.5	2.5	2.7	3.6	3.6
64	2.2	3.1	3.0	3.3	5.7	6.6
128	2.5	3.8	3.3	3.9	8.7	10.2

TABLE 1 – Scalabilité faible rapportée au nœud (de 16 cœurs sur Curie, de 24 et 28 cœurs sur Occigen (resp. HSW & BDW)). On remarque les meilleures performances mesurées sur Curie, surtout pour l'interface *struct*.

plus intéressante mais qu'en dessous il vaut mieux utiliser *lis* (qui peut être jusqu'à deux fois plus rapide).

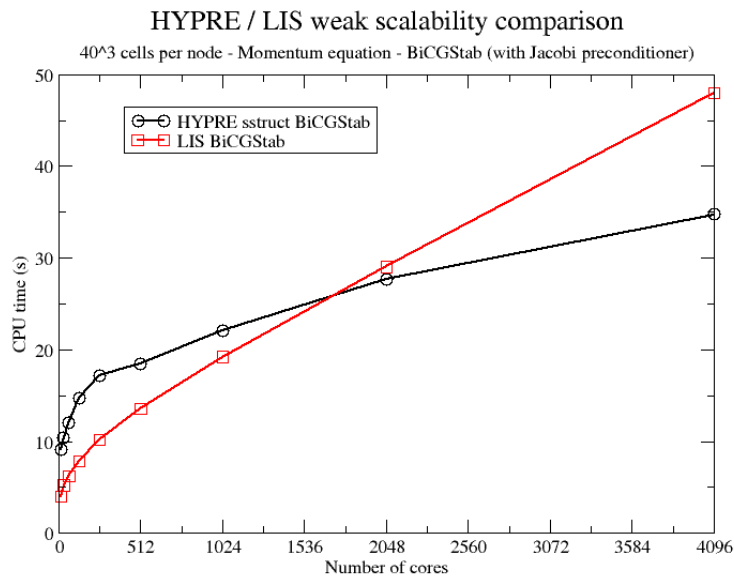


FIGURE 3.19 – Comparaison du solveur BiCGStab de *hypre* et *lis*. Étude de scalabilité faible sur l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour un problème diphasique. 40³ cellules sont attribuées à chaque processeur.

Comparaison de quelques préconditionneurs de la librairie *lis*

Pour des écoulements multiphasiques, le pas de temps est généralement assez petit en

raison des restrictions liées aux méthodes explicites de transport des interfaces. Ainsi, un préconditionnement de Jacobi suffit généralement à l'étape de prédiction de Navier-Stokes (c'est le cas pour les deux courbes précédentes). Néanmoins, dans certains cas, comme celui des écoulements monophasiques stationnaires, un préconditionnement plus robuste est nécessaire. La figure suivante (3.20) compare les temps CPU d'une étude de scalabilité faible de plusieurs préconditionneurs de *lis* et montre que les préconditionneurs ILUK(0) et ILUC sont plus performants.

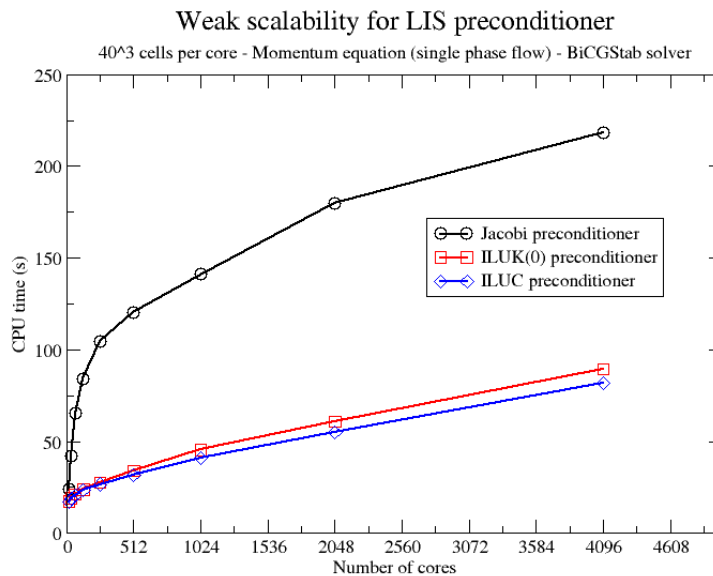


FIGURE 3.20 – Comparaison des préconditionneurs de *lis*. Étude de scalabilité faible sur l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour un écoulement monophasique. 40³ cellules sont attribuées à chaque processeur.

Conclusion / Perspectives

Cette section sur le calcul parallèle et la précédente sur les simulations, montrent tout l'intérêt de la démarche entreprise autour du calcul massivement parallèle. L'approche a été éprouvée sur des simulations jusqu'à 1 milliard de cellules sur 8192 cœurs, des tests de scalabilité sur la machine Blue Gene de l'IDRIS ont aussi montré qu'il restait encore efficace à 64 000 cœurs. Je pense que nous atteignons là des limites raisonnables pour un code de production dans les quelques années à venir, étant donné le volume de données associées à de telles simulations, le temps de post-traitement, d'analyse, etc.

Mais un code scalable est-il pour autant un code rapide? La plupart des logiciels n'exploitent pas la puissance crête des processeurs, les codes de mécanique des fluides

étant d'ailleurs très dépendants de la bande passante mémoire. Afin de poursuivre le travail entrepris, avec A. Lemoine, nous encadrons un stage de MASTER2 sur l'optimisation du code Notus. Le relai sera ensuite pris par un ingénieur de recherche ou un post-doctorant dans le cadre du projet ANR Superfon auquel nous participons. Nous nous orientons vers la programmation hybride MPI / OpenMP / Vectorisation avec la volonté de disposer dans Notus de nos propres solveurs itératifs, optimisés pour les architectures actuelles de type Intel Xeon.

3.3.3 Partitionnement de maillages multiblocs

Le partitionnement d'un maillage multiblocs conforme n'est plus trivial. Les partitionneurs de graphes (comme ceux des bibliothèques *metis*¹⁹ et *scotch*²⁰) produisent des partitions non structurées, inutilisables donc par un code structuré (cf. figure 3.21).

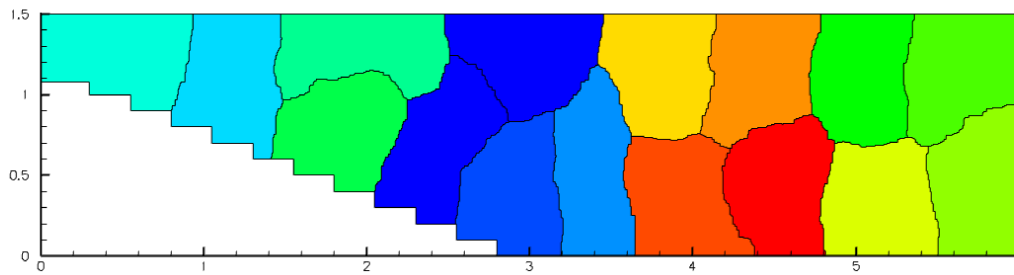


FIGURE 3.21 – Partitionnement d'un maillage multiblocs avec *metis*. Chaque couleur représente une partition. On remarque que l'on perd le caractère structuré d'un maillage initial multibloc.

Dans [Ahusborde & Glockner, 2011] présenté en annexe, une méthode originale de partitionnement géométrique optimisée en terme d'équilibre de charge, minimisation des échanges, nombre de blocs de résolution a été proposée. L'algorithme s'est avéré plus efficace que les méthodes *metis*, *reb*²¹ (recursive edge bisection) et *ga*²² (greedy algorithm). Le code a été ensuite couplé à la bibliothèque de solveurs *hypre*.

La première étape du partitionneur consiste à découper les blocs du maillage en blocs élémentaires. Ceci est fait en prolongeant les limites des blocs, créant ainsi, par intersection, les blocs élémentaires (cf. figure 3.22). C'est un moyen de proposer un partitionnement indépendant des choix qui peuvent avoir été faits à la création du maillage. Il faut noter que les blocs élémentaires ne respectent pas *a priori* l'équilibre des charges.

19. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/overview>

20. https://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch/scotch_fr.html

21. Berger MJ, Bokhari SH. A partitioning strategy for nonuniform problems on multiprocessors. IEEE Trans Comput 1987;C-36 :571–80.

22. Ytterström A. A tool for partitioning structured multiblock meshes for parallel computational mechanics. Int. J. of Supercomputer Applications and High Performance Computing 1997;11 :336–43.

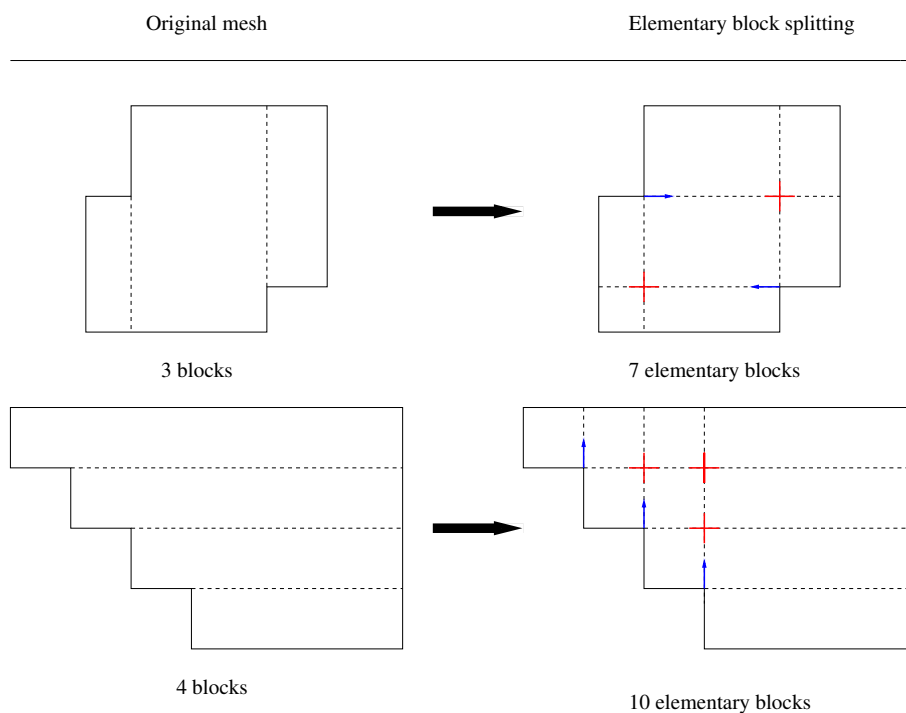


FIGURE 3.22 – Découpage en blocs élémentaires de maillages initialement constitués de 3 blocs (en haut à gauche) ou de 4 blocs (en bas à gauche) par prolongement des limites des blocs de départ.

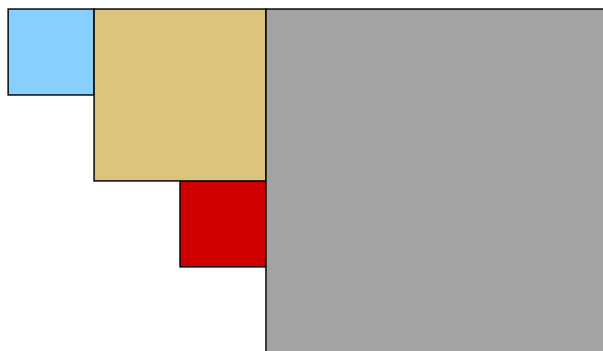


FIGURE 3.23 – Fusion des blocs élémentaires en macro-blocs.

La seconde étape du partitionneur consiste à fusionner les blocs élémentaires en macro-blocs pour former un nouveau partitionnement constitué de macro-blocs de tailles décroissantes (cf. figure 3.23).

Chaque macro-bloc est ensuite décomposé potentiellement en 3 zones (cf. figure 3.24) : une zone principale, centrale, à laquelle on appliquera un partitionnement monobloc standard (cf. figure 3.25), et 2 zones résiduelles en début et fin de bloc. La taille de la zone

principale est un multiple de la charge idéale. Les zones 2 et 3 de deux macro-blocs consécutifs sont affectées à un processeur de telle manière à ce que la somme de leur taille soit égale à la charge idéale. Ainsi, l'équilibre de charge est respecté. Les plus petits blocs peuvent être constitués d'une zone 2 ou bien d'une zone 2 et 3, créant des régions non contiguës sur un même processeur qui doivent être supportées par les solveurs.

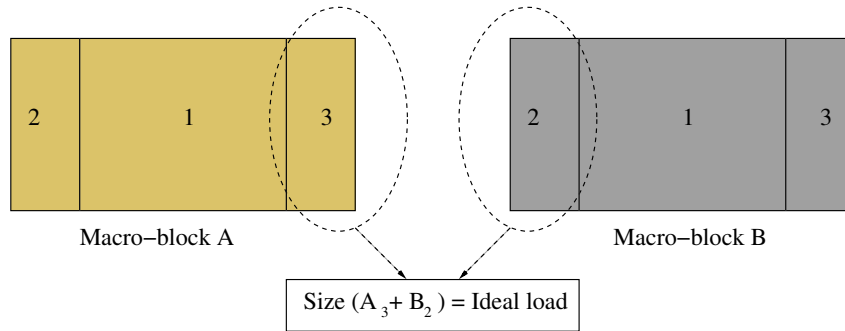


FIGURE 3.24 – Décomposition en zones des macro-blocs. La taille de la zone 1 est multiple de la charge idéale, les tailles des zones 2 et 3 de deux blocs adjacents sont calculées de manière à respecter l'équilibre des charges.

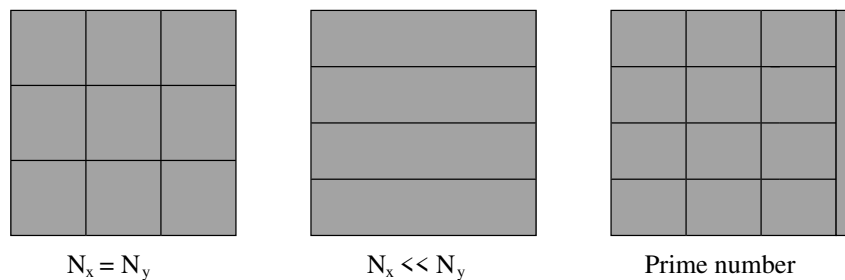


FIGURE 3.25 – Différentes possibilités de partitionnement de la zone principale (1). Le choix se fait selon des critères d'équilibre de charge et de minimisation des communications. N_x et N_y sont les nombres de cellules dans chaque direction de l'espace. La figure de droite correspond à un partitionnement possible pour un nombre de processeurs impair.

Si les inconnues ne sont pas placées au centre des cellules mais sur les coins (comme dans Thétis), le partitionnement conduit, dans certaines configurations, à l'apparition de lignes de maillage brisées (cf. figure 3.26). Il n'y a alors pas d'autre solution que de découper le macro-bloc concerné en 2 sous-blocs pour conserver le caractère structuré du maillage.

De l'ensemble de ces considérations géométriques, nous proposons l'algorithme (1) pour construire le partitionnement d'une géométrie quelconque.

La qualité d'un partitionneur se mesure à l'équilibre des charges, au nombre de cellules aux interfaces afin de minimiser les communications (ou *edge-cuts* dans le tableau 2)), au

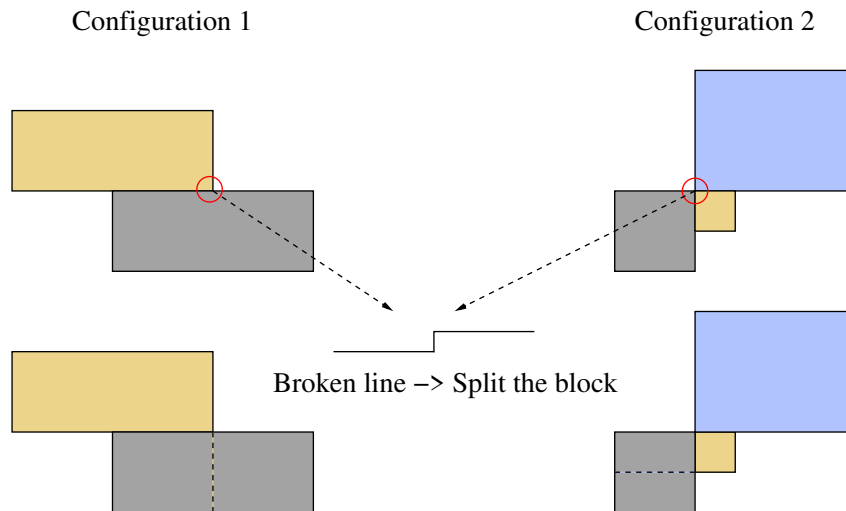


FIGURE 3.26 – Exemple de découpage des macro-blocs pour éviter les lignes de maillage brisées.

Algorithm 1 Stratégie de partitionnement

- 1: Découpage en blocs élémentaires
 - 2: **for** Chaque bloc élémentaire **do**
 - 3: Construire la liste de tous les macro-blocs rectangulaires possibles associés au bloc élémentaire
 - 4: **end for**
 - 5: **while** Partitionnement en macro-blocs en cours **do**
 - 6: Choisir le plus gros macro-bloc restant
 - 7: **if** Configuration 1 **then**
 - 8: Rejeter le macro-bloc de la liste
 - 9: **else if** Configuration 2 **then**
 - 10: Couper le bloc et actualiser la liste des macro-blocs
 - 11: **else**
 - 12: Accepter le macro-bloc et actualiser la liste des macro-blocs
 - 13: **end if**
 - 14: **end while**
 - 15: **for** Chaque macro-bloc **do**
 - 16: Construction des zones principales et résiduelles
 - 17: Partitionnement de la zone principale
 - 18: **end for**
 - 19: **return**
-

nombre de blocs et au temps de calcul. Nous avons comparé ces paramètres à ceux obtenus avec les partitionneurs *metis* (non structuré), *reb* (recursive edge bisection) et *ga* (greedy algorithm) sur 3 géométries : une cavité doublement entraînée, un canal en forme de Z et une géométrie plus complexe constituée d'un anneau, d'injecteurs et de connecteurs (cf. figure 3.27). Seuls les résultats sur la géométrie de l'anneau (cf. tableau 2) sont présentés ici par souci de concision. Nous mesurons pour ces trois géométries un très faible déséquilibre de charge (inférieur à 1%), un nombre de cellules aux interfaces très satisfaisant, un nombre de blocs raisonnable et un excellent temps de calcul. Le nombre de cellules aux interfaces est plus faible que ceux obtenus avec *metis* et *ga*, mais supérieur par rapport à *reb*. Néanmoins cette dernière méthode souffre d'un mauvais équilibre des charges qui la disqualifie (et qui n'a d'ailleurs pas fonctionné pour la géométrie de l'anneau).

Un partitionnement efficace n'est qu'une partie de la solution à la problématique d'un code parallèle. Il est ensuite nécessaire de vérifier la scalabilité de la discrétisation des équations, du remplissage des systèmes linéaires et de l'échange des solutions d'une part, des solveurs utilisés d'autre part.

Tout comme en monobloc, le premier point a été vérifié et nous avons obtenu une excellente scalabilité. Pour le second point, la figure 3.28 montre une étude de scalabilité forte sur la géométrie de l'anneau pour la résolution d'un Laplacien et correspondant à une étape de la résolution des équations de Navier-Stokes. Elle a été réalisée sur deux processeurs différents et met en avant un meilleur comportement du Harpertown par rapport au Nehalem, ainsi que l'intérêt de ne pas trop réduire le nombre de points par processeur afin de garantir une utilisation optimale des ressources de calcul (plus de 10 000 cellules par cœur).

La suite de l'article [Ahusborde & Glockner, 2011] est dédiée à la réalisation de simulations de référence sur des géométries non rectangulaires, telle que la cavité doublement entraînée pour un nombre de Reynolds $100 < Re < 5000$, la cavité entraînée dans un domaine en forme de L à $Re = 1000$ et l'écoulement dans un canal en forme de Z à $Re = 200$ (cf. section 3.2).

Nombres de processeurs	8	16	32	64
Déséquilibre de charge Thétis (%)	0.10	0.15	0.35	0.86
Déséquilibre de charge <i>metis</i> (%)	0.43	1.17	2.39	2.92
Déséquilibre de charge <i>reb</i> (%)	—	—	—	—
Déséquilibre de charge <i>ga</i> 0.001 (%)	0.08	0.05	0.08	0.05
Déséquilibre de charge <i>ga</i> 0.05 (%)	0.56	1.19	2.46	4.99
Edge-cuts Thétis	2254	4346	7884	14439
Edge-cuts <i>metis</i>	2240	4746	10113	16482
Edge-cuts <i>reb</i>	—	—	—	—
Edge-cuts <i>ga</i> 0.001	12730	14052	15805	19524
Edge-cuts <i>ga</i> 0.05	12504	13409	14800	18342
Nombre de blocs Thétis	17	25	41	73
Nombre de blocs <i>metis</i>	8	16	32	64
Nombre de blocs <i>reb</i>	—	—	—	—
Nombre de blocs <i>ga</i> 0.001	50	68	109	180
Nombre de blocs <i>ga</i> 0.05	42	48	60	92
Temps CPU Thétis (s)	0.04	0.048	0.048	0.048
Temps CPU <i>metis</i> (s)	1.24	1.23	1.29	1.32
Temps CPU <i>reb</i> (s)	—	—	—	—
Temps CPU <i>ga</i> 0.001(s)	1.63	1.64	1.65	1.67
Temps CPU <i>ga</i> 0.05 (s)	1.63	1.64	1.63	1.65

TABLE 2 – Performances comparées des partitionneurs sur la géométrie de l’anneau : déséquilibre de charge, edge-cuts (échange entre processeurs), nombre de blocs et temps de calcul.

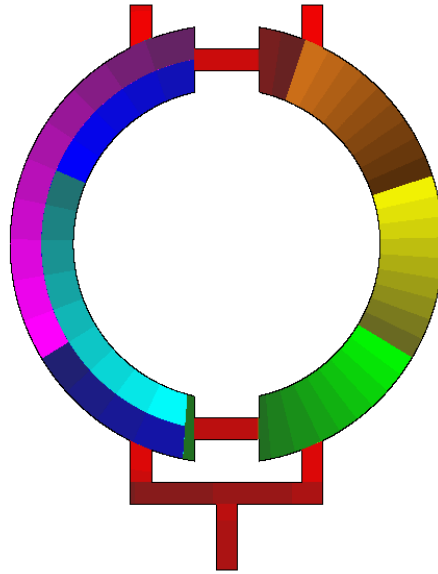


FIGURE 3.27 – Partitionnement de la géométrie de l’anneau (chaque couleur correspondant à un bloc).

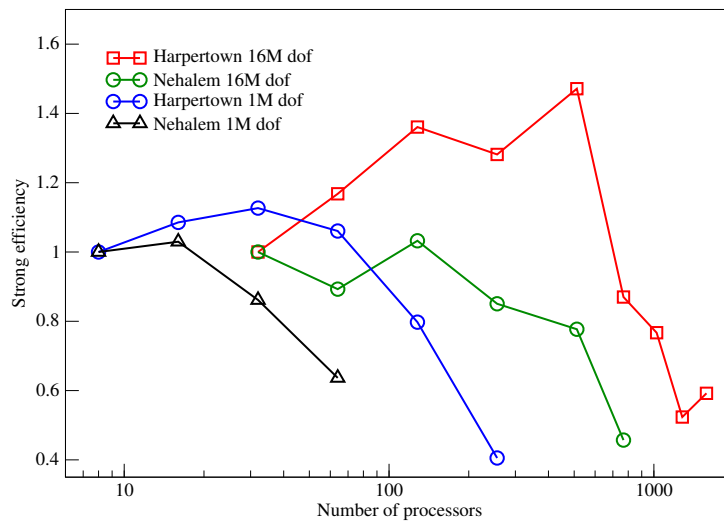


FIGURE 3.28 – Étude de scalabilité forte en multibloc pour deux processeurs différents. On fixe le nombre de points dans le domaine (resp. 16×10^6 et 10^6) et on fait varier le nombre de processeurs. L’efficacité idéale est de 1. On remarque l’intérêt d’avoir plus de 10 000 points par cœur pour une bonne efficacité. Une efficacité supérieure à 1 traduit généralement des effets de mémoire cache.

3.4 Raccordement de maillages non conformes

3.4.1 Contexte

Lorsque l'on suit une ligne d'un maillage non conforme, celle-ci s'interrompt à la limite d'un bloc ce qui rend localement le maillage non structuré (cf. figure 3.29). Le raccordement de la solution des équations de Navier-Stokes entre des blocs non conformes nécessite un travail particulier afin de s'assurer d'un transfert correct des solutions d'un bloc à l'autre. La résolution du couplage vitesse/pression et la satisfaction de la contrainte d'incompressibilité sont des éléments auxquels il faut attacher une grande importance. L'objectif que nous avions était de résoudre les équations de Navier-Stokes et les *conditions de raccord de manière implicite*, c'est-à-dire dans le même système linéaire.

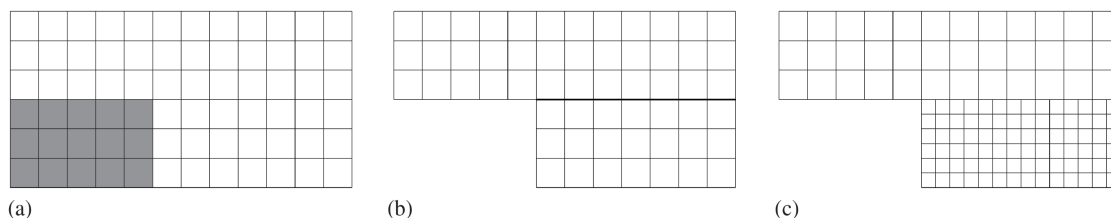


FIGURE 3.29 – Différents types de maillage : (a) monobloc avec pénalisation (b) multiblocs conformes (c) multiblocs non conformes.

Ces travaux se sont déroulés en plusieurs étapes, avec tout d'abord l'utilisation de la méthode de lagrangien augmenté²³ pour résoudre le couplage vitesse/pression, puis l'utilisation d'une méthode de correction de pression²⁴.

Les premiers travaux ont été réalisés dans le cadre d'une collaboration industrielle avec le CEA qui a donné lieu à la thèse de C. Romé co-dirigée avec J-P. Caltagirone, 2 publications [Romé & Glockner, 2005] et [Romé et al., 2007] ainsi qu'à des contrats de recherches. L'extension aux méthodes de correction de pression a été réalisée dans le cadre de la seconde année de post-doctorat d'E. Ahusborde sur un projet déposé auprès de l'Institut Carnot. Il a conduit à une publication [Ahusborde & Glockner, 2010]. Les deux dernières publications sont présentes en annexe, la première ayant posé les bases de la méthode est reprise dans ses extensions successives.

3.4.2 Méthode de lagrangien augmenté

La méthode de lagrangien augmenté consiste à introduire la contrainte d'incompressibilité dans les équations de conservation de la quantité de mouvement. Couplée à l'al-

23. Fortin M, Glowinski R., Méthodes de lagrangien augmenté. Applications à la résolution de problèmes aux limites. Collection Méthodes Mathématiques de l'Informatique. Ed. Dunot, 1982.

24. Timmermans et al., An approximate projection scheme for incompressible flow using spectral elements, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 22, 673–688, 1996

gorithme d'Uzawa on obtient la méthode itérative suivante à résoudre à chaque pas de temps :

Initialisation :

$$\mathbf{u}^{k=0} = \mathbf{u}^n \text{ et } p^{k=0} = p^n \quad (3.1)$$

Itérations : tant que $\nabla \cdot \mathbf{u}^k < \epsilon$:

trouver \mathbf{u}^{k+1} telle que :

$$\rho \left(\frac{\mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}^{k+1} \otimes \mathbf{u}^n) - \mathbf{u}^{k+1} \nabla \cdot \mathbf{u}^n \right) = -\nabla p^k + \mu \Delta \mathbf{u}^{k+1} + dr \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^{k+1}) \quad (3.2)$$

mise à jour de la pression :

$$p^{k+1} = p^k - dr \nabla \cdot \mathbf{u}^{k+1} \quad (3.3)$$

$$k = k + 1$$

Solution :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^k \text{ et } p^{n+1} = p^k \quad (3.4)$$

Le nombre d'itérations de l'algorithme d'Uzawa peut être élevé ce qui rend la méthode coûteuse en temps de calcul. Dans la pratique, pour des problèmes instationnaires, l'algorithme est interrompu avant convergence à la précision machine de la divergence du vecteur vitesse. Un choix judicieux du paramètre dr permet d'accélérer la convergence.

L'originalité du travail proposé dans [Romé & Glockner, 2005] est de réaliser une interpolation polynomiale de la vitesse à l'interface entre les blocs (à l'ordre 2 ou 3), et d'introduire les coefficients des polynômes d'interpolation dans le système linéaire (pour assurer le couplage implicite des solutions obtenues sur différents blocs). Afin d'avoir suffisamment de recouvrement entre les blocs pour rendre possible l'interpolation, des nœuds fantômes sont ajoutés aux extrémités des blocs sur lesquels porte l'interpolation à l'aide des nœuds du bloc adjacent (cf. figure 3.30).

La méthode proposée a été vérifiée et validée sur deux écoulements académiques avec un ordre de convergence spatial de deux. Mais la divergence du vecteur vitesse dans le domaine est contrôlée par la divergence au niveau de l'interface entre les blocs, elle-même dépendante de l'ordre d'interpolation, l'ordre 3 assurant une plus petite divergence du vecteur vitesse. Ainsi, le problème de conservation de la masse reste présent puisque l'interpolation agit comme une condition de Dirichlet ne satisfaisant pas l'incompressibilité de l'écoulement aux limites des blocs.

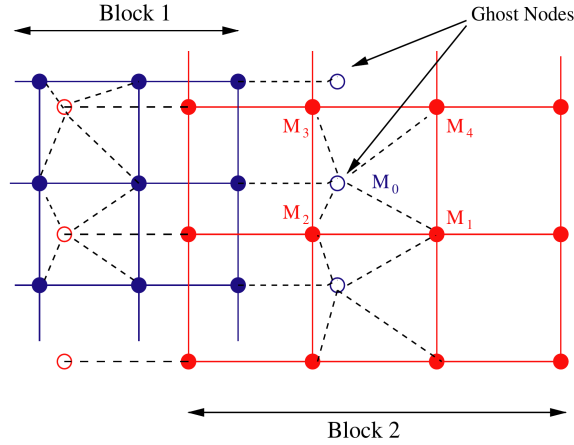


FIGURE 3.30 – Interfaces non conformes entre 2 blocs (bleu et rouge) : ajout de nœuds fantômes (cercles) et interpolation à l'aide du bloc adjacent.

Pour rendre le vecteur vitesse solénoïdal, on peut appliquer l'étape de projection vectorielle²⁵ qui consiste à décomposer le vecteur vitesse en :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* + \mathbf{u}' \quad (3.5)$$

où \mathbf{u}^* est la vitesse calculée par la méthode de lagrangien augmenté et \mathbf{u}' la correction donnée par la résolution de l'équation

$$\nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}') = -\nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}^*) \quad (3.6)$$

Nous proposons dans [Romé et al., 2007] d'adapter cette méthode aux maillages multiblocs de la manière suivante : pour chaque bloc, par l'application du théorème de la divergence, l'intégrale de la divergence de la vitesse prédite est égale à l'intégrale des débits sortants des faces des blocs ; la divergence n'étant pas nulle, on peut l'utiliser pour

25. Caltagirone J-P., Breil J., Sur une méthode de projection vectorielle pour la résolution des équations de Navier-Stokes. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, Paris, Série IIb* 1999 ; 327 :1179–1184.

corriger les débits entre les blocs, et donc s'en servir comme condition à écrire sur u' à l'interface entre les blocs. Ainsi, pour un bloc i donné, si N est le nombre de cellules à l'interface avec d'autres blocs, pour chaque cellule à l'interface, de normale \mathbf{n}_l , de section S_l , nous avons proposé comme condition à la limite :

$$\mathbf{u}'_l \cdot \mathbf{n}_l = \frac{\int_{\Omega_i} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \, dv}{\sum_{j=1}^N S_j} \quad (3.7)$$

Ainsi, pour chaque bloc, la divergence du vecteur vitesse après correction est nulle. La méthode a été vérifiée sur des cas tests à la solution exacte connue (écoulements de Poiseuille et de Couette), et validée sur les écoulements autour d'une marche descendante et autour d'un cylindre. Pour ce dernier cas, un bloc de maillage polaire a été utilisé autour du cylindre, bloc plongé dans un domaine au maillage cartésien. Il faut néanmoins noter que si la divergence est nulle dans chaque bloc, il reste une (faible) différence de débit entre l'entrée et la sortie du domaine.

3.4.3 Méthode de correction de pression

La réponse à cette dernière question a été donnée dans un troisième article grâce au passage à la méthode de correction de pression et à son adaptation aux maillages non conformes [Ahusborde & Glockner, 2010]. Nous nous intéressons ici plus particulièrement à la méthode de correction de pression de Timmermans²⁶ tirant partie de l'écriture sous forme rotationnelle du tenseur des contraintes (possible uniquement si la viscosité est constante), et améliorant la méthode initialement proposée par Goda²⁷.

Écrivons ici l'algorithme qui résulte tout d'abord d'une étape de prédiction :

trouver \mathbf{u}_*^{n+1} telle que :

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\mathbf{u}_*^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}_*^{n+1} \otimes \mathbf{u}^n) - \mathbf{u}_*^{n+1} \nabla \cdot \mathbf{u}^n \right) &= -\nabla p^n + \mu \Delta \mathbf{u}_*^{n+1}, \quad \text{dans } \Omega, \\ \mathbf{u}_*^{n+1} &= \mathbf{0}, \quad \text{sur } \partial\Omega, \end{aligned} \quad (3.8)$$

26. Timmermans et al., An approximate projection scheme for incompressible flow using spectral elements, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 22, 673–688, 1996

27. Goda K., A multistep technique with implicit difference schemes for calculating two- or three-dimensional cavity flows, *Journal of Computational Physics*, 30, 76–95, 1979

suivie de l'étape de correction de pression :

trouver \mathbf{u}^{n+1} et φ^{n+1} tels que :

$$\Delta\varphi^{n+1} = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}_*^{n+1}, \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial\varphi^{n+1}}{\partial\mathbf{n}} = 0, \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (3.10)$$

avec :

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_*^{n+1} - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla\varphi^{n+1}, \quad (3.11)$$

$$p^{n+1} = \varphi^{n+1} + p^n - \mu \nabla \cdot \mathbf{u}_*^{n+1}. \quad (3.12)$$

L'étape de prédiction portant sur la vitesse et l'étape de correction portant sur l'incrément de pression sont toutes les deux résolues par la méthode présentée précédemment d'interpolation implicite des solutions sur les interfaces non conformes entre les blocs. Néanmoins, la composante normale à l'interface de la vitesse prédite ne peut être corrigée par le gradient de l'incrément de pression qui n'est pas calculable à l'interface (points de vitesse u_2 et u_4 sur la figure 3.31). Pour contourner ce défaut, le recouvrement entre les blocs est prolongé d'une maille sur laquelle se fait alors l'interpolation de l'incrément de pression (cf. figure 3.32). Le lieu de l'interpolation de la vitesse n'est par contre pas modifié. Ainsi le gradient de l'incrément de pression est maintenant calculable sur les nœuds de vitesse sur lesquels se fait l'interpolation, corrigeant l'interpolation de son caractère non solénoïdal. Grâce à cette approche, un champ de vitesse à divergence nulle est obtenu sur tout le domaine, interfaces comprises.

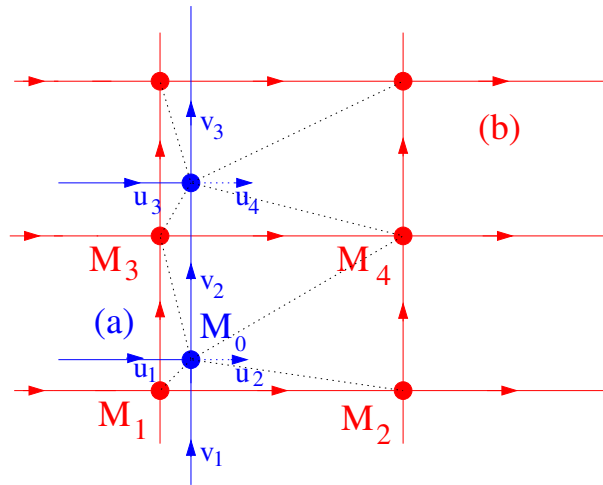


FIGURE 3.31 – Interpolation de la pression à l'aide des points du bloc adjacent.

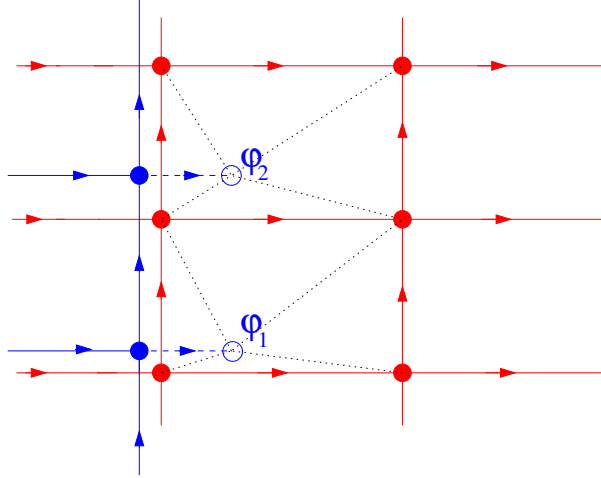


FIGURE 3.32 – Extension de la grille par ajout de nœuds et interpolation à l’aide des nœuds du bloc adjacent.

Néanmoins, nous avons observé que la pression n’est plus continue à l’interface, certainement en raison de l’erreur d’interpolation sur l’incrément de pression qui s’accumulent dans la pression au cours du processus temporel de résolution, mais aussi en raison de l’erreur sur la divergence du vecteur vitesse à l’interface qui est entachée de l’erreur d’interpolation (et ne peut donc pas être utilisée dans la mise à jour de la pression, cf. équation 3.12). Pour contourner cette difficulté, l’algorithme de correction a été modifié en ajoutant une troisième étape d’interpolation *a posteriori* de la pression sur l’interface (non étendue) assurant à la fois le caractère solénoïdal de la vitesse et la continuité de la pression.

La méthode proposée a été ensuite vérifiée et validée précisément sur une série de cas tests bidimensionnels : l’écoulement de Poiseuille - qui est un cas intéressant puisque la solution doit être obtenue à la précision machine près -, le tourbillon de Green-Taylor, la cavité entraînée, l’écoulement autour d’un obstacle fin et celui instationnaire autour d’un triangle.

Conclusion / Perspectives

L’ensemble des travaux sur le partitionnement de maillages multiblocs et sur le raccordement de maillages a été réalisé dans le cadre de Thétis en 2D. L’extension au 3D, bien qu’envisageable, aurait été assez lourde à mettre en place d’autant plus que d’autres points restaient à traiter, en particulier le transport des interfaces et l’écriture de schémas explicites à l’interface entre les blocs. Au contraire, dans le cadre du projet Notus, pour traiter les géométries complexes, j’ai fait le choix de simplifier l’approche en réduisant les maillages aux stricts maillages cartésiens monoblocs, et en travaillant sur la méthode des frontières immergées présentée dans la section suivante.

3.5 Méthodes des frontières immergées pour la prise en compte de géométries complexes

3.5.1 Contexte

Nous nous intéressons ici à des frontières solides et immobiles et aux méthodes de forçage direct (*direct forcing immersed boundary methods*)²⁸. Elles consistent à écrire, sur des points *fantômes* (cf. figure 3.33), des relations algébriques qui tiennent compte de la géométrie passant dans la maille de manière quelconque et de la nature de la condition à la limite à appliquer sur une frontière. La valeur calculée sur les nœuds fantômes est utilisée lors de la discrétisation des équations sur les nœuds fluides à proximité de la frontière. Cette approche permet de conserver la simplicité et la robustesse des schémas de discrétisation sur des maillages rectangulaires ; elle permet aussi de bénéficier de solveurs/préconditionneurs parmi les plus performants et de traiter des géométries complexes à l'ordre 2 en espace.

C'est dans le cadre de projets déposés auprès du cluster CPU de l'IdEX de l'Université de Bordeaux que ces travaux ont été initiés. Il s'agissait ici de mettre en œuvre une méthode permettant l'étude des écoulements thermo-aéraulique dans les grottes ornées comme la grotte de Lascaux. Les deux méthodes sus-citées ont été étudiées et améliorées dans le cadre de maillages rectangulaires dans un article dans *Journal of Computational Physics* [Picot & Glockner, 2017] joint en annexe.

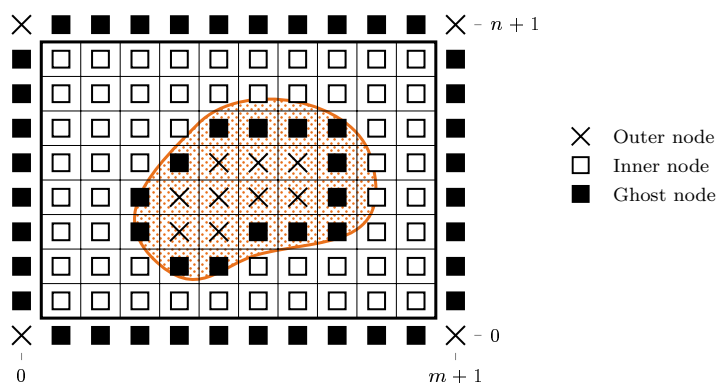


FIGURE 3.33 – Exemple d'un maillage cartésien et d'une frontière immergée. Symbolisation des différents types de cellules, extérieures, fantômes et intérieures. Une relation algébrique est écrite sur les cellules fantômes tenant compte de la condition à la limite sur la frontière immergée qui passe de manière quelconque dans la maille.

28. R. Mittal, G. Iaccarino, Immersed Boundary Methods, Annual Review of Fluid Mechanics 37 (1) (2005) 239–261, doi : 10.1146/annurev.fluid.37.061903.175743. R. Mittal, H. Dong, M. Bozkurttas, F. M. Najjar, A. Vargas, A. von Loebbecke, A versatile sharp interface immersed

3.5.2 Frontières immergées et maillages rectangulaires

On s'intéresse à deux méthodes de forçage direct :

- la méthode proposée par Mittal²⁹ - *méthode linéaire* dans la suite du texte - consiste à interpoler la solution sur le symétrique du point fantôme par rapport à l'interface (appelé point image, cf. figure 3.34 gauche), puis à appliquer par différence finie la condition à la limite (Dirichlet ou Neumann) sur le segment reliant ces deux points (son milieu est donc situé sur l'interface).
- la méthode proposée par Coco³⁰ - *méthode directe* - utilise directement un point de l'interface et non pas le point image (cf. figure 3.34 droite) dans l'interpolation.

Pour l'équation de Poisson, si l'opérateur de diffusion est discrétisé à l'ordre 2 en espace, une interpolation d'ordre 2 est nécessaire pour satisfaire la condition de Dirichlet à cet ordre. Par contre, pour la condition de Neumann, un ordre est perdu et il faut donc envisager une interpolation d'ordre 3 pour conserver un ordre de convergence global de 2. Les polynômes d'interpolation utilisés sont ceux de Lagrange et ne sont pas détaillés ici.

Définissons maintenant la *compacité* d'un stencil d'un schéma numérique (le stencil étant l'ensemble des cellules utilisées par le schéma). La taille d'un stencil est égale à n s'il est composé, au plus, dans chaque direction de l'espace, de $2n+1$ cellules de maillages (cf. figure 3.35). Nous dirons que la méthode est *compacte* si $n = 1$. On peut observer, figure 3.36, dans le cadre de maillages rectangulaires, que la méthode linéaire nécessite des *stencils* dont la taille est supérieure à 2. Cela peut conduire à une perte locale de précision, des difficultés d'implémentation ou d'utilisation de certains solveurs, comme ceux de la librairie *hypre* : les matrices ne sont plus à bandes et les préconditionneurs les plus performants de type multigrille géométrique ne sont plus accessibles. De plus, la méthode directe n'est plus utilisable avec des mailles rectangulaires, car le point fantôme n'est plus un point utilisé par l'interpolation ; le problème devient alors mal posé.

L'objectif des travaux effectués sur ces méthodes a consisté à réduire la taille du stencil tout en conservant un ordre de convergence spatial de 2. La méthode proposée dans [Picot & Glockner, 2017] consiste à *décaler* le point fantôme vers la frontière, de telle manière que les méthodes linéaire ou directe, appliquées à ce nouveau point, respectent un stencil réduit et *identique* à celui obtenu pour une maille carrée (cf. figure 3.37). Une seconde interpolation permet de ramener la solution sur le point de maillage fantôme. La figure 3.38 illustre le décalage des points fantômes et, par comparaison à la figure 3.36, la réduction de la taille des stencils de la méthode proposée.

29. Ghias, R. Mittal, H. Dong, A sharp interface immersed boundary method for compressible viscous flows, *Journal of Computational Physics*, Volume 225, Pages 528-553, 2007.

30. A. Coco, G. Russo, Finite-difference ghost-point multigrid methods on Cartesian grids for elliptic problems in arbitrary domains, *Journal of Computational Physics*, Volume 241, May, Pages 464-501, 2013.

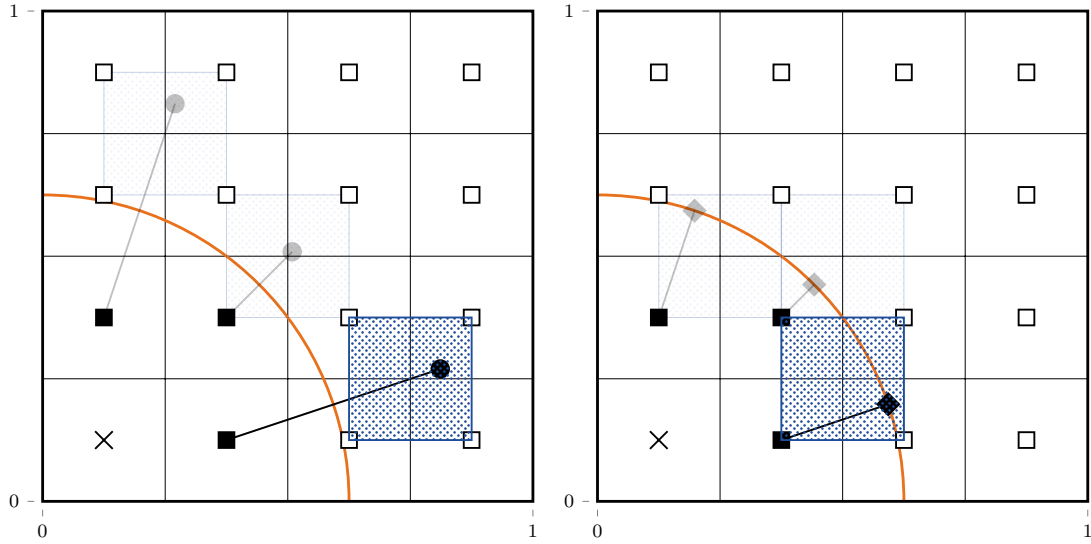


FIGURE 3.34 – Exemples d’ensembles de cellules servant aux interpolations pour la méthode linéaire (gauche) et directe (droite) ; les cellules sont de forme carrée.

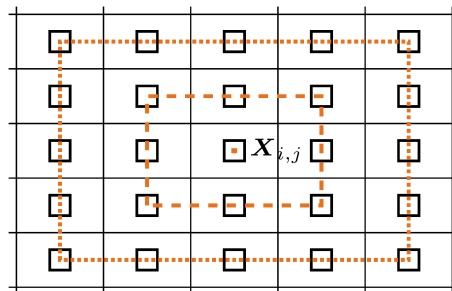


FIGURE 3.35 – Taille des stencils de discrétisation d’une méthode numérique au point X_{ij} . Un stencil de taille 1 utilise 9 points, un stencil de taille 2 utilise 25 points.

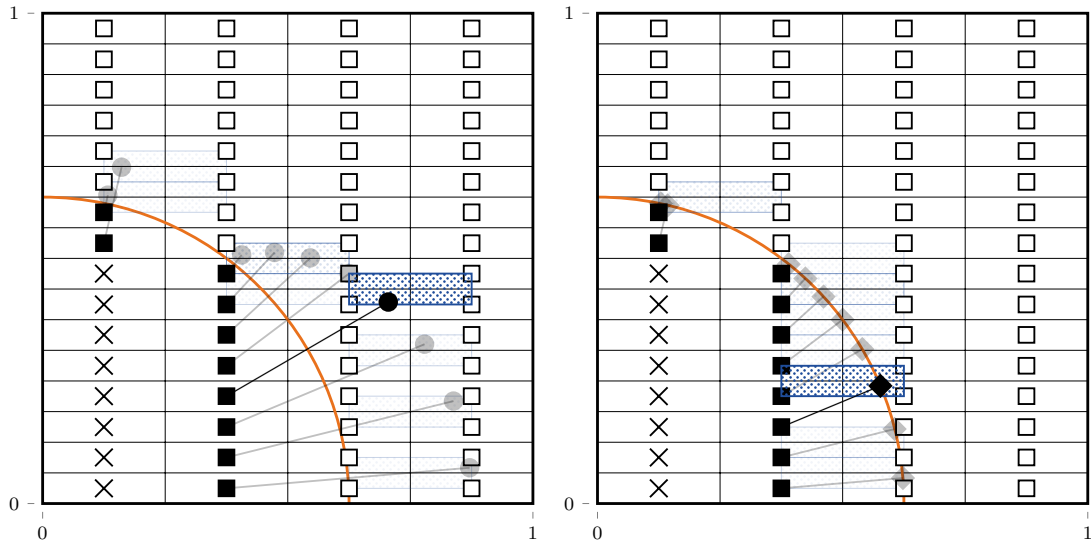


FIGURE 3.36 – Exemples d’ensembles de cellules servant aux interpolations pour la méthode linéaire (gauche) et directe (droite) - les cellules sont de forme rectangulaire.

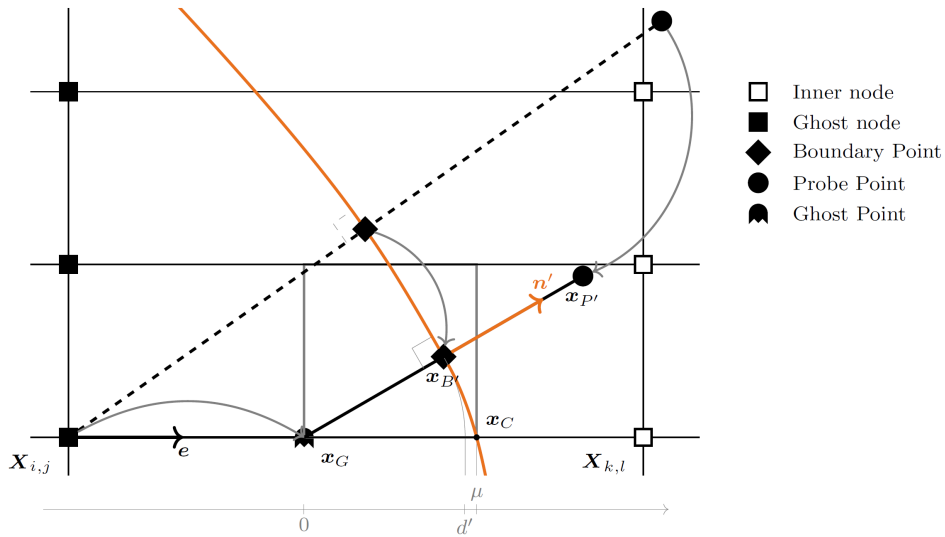


FIGURE 3.37 – Décalage du point fantôme $X_{i,j}$ vers la droite pour créer un nouveau point fantôme x_G permettant de réduire le stencil de discrétisation.

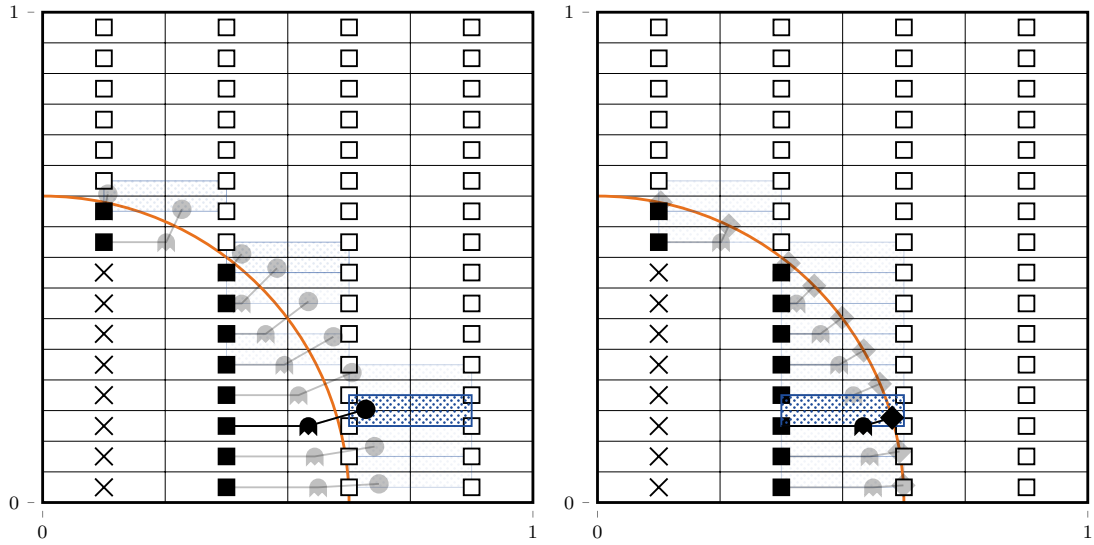


FIGURE 3.38 – Décalage des points fantômes pour le cas de maillages rectangulaires, méthodes linéaire (gauche) et directe (droite). La taille des stencils de discrétisation est réduite à celle obtenue avec des mailles carrées (1 pour la méthode directe, 2 pour la méthode linéaire).

Une analyse précise de la taille des stencils pour les deux conditions aux limites de Dirichlet et de Neumann a été réalisée en fonction du ratio $a = \frac{\Delta y}{\Delta x}$ des pas d'espace de la maille. Le tableau 3 récapitule les tailles des stencils obtenues pour les approches standards et la méthode de décalage des points fantômes que nous proposons. Quelle que soit l'anisotropie du maillage, la taille du stencil est ramenée à 1 ou 2 (selon la méthode et la nature des conditions limites), c'est-à-dire à une taille identique à celle observée sur des mailles carrées. D'autre part, la méthode directe devient maintenant utilisable avec des maillages rectangulaires.

Ratio des pas d'espace	Méthode	Taille du stencil	
		Dirichlet $p = 2$	Neumann $p = 3$
1	Linéaire	2	3
	Directe	1	2
$a > 1$	Linéaire	$[2a]$	$[2a] + 1$
	Directe	n/a	n/a
$a > 1$	Linéaire décalée	2	3
	Directe décalée	1	2

TABLE 3 – Taille du stencil pour l'équation de Poisson avec différentes conditions aux limites immergées, différentes méthodes, et différents ratio de pas d'espace $a = 1, 2.8, 7.6$. Les ordres d'interpolation p et q sont fixés pour assurer un ordre de convergence de 2.

3.5.3 Résultats sur l'équation de Poisson

La méthode a d'abord été vérifiée sur l'équation de Poisson. La géométrie étudiée est celle d'un disque immergé dans un domaine carré ; des conditions de Neumann ou de Dirichlet sont appliquées sur le bord du disque ; on choisit une solution exacte parabolique. Plusieurs ratios des pas d'espaces sont testés ($a = 1, 2.8, 7.6$). L'ordre de convergence attendu de 2 est vérifié pour tous les ratios (cf. figure 3.39 pour le cas de Neumann ; par soucis de concision les autres courbes ne sont pas montrées ici). Rappelons tout de même que pour obtenir l'ordre 2 avec une condition de Neumann, une interpolation d'ordre 3 est nécessaire. On peut aussi observer sur la figure 3.39 que la précision de la méthode proposée est plus grande que celle obtenue sans décalage des points fantômes, du fait d'un stencil plus compact contribuant à rapprocher de la limite les points servant à l'interpolation.

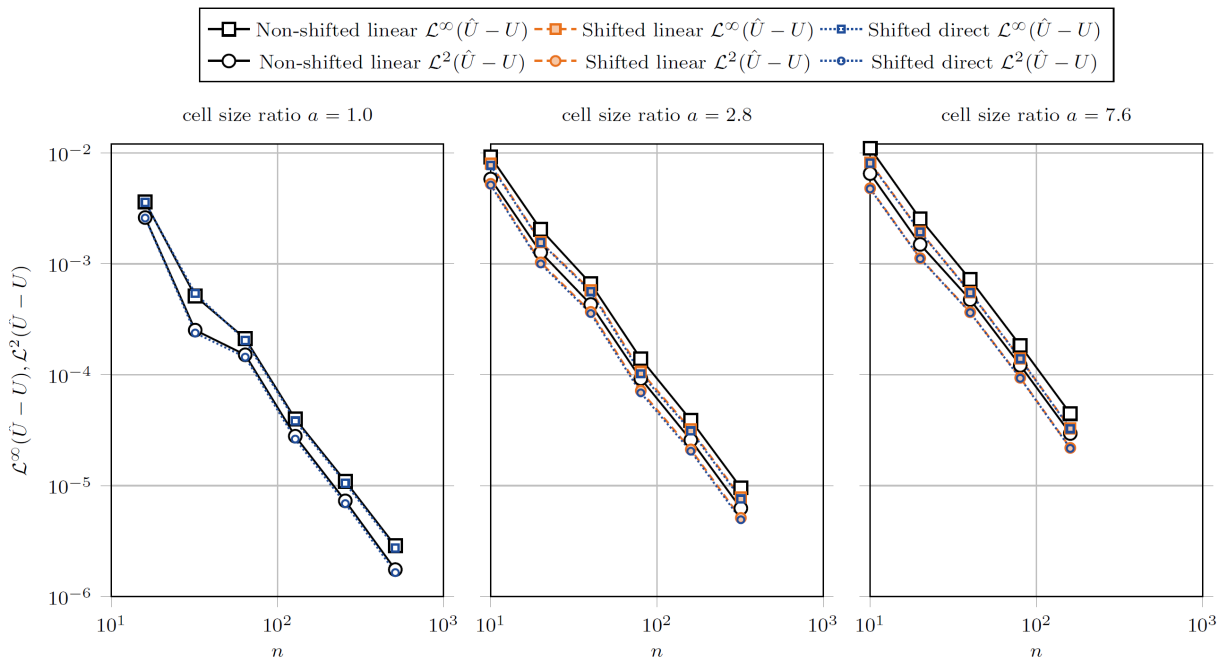


FIGURE 3.39 – Convergence en espace pour différents ratios de pas d'espace $a = 1, 2.8, 4.7, 7.6$. Cas test du disque avec une condition de Neumann. Une interpolation d'ordre 3 est utilisée.

Dans le cas d'un motif géométrique plus complexe et d'une condition de Dirichlet, l'ordre 2 a aussi été vérifié (cf. cas test de la fleur figure 3.40). On observe sur ce cas test que si la courbure de la frontière est insuffisamment décrite par le maillage (cf. figure 3.41), l'interpolation peut utiliser des points à l'intérieur de l'objet (*outer node*). Traiter ces points comme des points fantômes supplémentaires peut réduire dans certains cas la précision de la méthode. Ceci est aussi vérifié lorsqu'une rangée de points du maillage est entourée de part et d'autre par deux rangées de points fantômes. Pour remédier à ces problèmes, on pourrait décaler le stencil de discrétisation, mais, dans le cadre d'une

méthode au stencil compact, on atteint pour l'instant les limites de la méthode. Pour le cas test de la fleur, ce problème a été observé *uniquement* pour le plus grand ratio de pas d'espace $a = 7.6$ et a nécessité d'augmenter la résolution du maillage pour voir apparaître la convergence à l'ordre 2.

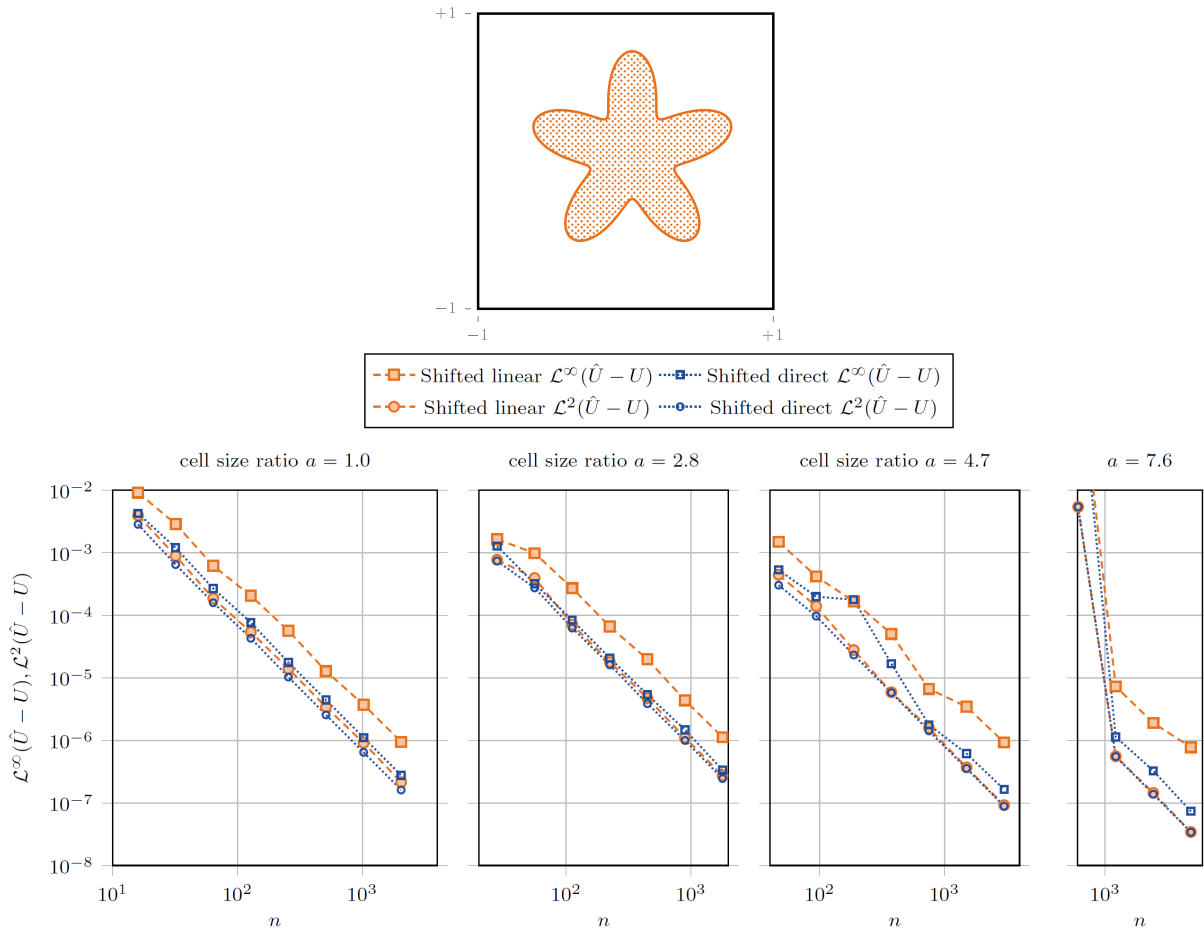


FIGURE 3.40 – Motif en forme de fleur et courbes de convergence pour une condition de Dirichlet et différents ratios a de pas d'espace.

Enfin, les tableaux 4 et 5 montrent une comparaison des temps de calcul obtenus par différents solveurs et sur différentes méthodes. Ils confirment que le préconditionneur multigrilles géométrique SMG de la librairie *hypre* est plus performant que le préconditionneur algébrique BoomerAMG. Il faut noter que le préconditionneur SMG est utilisable uniquement pour une taille de stencil égale à un, donc avec la méthode directe, et des conditions de Dirichlet à l'ordre 2 en espace ou bien des conditions de Neumann à l'ordre 1. La méthode linéaire nécessitant un stencil de taille égale à deux est moins avantageuse en terme de temps de calcul, tout du moins avec les solveurs à disposition. Dans le cadre des mailles rectangulaires, l'intérêt de ramener le stencil de discrétisation à celui obtenu avec des mailles carrées est ici démontré même si des difficultés de résolution sont rencon-

trées avec les solveurs itératifs pour le cas test de Neumann avec des mailles très aplaties. Enfin, on note que le solveur direct *mumps* est assez compétitif.

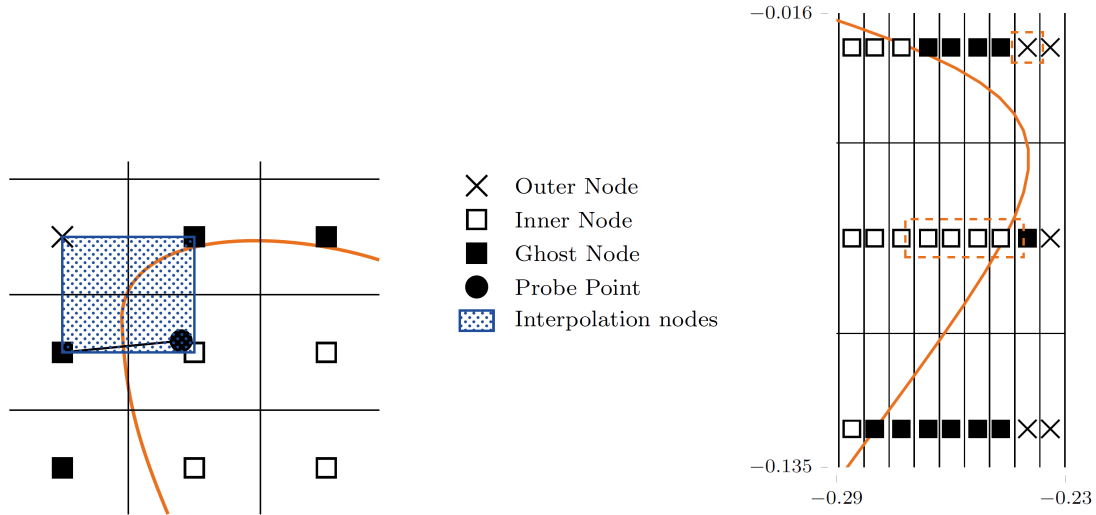


FIGURE 3.41 – Cas particuliers pour lesquels la courbure est importante relativement à la taille du maillage. À gauche, on observe que l’interpolation fait appel à un point du domaine solide qui n’est ni un point fantôme ni un point du domaine fluide. À droite, on retrouve cette configuration mais on observe aussi toute une rangée de cellules fluides entourées de cellules fantômes.

<i>a</i>	<i>Maillage</i>	<i>Méthode directe</i>			<i>Méthode linéaire</i>		
		<i>GMRES+SMG</i> <i>Iter.</i>	<i>MUMPS</i> <i>Temps/s</i>	<i>MUMPS</i> <i>Temps/s</i>	<i>GMRES+BoomerAMG</i> <i>Iter.</i>	<i>GMRES+BoomerAMG</i> <i>Temps/s</i>	<i>MUMPS</i> <i>Temps/s</i>
1	160 × 160	15	0.06	0.05	18	0.04	0.09
	320 × 320	19	0.13	0.14	19	0.12	0.31
	640 × 640	23	0.35	0.56	21	0.65	1.32
	1280 × 1280	24	1.35	2.71	19	4.01	9.93
7.6	608 × 80	18	0.08	0.07	23	0.07	0.12
	1216 × 160	17	0.16	0.22	25	0.34	0.53
	2432 × 320	21	0.54	0.88	28	1.7	3.5
	4864 × 640	29	6.25	4.2	31	24.6	19.7

TABLE 4 – Comparaison des performances des solveurs pour l’équation de Poisson avec une frontière immergée en forme de fleur et une condition à la limite de Dirichlet. On mesure le nombre d’itérations du GMRES et le temps CPU. La tolérance est fixée à 10^{-10} . Les calculs ont été exécutés sur 16 processeurs Intel® Xeon® CPU E5-4640 0 à 2.40 GHz.

a	Maillage	Méthode directe			Méthode linéaire		
		GMRES+SMG Iter.	GMRES+SMG Temps/s	MUMPS Temps/s	GMRES+BoomerAMG Iter.	GMRES+BoomerAMG Temps/s	MUMPS Temps/s
2.8	448 × 160	39	0.06	0.11	43	0.1	0.2
	896 × 320	46	0.30	0.38	61	0.9	0.75
	1792 × 640	41	1.42	1.54	66	4.38	5.10
	3584 × 1280	78	14	8.7	126	38	37
4.7	376 × 80	62	0.05	0.06	246	0.23	0.06
	752 × 160	138	0.31	0.12	> 500	n/a	0.31
	1504 × 320	> 500	n/a	0.59	> 500	n/a	1.90
	3008 × 640	> 500	n/a	3.28	> 500	n/a	8.8

TABLE 5 – Comparaison des performances des solveurs pour l'équation de Poisson avec une frontière immergée circulaire et une condition à la limite de Neumann. On mesure le nombre d'itérations du GMRES et le temps CPU. La tolérance est fixée à 10^{-10} . Les calculs ont été exécutés sur 16 processeurs Intel[®] Xeon[®] CPU E5-4640 0 à 2.40 GHz.

3.5.4 Extension aux équations de Navier-Stokes

L'extension aux équations de Navier-Stokes demande à être réalisée avec attention, non pas en raison du décalage des grilles associées aux composantes de la vitesse - on procède d'une manière analogue à l'approche précédemment décrite sur la grille de pression - mais plutôt du couplage vitesse/pression et de la non linéarité des équations de quantité de mouvement. En effet, la correction de la vitesse par le gradient de l'incrément de pression sur certains points fantômes de vitesse, engendre des erreurs importantes sur la vitesse, erreurs injectées dans la matrice *via* la linéarisation du terme non linéaire. Une troisième étape a donc été ajoutée à l'algorithme de Timmermans qui consiste à interpoler la vitesse corrigée sur les nœuds fantômes (interpolation tenant compte de la condition à la limite sur la frontière immergée). Sans cette troisième étape, l'ordre 2 en espace ne peut être atteint.

La méthode a été vérifiée sur l'écoulement de Poiseuille - les parois du canal étant inclinées de 30° par rapport à l'horizontale (cf. figure 3.42) - et sur l'écoulement de Couette entre deux cylindres. Des mailles rectangulaires et une interpolation d'ordre 2 ont été utilisées. Les ordres attendus ont été vérifiés, 2 sur la vitesse et entre 1 et 2 sur la pression. Enfin, les écoulements stationnaires autour du cylindre à $Re = 40$ et d'une ellipse à $Re = 20$ ont été réalisés avec succès (cf. section 3.2.3).

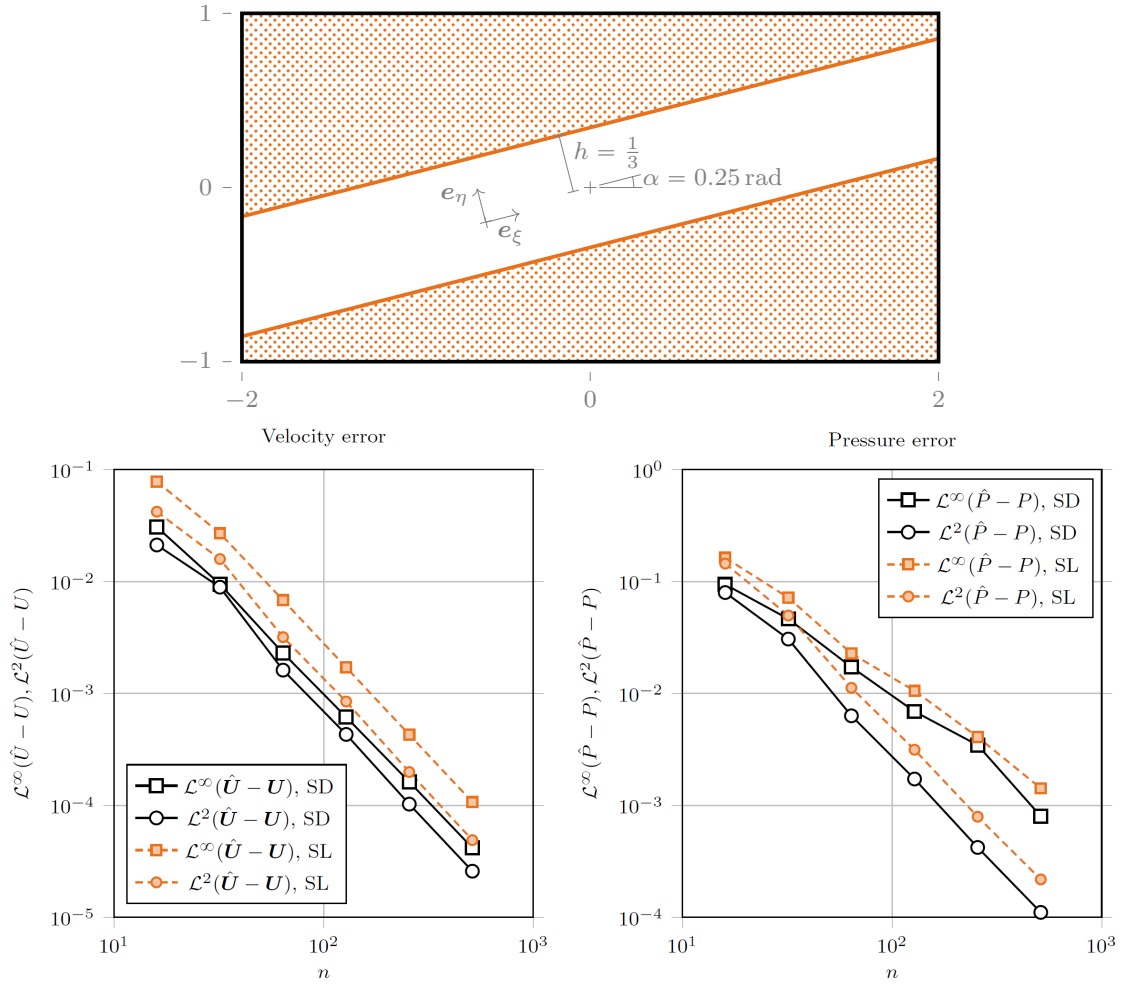


FIGURE 3.42 – Canal plan dans un domaine incliné : configuration et ordres de convergence en vitesse et pression.

Conclusion / Perspectives

Cette contribution aux méthodes des frontières immergées s'étend naturellement aux géométries tridimensionnelles pour lesquelles l'intérêt de réduire le temps de calcul est déterminant pour des simulations de grande ampleur.

Le traitement des courbures importantes est une perspective d'amélioration, tout comme la compatibilité de ces méthodes à des schémas d'ordre plus élevés au stencil plus large.

Un autre point qu'il faudra étudier est celui des écoulements turbulents pour lesquels les couches limites doivent être abordées numériquement avec attention.

3.6 Conditions aux limites de sortie

3.6.1 Contexte

Ces travaux portent sur un problème qui est resté longtemps en suspens dans la littérature, relatif à l'ordre de convergence spatio-temporel des conditions aux limites ouvertes ou de traction dans le cadre des méthodes de résolution du couplage vitesse/pression de type correction de pression^{31 32 33}.

Ils ont été réalisés dans le cadre de la thèse d'Alexandre Poux co-dirigée avec Mejdî Azaiez, et ont donné lieu à plusieurs articles. Le premier, publié dans *Journal of Computational Physics* [Poux et al., 2011] est proposé en annexe de ce document.

3.6.2 Amélioration des ordres de convergence

Écrivons ici de manière généralisée le problème de Stokes instationnaire discrétisé en temps à l'ordre 1 et 2 avec une condition ouverte sur Γ_N , puis les méthodes de correction de pression de Goda et de Timmermans :

$$\rho \frac{\alpha \mathbf{u}^{n+1} + \beta \mathbf{u}^n + \gamma \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} - \mu \Delta \mathbf{u}^{n+1} + \nabla p^{n+1} = \mathbf{f}^{n+1} \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.13)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.14)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (3.15)$$

$$(\mu \nabla \mathbf{u}^{n+1} - p^{n+1} \text{Id}) \mathbf{n} = \mathbf{t}^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_N \quad (3.16)$$

Les valeurs des paramètres α, β, γ dépendent du schéma temporel utilisé :

- $\alpha = 1, \beta = -1, \gamma = 0$ pour le schéma d'Euler d'ordre 1 ;
- $\alpha = \frac{3}{2}, \beta = -2, \gamma = \frac{1}{2}$ pour le schéma d'ordre 2 *Backward Difference Formula*.

Les équations (3.13)-(3.16) sont divisées en deux sous-problèmes. Le premier est une étape de prédiction-diffusion qui calcule une prédiction du vecteur vitesse à divergence non nulle :

31. Goda K., A multistep technique with implicit difference schemes for calculating two- or three-dimensional cavity flows, *Journal of Computational Physics*, 30, 76–95, 1979

32. Timmermans et al., An approximate projection scheme for incompressible flow using spectral elements, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 22, 673–688, 1996

33. Guermond et al., An overview of projection methods for incompressible flows, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 195, 6011–6045, 2006

trouver $\mathbf{u}^{n+1/2}$ telle que :

$$\rho \frac{\alpha \mathbf{u}^{n+1/2} + \beta \mathbf{u}^n + \gamma \mathbf{u}^{n-1}}{\Delta t} - \mu \Delta \mathbf{u}^{n+1/2} + \nabla p^n = \mathbf{f}^{n+1} \quad \text{dans } \Omega \quad (3.17)$$

$$\mathbf{u}^{n+1/2} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (3.18)$$

$$(\mu \nabla \mathbf{u}^{n+1/2} - \tilde{p}^{n+1} \text{Id}) \mathbf{n} = \mathbf{t}^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_N \quad (3.19)$$

Dans la dernière équation (3.19), l'expression de \tilde{p}^{n+1} dépend du schéma en temps considéré. Pour assurer l'ordre de convergence en temps attendu, nous proposons deux cas :

- $\alpha = 1, \beta = -1, \gamma = 0$ alors $\tilde{p}^{n+1} = p^n$;
- $\alpha = \frac{3}{2}, \beta = -2, \gamma = \frac{1}{2}$ alors $\tilde{p}^{n+1} = 2p^n - p^{n-1}$.

La seconde étape est une étape de correction portant sur l'incrément de pression :
trouver $(\mathbf{u}^{n+1}, p^{n+1})$ telles que :

$$\frac{\rho \alpha}{\Delta t} (\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{n+1/2}) + \nabla \varphi^{n+1} = \mathbf{0} \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.20)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.21)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (3.22)$$

$$\text{B.C.}^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_N \quad (3.23)$$

où BC^{n+1} est une condition à la limite adéquate, et la pression est actualisée par :

$$p^{n+1} = p^n + \varphi^{n+1} - \chi \mu \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} \quad \text{dans } \Omega \quad (3.24)$$

Le paramètre χ est utilisé pour passer de la méthode incrémentale standard (Goda) à la méthode rotationnelle (Timmermans) :

- $\chi = 0$ pour la méthode standard incrémentale ;
- $\chi < 2\nu/d$ pour des raisons de stabilité (où d est la dimension de l'espace).

La seconde étape se réécrit comme un problème de Poisson sur φ^{n+1} :

$$\frac{\Delta t}{\alpha \rho} \nabla \cdot \nabla \varphi^{n+1} = \nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial n} \varphi^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_D \quad (3.26)$$

$$\text{B.C.}^{n+1} \quad \text{sur } \Gamma_N \quad (3.27)$$

complétée par :

$$p^{n+1} = p^n + \varphi^{n+1} - \chi\mu\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1/2} \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.28)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{\rho\alpha} \nabla \varphi^{n+1} \quad \text{dans } \Omega. \quad (3.29)$$

Par soucis de simplicité, pour présenter la méthode, nous choisissons Γ_N comme étant la limite droite. L'approche *standard* utilisée dans la littérature consiste à écrire :

$$\varphi^{n+1} = 0 \quad \text{sur } \Gamma_N. \quad (3.30)$$

Avec la méthode incrémentale standard (Goda), on observe l'invariance de la pression sur la limite, ce qui conduit à un blocage de la convergence en espace et en temps. En norme L_2 , nous avons une convergence spatiale de 1 pour la vitesse et 1/2 pour la pression ; une convergence temporelle de 1/2 pour la pression et un début de convergence entre 1 et 3/2 pour la vitesse qui sature très vite. Les résultats théoriques (Guermont, 2006) donnent une convergence temporelle de 1/2 pour la vitesse et la pression.

Avec la méthode rotationnelle (Timmermans), les ordres de convergence (en norme L_2) sont améliorés du fait de la correction de la pression par la divergence de la vitesse prédite. L'ordre de convergence spatiale est de 2 pour la vitesse et la pression ; l'ordre de convergence temporelle est de 3/2 pour la vitesse et entre 1 et 3/2 pour la pression. Ces derniers restent néanmoins inférieurs à ceux observés avec une condition de Dirichlet (2 pour la vitesse et entre 3/2 et 2 pour la pression).

Le point de départ de l'approche proposée - pour remplacer $\varphi^{n+1} = 0$ sur Γ_N - est la première composante de l'équation (3.20) que nous dérivons selon x_1 :

$$-\frac{\Delta t}{\alpha\rho} \partial_{x_1^2} \varphi^{n+1} = \partial_{x_1} u_{x_1}^{n+1} - \partial_{x_1} u_{x_1}^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.31)$$

Nous projetons les équations (3.16) et (3.19) portant sur la contrainte à la limite sur la direction x_1 :

$$\mu \partial_{x_1} u_{x_1}^{n+1} - p^{n+1} = t_{x_1}^{n+1} \quad (3.32)$$

$$\mu \partial_{x_1} u_{x_1}^{n+\frac{1}{2}} - \tilde{p}^{n+1} = t_{x_1}^{n+1} \quad (3.33)$$

et, en combinant ces trois équations, nous vérifions que (3.31) est équivalent à :

$$-\frac{\Delta t}{\alpha\rho} \partial_{x_1^2} \varphi^{n+1} = \frac{1}{\mu} (p^{n+1} - \tilde{p}^{n+1}) \quad (3.34)$$

$p^{n+1} - \tilde{p}^{n+1}$ peut s'écrire en fonction φ^{n+1} et de la divergence du vecteur vitesse prédit. Pour l'ordre 1 en temps, on obtient facilement la condition limite suivante :

$$\left(\frac{\Delta t}{\alpha\rho}\partial_{x_1^2} + \frac{1}{\mu}\right)\varphi^{n+1} = \chi\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.35)$$

et pour l'ordre 2 en temps :

$$\left(\frac{\Delta t}{\alpha\rho}\partial_{x_1^2} + \frac{1}{\mu}\right)\varphi^{n+1} = \frac{\varphi^n}{\mu} + \chi\nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{u}^{n-\frac{1}{2}}) \quad (3.36)$$

En combinant ces deux dernières équations à 3.25, on obtient une version plus simple à implémenter faisant apparaître uniquement la dérivée tangentielle à la limite. Pour l'ordre 1 en temps :

$$\left(\frac{\Delta t}{\alpha\rho}\partial_{x_2^2} - \frac{1}{\mu}\right)\varphi^{n+1} = (1 - \chi)\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (3.37)$$

et pour l'ordre 2 en temps :

$$\left(\frac{\Delta t}{\alpha\rho}\partial_{x_2^2} - \frac{1}{\mu}\right)\varphi^{n+1} = -\frac{\varphi^n}{\mu} + (1 - \chi)\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} + \chi\nabla \cdot \mathbf{u}^{n-\frac{1}{2}} \quad (3.38)$$

Remarques : cette approche peut être vue comme une condition à la limite de Dirichlet non homogène sur φ^{n+1} , obtenue par résolution d'une équation portant sur la dérivée seconde tangentielle à la limite. On obtient une relation analogue pour la condition de traction $\sigma(\mathbf{u}, p) : \mathbf{n} = \mathbf{t}$ ou σ est le tenseur des contraintes.

Nous avons vérifié à la fois les conditions limites ouvertes et de traction, homogènes et non homogènes. Par soucis de concision nous ne présentons que les résultats sur les conditions de traction homogènes, sachant que des conclusions identiques ont été obtenues pour les autres conditions. Nous construisons la vérification de la condition de traction appliquée à la limite droite sur la solution exacte suivante définie sur $[-1; 1]^2$:

$$u = \sin(x)\sin(y)\cos(2\pi\omega t) \quad (3.39)$$

$$v = \cos(x)\cos(y)\cos(2\pi\omega t) \quad (3.40)$$

$$p = -2\cos(1)\sin(2(x-1) - y)\cos(2\pi\omega t) \quad (3.41)$$

3.6.3 Convergence en espace ($\omega = 0$)

La figure 3.43 montre une étude de convergence réalisée avec les méthodes incrémentale standard (Goda) et rotationnelle (Timmermans). Dans les deux cas les ordres de convergence mesurés sur la pression et la vitesse sont de 2.

Si ces ordres étaient déjà atteints avec la méthode standard de traitement de la condition limite de traction ($\varphi^{n+1} = 0$ sur Γ_N) et la formulation rotationnelle, il faut noter l'amélioration de l'ordre mesuré pour la formulation de Goda (nous avons 1 pour la vitesse et $1/2$ pour la pression).

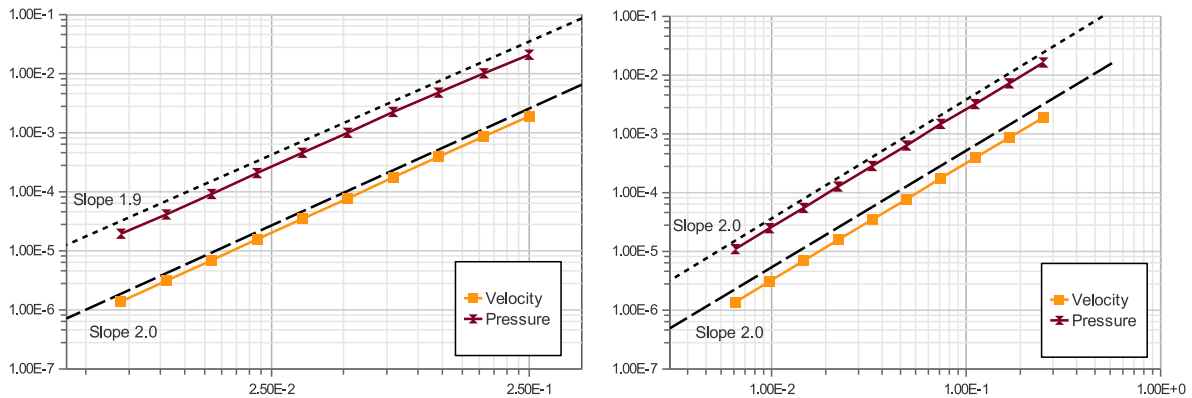


FIGURE 3.43 – Convergence spatiale des méthodes incrémentale standard (gauche) et rotationnelle (droite) avec le traitement proposé de la condition à la limite de traction.

3.6.4 Convergence en temps

Les figures 3.44 et 3.45 montrent les résultats de convergence temporelle pour les méthodes incrémentale standard et rotationnelle :

- pour la méthode incrémentale standard, en comparaison avec le traitement standard de la condition limite ($\varphi^{n+1} = 0$ sur Γ_N), les ordres de convergence temporelle passent à 2 sur la vitesse et à $3/2$ sur la pression ;
- pour la méthode rotationnelle, les ordres sont légèrement améliorés par rapport à ceux observés avec le traitement standard de la condition à la limite, puisque l'on atteint l'ordre 2 sur la vitesse, et entre $3/2$ et 2 pour la pression.

Nous avons donc obtenu, dans le cadre des conditions aux limites ouvertes, des ordres de convergence spatio-temporels identiques à ceux obtenus avec des conditions de Dirichlet. Si la méthode rotationnelle était déjà opérante, l'amélioration proposée est d'autant plus intéressante avec la méthode incrémentale standard que cette dernière est plus générale en terme d'applications, puisqu'elle est adaptée aux écoulements à viscosité variable (par exemple multiphasiques ou à rhéologie complexe).

La méthode proposée a ensuite été validée sur des écoulements réels comme celui de l'écoulement dans un canal à trois branches (bifurcation du canal en sortie) ou celui instationnaire autour d'un carré (cf. section 3.2.3).

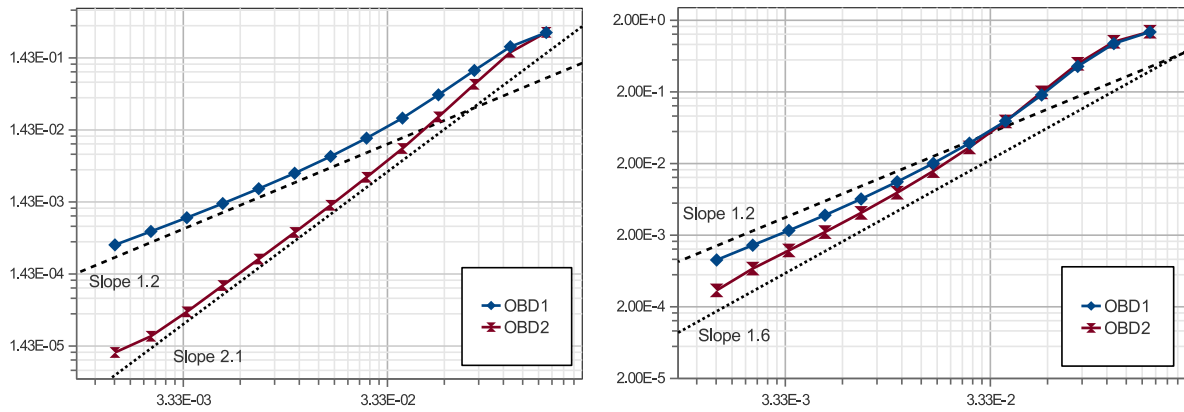


FIGURE 3.44 – Convergence temporelle avec la méthode incrémentale standard en vitesse (gauche) et pression (droite). OBD1 et OBD2 correspondent à la méthode proposée respectivement à l'ordre 1 et 2 en temps.

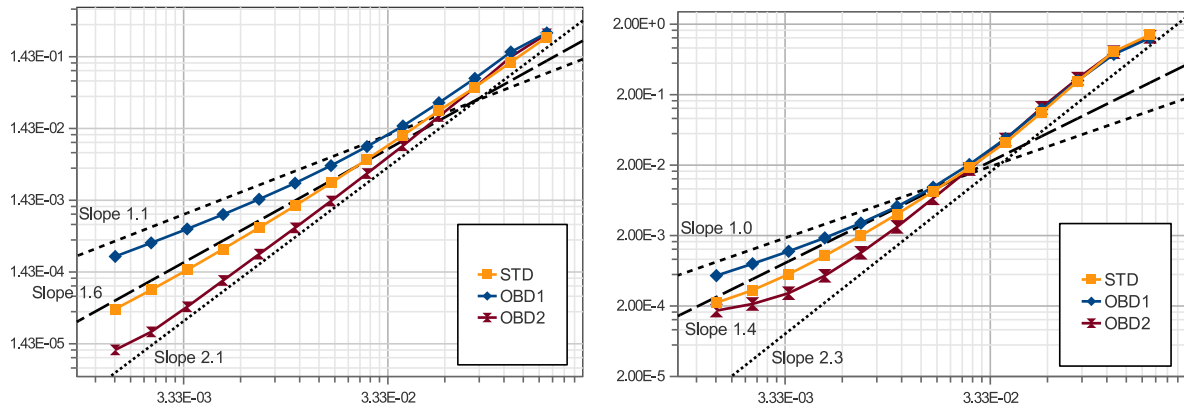


FIGURE 3.45 – Convergence temporelle avec la méthode rotationnelle en vitesse (gauche) et pression (droite). OBD1 et OBD2 correspondent à la méthode proposée respectivement à l'ordre 1 et 2 en temps ; STD correspond à la méthode standard.

3.6.5 Extension des travaux à la méthode de correction de vitesse

L'extension de ces travaux à une autre méthode de time-splitting - la méthode de correction de vitesse - a aussi été réalisée [Poux et al, 2012]. C'est une méthode moins utilisée qui consiste à résoudre dans un premier temps l'étape sur l'incrément de pression,

et dans un second temps une étape de correction-diffusion sur la vitesse. Il faut noter que la vitesse intermédiaire est à divergence nulle mais pas la vitesse finale. Cet article est la première étude numérique détaillée sur l'utilisation de la condition limite ouverte dans le contexte d'une méthode de correction de vitesse.

Conclusion / Perspectives

Cette contribution aux méthodes de *time-splitting* dans le cadre des conditions aux limites ouvertes et de traction a permis d'obtenir des ordres de convergence spatio-temporels identiques à ceux observés pour la condition de Dirichlet. Un travail reste à entreprendre sur l'application de cette condition à la limite à des écoulements multiphasiques, notamment sur le choix optimum du second membre de la condition à la limite de traction.

3.7 Interfaces fluide/fluide

3.7.1 Contexte

La modélisation numérique des phénomènes aux interfaces est un domaine de recherche encore très actif tant la richesse des problèmes physiques et numériques sous-jacente est grande : transport des interfaces, calcul des forces de tension de surface, ligne triple, etc. Leurs résolutions passent tout d’abord par le choix d’un mode de représentation des interfaces, parmi lesquels on trouve les approches *Volume-of-Fluid* (VOF) et *Level-Set* (LS)³⁴.

Avec l’approche LS, l’interface est représentée par le zéro d’une fonction scalaire qui peut être transportée précisément par des schémas d’ordre élevé de type WENO, le calcul de la courbure s’obtenant par dérivations de la fonction level-set. Néanmoins, cette approche présente l’inconvénient de ne pas satisfaire précisément la conservation de la masse ainsi que des difficultés liées à la redistanciation de la fonction level-set nécessaire sur la longueur d’une simulation.

D’un autre côté, l’approche VOF - de type reconstruction linéaire de l’interface *Piecewise Linear Interface Calculation* (PLIC)³⁵ - assure une meilleure conservation de la masse mais le calcul de la courbure est moins précis. La figure 3.46 illustre la non convergence en espace du calcul de la courbure d’un disque advecté dans un champ de vitesse uniforme. Celle-ci est due à la dérivée seconde de la fraction volumique (ou de ses extensions de type fonction hauteur³⁶) - qui n’est calculée qu’au second ordre en espace. Une initialisation du disque plus précise, voire une initialisation exacte, peut améliorer la convergence comme on le trouve parfois dans la littérature, mais c’est un artifice qui masque un réel problème de fond puisque dans une simulation l’interface est reconstruite à l’ordre 2.

Plus récemment, la méthode *Moment-of-Fluid* (MOF) a été proposée³⁷. Elle peut être vue comme le prolongement des méthodes VOF-PLIC. Au lieu de reconstruire l’interface plane dans la maille en se servant du calcul discret de la normale, c’est le centroïde du volume de fluide contenu dans la maille qui est utilisé, ce qui réduit le *stencil* de la méthode à une maille.

Pour le développement de Notus, j’ai encadré deux post-doctorants recrutés dans le cadre du Cluster CPU de l’IdEX de l’Université de Bordeaux (M. Coquerelle et A. Lemoine) sur ces deux problèmes de transport de l’interface et de calcul des forces de tension de surface. Ces travaux ont fait l’objet de deux publications dans *Journal of Computatio-*

34. F. Gibou, R. Fedkiw, S. Osher, A review of level-set methods and some recent applications, *Journal of Computational Physics*, Volume 353, Pages 82-109, 2018.

35. Youngs DL. Time dependent multi-material flow with large fluid distortion. In K. W. Morton and M. J. Baines, editors, *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, pages 273–285. Academic Press, 1982

36. S.J. Cummins, M.M. Francois, D.B. Kothe, Estimating curvature from volume fractions, *Comput. Struct.* 83 (6) (2005) 425–434.

37. Vadim Dyadechko, Mikhail Shashkov, Reconstruction of multi-material interfaces from moment data, *Journal of Computational Physics*, Volume 227, Issue 11, Pages 5361-5384, 2008.

nal Physics, [Coquerelle & Glockner, 2015] et [Lemoine et al., 2015], tous deux présents dans l'annexe de ce document.

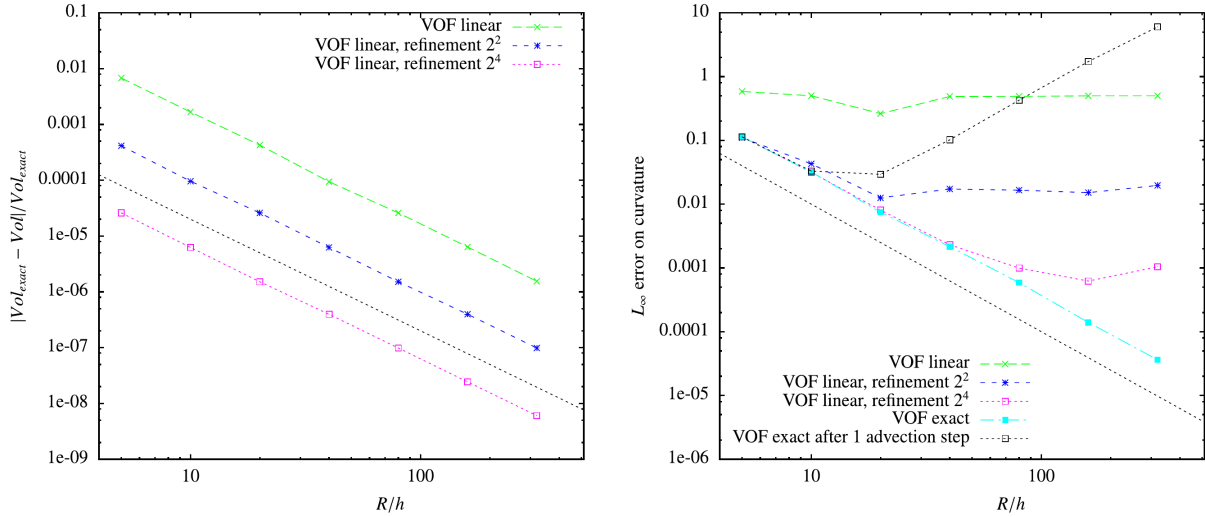


FIGURE 3.46 – Reconstruction d'un disque pour un maillage donné, et des maillages 2 et 4 fois raffinés dans chaque direction de l'espace. Convergence de la norme L_1 de l'erreur sur le volume du disque (gauche). Non convergence de la norme L_∞ de l'erreur sur la courbure pour une initialisation approchée (raffinée ou non) ou exacte et après transport (droite). La courbure est calculée à partir d'une méthode d'ordre deux basée sur la fonction hauteur.

3.7.2 Calcul de la courbure pour l'estimation des forces de tension de surface, approche level-set

La méthode du Closest-Point

Les équations de Navier-Stokes, en présence d'une interface et suivant le modèle 1-fluide, s'écrivent :

$$\begin{aligned} \rho(\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}) &= -\nabla p + 2\nabla \cdot (\mu \mathbf{D}) + \sigma \kappa \delta_\Gamma \mathbf{n} \\ \partial_t \rho + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \rho &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \end{aligned} \quad (3.42)$$

Le terme $\sigma \kappa \delta_\Gamma \mathbf{n}$ est singulièrement localisé sur l'interface Γ séparant les deux fluides par la fonction de Dirac δ_Γ . Il est orienté dans la direction normale à l'interface \mathbf{n} , κ étant la courbure et σ le coefficient de tension de surface.

Soit φ une fonction level-set advectée dans un écoulement. La normale et la courbure

peuvent être calculées dans tout le domaine avec :

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}, \quad (3.43)$$

et

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|} \right) \quad (3.44)$$

Le modèle *Continuum Surface Force* (CSF) de Brackbill³⁸ est ensuite utilisé dans lequel le terme des forces de tension de surface est diffusé sur quelques mailles autour de l'interface pour des raisons de régularité. En définissant la fraction volumique de fluide dans la maille c , calculée à partir de la fonction Heavyside régularisée, il s'écrit alors $\sigma\kappa\nabla c$.

La méthode du *closest-point*³⁹ a été utilisée pour calculer la courbure en chaque point du maillage où agit la force de tension de surface, points qui, rappelons-le, ne sont pas positionnés sur l'interface. La méthode considère que la courbure est celle calculée sur le point le plus proche situé sur l'interface, et non pas la courbure calculée localement au point de maillage comme c'est parfois le cas dans la littérature. Vue différemment, c'est une extension de la courbure calculée sur l'interface dans la direction normale à celle-ci (cf. figure 3.47).

La recherche du point le plus proche se fait classiquement par un algorithme de descente (Newton) qui permet d'approcher la valeur nulle de la fonction level-set et les coordonnées du point associé sur lequel est ensuite interpolé la courbure.

Amélioration de l'orthogonalité à l'interface

La méthode de descente a été améliorée afin de vérifier l'orthogonalité par rapport à l'interface du vecteur reliant le point le plus proche au point du maillage, orthogonalité non vérifiée du fait que la fonction level-set n'est plus, après advection, une fonction distance (les algorithmes de redistanciation étant coûteux en temps de calcul ils ne sont pas utilisés à chaque itération en temps). Il s'agit ici, comme représenté sur la figure 3.48, de corriger la direction de descente en suivant aussi la direction tangente à l'interface pour se ramener, itération après itération, à un point vérifiant l'orthogonalité par rapport à l'interface.

38. J.U. Brackbill, D.B. Kothe, C. Zemach, A continuum method for modeling surface tension, J. Comput. Phys. 100 (1992) 335354.

39. M. Herrmann, A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids, Journal of Computational Physics 227 (4) (2008) 26742706.

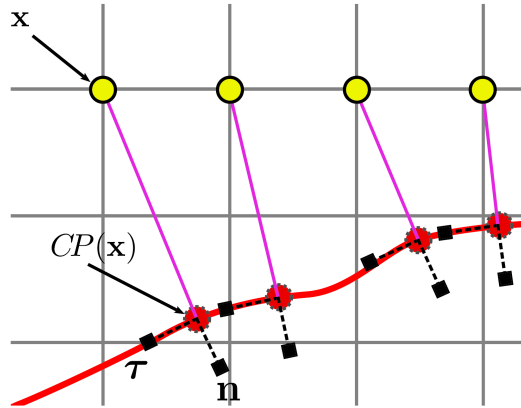


FIGURE 3.47 – Méthode du closest-point : une représentation géométrique. Les points en jaune sont des points de la grille, leurs correspondants closest-point sur la surface sont en rouge. Les normales et tangentes sont les segments en pointillés. La ligne mauve montre la colinéarité entre la normale à l'interface et le segment reliant le point de la grille et le closest-point.

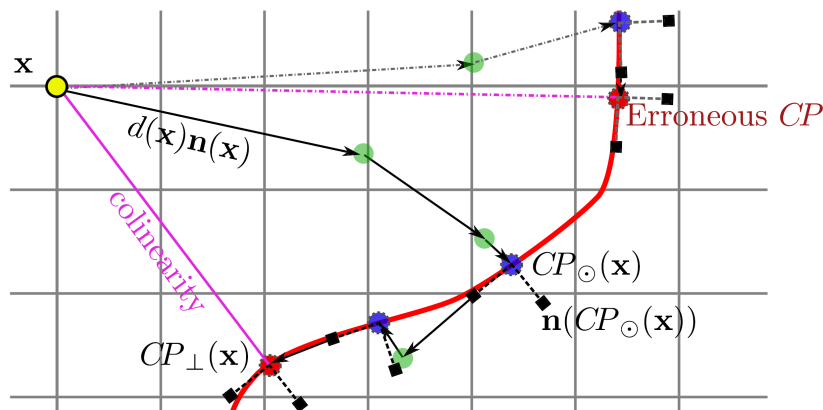


FIGURE 3.48 – Vue schématique de l'algorithme du Closest-Point (CP). Les erreurs sur les gradients du vecteur ont été exagérées. Les points en vert sont les points intermédiaires, les points en bleu sont les CP intermédiaires ne vérifiant pas l'orthogonalité, et les points en rouge représentent les CP finaux. La ligne grise indique un chemin erroné de CP en raison d'une mauvaise description de $\nabla\varphi$ vers la surface.

Résultats

L'ordre de convergence spatial du calcul de la courbure d'une ellipse a pu être ainsi établi à 4, contre 2 pour la méthode originale d'Herrmann. Nous avons ensuite vérifié que la méthode proposée convergait aussi à l'ordre 4 pour la réduction des courants parasites observés dans le cas test du disque vérifiant l'équilibre entre des forces de tension de surface et de pression, et lorsque ce disque est advecté dans un champ uniforme et pour des

nombres de Laplace élevés (traduisant la prépondérance des forces de tension de surface sur les forces visqueuses). Ce dernier cas était le plus difficile à réaliser puisqu’il combine les effets des schémas de transport au calcul des forces de tension de surface. Rappelons les difficultés de convergence des méthodes de type VOF-PLIC sur ce cas test ⁴⁰. La figure 3.49 montre une étude de convergence sur la moyenne quadratique de la vitesse, le nombre capillaire $Ca = \frac{\mu U_{max}}{\sigma}$. Les erreurs sont d’abord dominées par le fait que l’interface n’est pas à l’équilibre. On observe une réduction des erreurs puis une faible oscillation de celles-ci autour de la position d’équilibre en raison des erreurs d’advection perturbant l’interface et le calcul des forces de tension de surface. Les intégrales temporelles (sur ce pseudo-état d’équilibre) des erreurs sur le Ca et la courbure sont présentées sur la dernière partie de la figure 3.49 et montrent un ordre de convergence de 4.

3.7.3 Méthode Moment-of-Fluid sur des maillages cartésiens

Présentation de la méthode

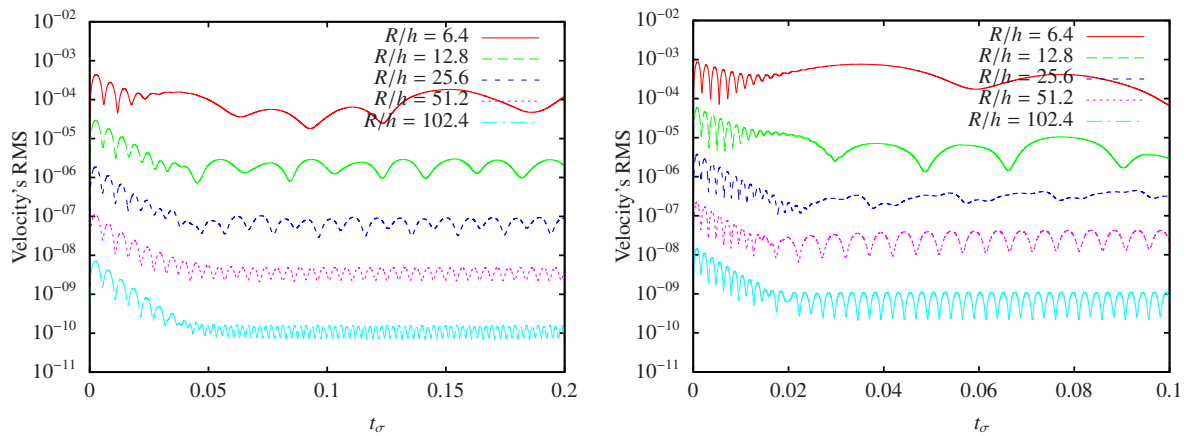
Avec la méthode VOF-PLIC, connaissant la fraction volumique d’un fluide dans une maille et la normale à l’interface, il est possible, par un algorithme de remplissage, de positionner une interface plane dans la maille conservant le volume de fluide donné et approchant le contour quelconque de l’interface. Le calcul de la normale induit une dépendance spatiale (un schéma à 9 points portant sur la fraction volumique lissée peut être utilisé en 2D).

La méthode Moment-of-Fluid (MOF) est une méthode de reconstruction linéaire d’une interface dans une maille, basée sur les informations de fraction volumique du fluide et de la position de son centroïde. Connaissant la fraction volumique du fluide dans une maille et le centroïde de référence - correspondant à une interface *a priori* de forme quelconque dans la maille (cf. figure 3.50 gauche) -, la méthode consiste à reconstruire une interface linéaire satisfaisant la contrainte de conservation du volume et *minimisant* la position du nouveau centroïde $x_c(w^*)$ par rapport à celle du centroïde de référence $x_c(w^l)$ (cf. figure 3.50 droite). Un algorithme de minimisation, faisant varier la normale à volume fixé, est utilisé à cet effet. Un avantage de la méthode MOF est donc que la normale n’est plus obtenue par un schéma de discrétisation, ce qui réduit le *stencil* à une maille et en fait une méthode plus précise.

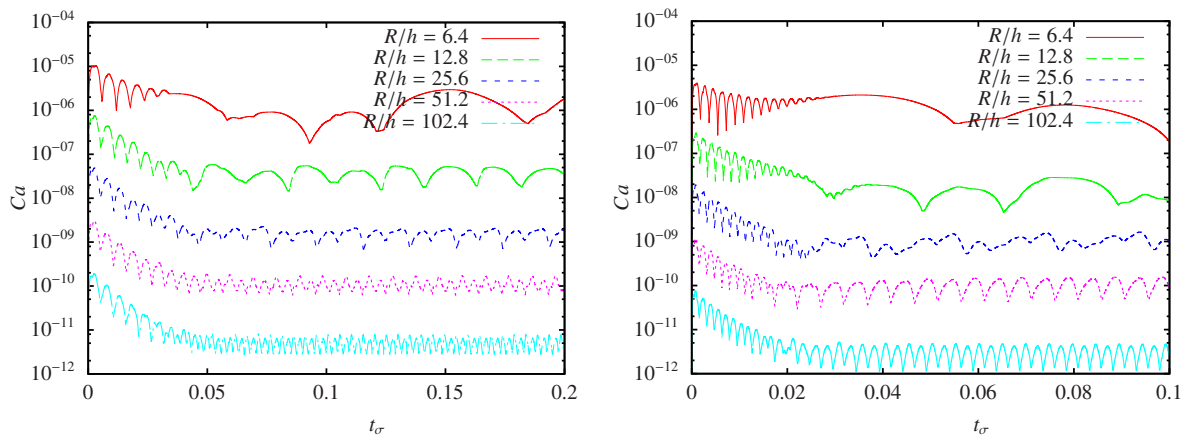
La méthode originale a été développée pour des maillages non structurés. L’objectif des travaux engagés en 2015 a été de regarder de quelle manière elle pouvait être simplifiée et optimisée pour des maillages rectangulaires cartésiens, cadre du nouveau code Notus.

Il faut noter que nous ne nous intéressons pas dans cette section au transport de l’interface mais uniquement à sa reconstruction. Le transport peut se faire de différentes manières, par *splitting* directionnel pour la méthode VOF-PLIC ou bien de manière rétrograde et en un seul bloc pour la méthode MOF.

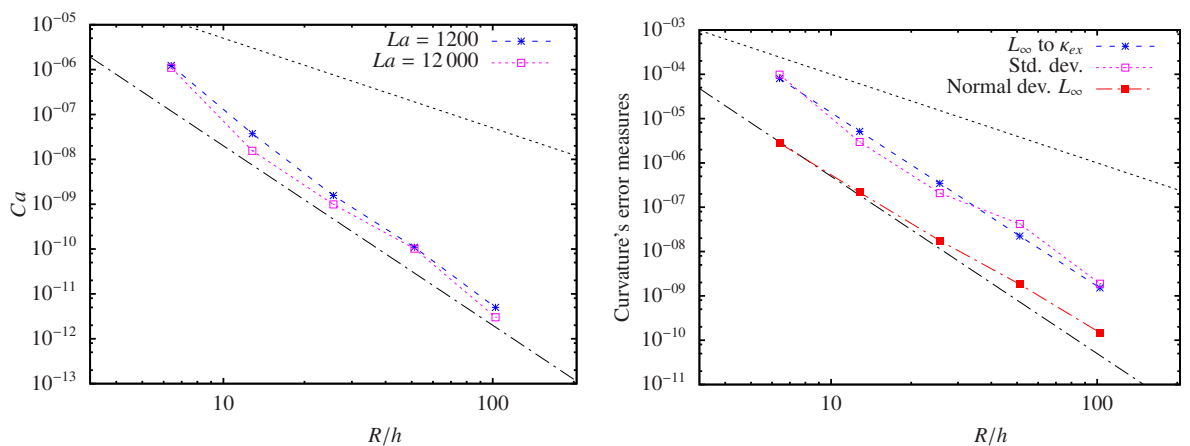
40. S. Popinet, An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows, *J. Comput. Phys.* 228 (16) (2009) 5838–5866.



(a) Moyenne quadratique de la vitesse pour différents maillages (R/h), $La = 1200$ (gauche) et $La = 12000$ (droite)



(b) Nombre capillaire pour différents maillages (R/h), $La = 1200$ (gauche) et $La = 12000$ (droite)



(c) Ca moyen pour $La = 1200$ et $La = 12000$ (gauche) ; erreur sur la courbure moyenne en fonction du maillage (droite)

FIGURE 3.49 – Advection du disque : étude de convergence pour la moyenne quadratique de la vitesse, le nombre capillaire et la courbure.

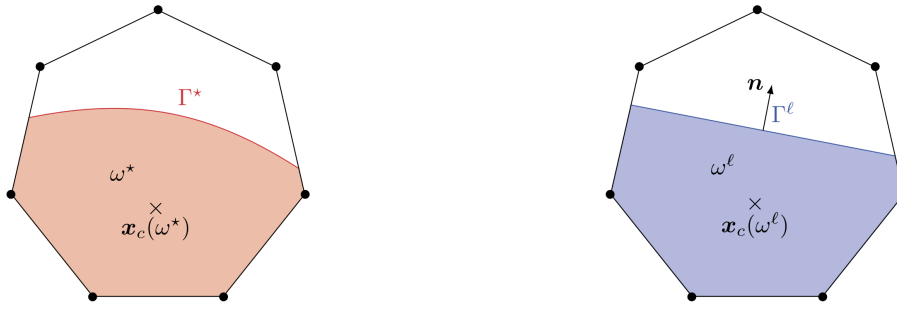


FIGURE 3.50 – Interface de référence (gauche) et reconstruite (droite).

Amélioration de la méthode de reconstruction

Pour un volume V donné dans une maille rectangulaire, les lieux des centroïdes possibles d'un volume reconstruit sont représentés figure 3.51. En fonction du polygone reconstruit - triangle ou rectangle - on peut montrer qu'il s'agit soit d'une hyperbole, soit d'une parabole dont il est possible d'établir l'équation représentative en fonction du volume V du fluide dans la maille et de la normale à l'interface. Étant donné un centroïde de référence, on peut alors rechercher le point le plus proche du centroïde appartenant à la courbe constituée d'hyperboles et de paraboles, et ainsi remplacer l'étape de minimisation de la méthode originale. Cette étape passe par la résolution d'équations quartiques et cubiques et l'élimination des racines non satisfaisantes. On obtient ainsi une solution exacte au problème de minimisation. Il est ensuite possible de calculer la normale et donc à la position précise de l'interface plane dans la maille.

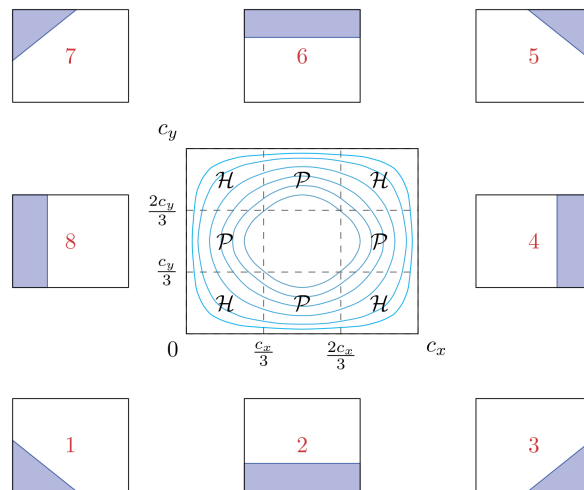


FIGURE 3.51 – Représentation des différentes configurations des lieux des centroïdes (courbes au centre) dans une cellule rectangulaire de dimensions (c_x, c_y) pour différents volumes V . En fonction du polygone reconstruit, le lieu est soit une hyperbole H soit une parabole P .

Résultats

Les deux méthodes - par minimisation ou calcul de la solution exacte - ont été comparées sur plusieurs cas de reconstruction statique d'une interface dont celui d'un grand nombre de disques dans un domaine carré (cf. figure 3.52). Le tableau 6 montre l'amélioration des temps de calcul avec la méthode analytique, d'un facteur variant de 2.59 à 1.44 selon la précision demandée à l'algorithme de minimisation.

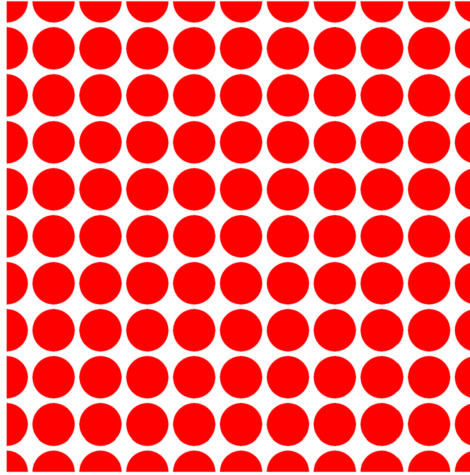


FIGURE 3.52 – Reconstruction MOF sur un maillage de 2048^2 .

	Min. 10^{-15}	Min. 10^{-12}	Min. 10^{-9}	Min. 10^{-6}
Ana.	2.59	2.23	1.87	1.44

TABLE 6 – Ratio du temps de calcul minimisation/analytique pour le cas test statique sur un maillage de 2048^2 cellules.

La méthode MOF est particulièrement adaptée aux problèmes multimatériaux car elle permet la reconstruction d'interfaces multiples dans une maille (nombre de phases supérieures à 2) par reconstructions successives des interfaces dans le volume restant dans la maille. Dans ce cadre précis, l'approche analytique n'est possible que pour la première reconstruction (puisque qu'après une reconstruction le volume restant n'est plus rectangle), ce qui permet aussi de réduire les temps de calcul et de gagner en précision.

Conclusion / Perspectives

Les phénomènes aux interfaces fluide/fluide sont encore difficiles à prendre en compte numériquement dans un contexte de code de production tant la physique des phénomènes

est riche : transport de l'interface, tension de surface, coalescence, fractionnement, phénomènes à des échelles très différentes (bulles, gouttelettes), etc. Il n'existe pas de méthode universelle et c'est la raison pour laquelle j'ai initié il y a 3 ans des recherches sur différentes approches.

Aujourd'hui, l'équipe en place est à même de poursuivre ces travaux. L'amélioration de la méthode MOF dans le cadre des grilles cartésiennes passe maintenant par le traitement d'une reconstruction exacte en dimension 3 de l'espace, travaux en cours menés par A. Lemoine et T. Milcent (I2M). Une autre perspective intéressante serait le couplage de la méthode level-set avec la méthode MOF, méthode hybride qui tirerait avantage de leurs avantages respectifs, comme certains travaux tentent à le démontrer⁴¹. Je trouve aussi pertinente l'idée d'aborder les forces de tensions de surface différemment, comme elles peuvent l'être dans le cadre des méthodes *front-tracking* dans lesquelles l'intégrale de cette force le long d'une portion de la frontière est proportionnelle à la différence des tangentes à l'interface aux extrémités de celle-ci (formule de Frenet)⁴². Le calcul de la courbure n'est alors plus nécessaire ce qui est intéressant dans le cadre des méthodes MOF (où la normale est précise à l'ordre 2 en espace). Enfin, pour être complet, il faudrait aussi s'intéresser à la discrétisation fine du saut du tenseur des contraintes à l'interface à la place de l'utilisation des modèles *1-fluide* et CSF.

41. Matthew Jemison, Eva Loch, Mark Sussman, Mikhail Shashkov, Marco Arienti, Mitsuhiro Ohta, Yaohong Wang, A Coupled Level Set-Moment of Fluid Method for Incompressible Two-Phase Flows, *Journal of Scientific Computing*, Volume 54, Issue 2–3, pp 454–491, 2013.

42. G. Tryggvason, R. Scardovelli and S. Zaleski, Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multi-phase Flows, *Cambridge University Press*, 2011.

3.8 Conclusion générale et perspectives

Mon activité de recherche s'inscrit dans le cadre de la recherche et de la mise en œuvre d'outils et de méthodes numériques pour la simulation d'écoulements incompressibles. Elle s'est construite autour du calcul massivement parallèle dès 2005, grâce à des initiatives de recherche et des propositions de solutions pertinentes à certains problèmes, au sein d'une équipe, et ceci dans une démarche active de réalisation de simulations numériques d'envergure. Cette activité a eu des répercussions positives sur la qualité des travaux scientifiques de collègues de l'I2M et d'autres laboratoires. Je souhaite donc à l'avenir poursuivre dans cette démarche et continuer à mener de front, et dans une cohérence d'équipe autour de Notus, des projets de simulations, de développements et de recherches en méthodes numériques.

Depuis 3 ans, mon activité s'oriente vers le traitement des interfaces, fluide/fluide et fluide/solide, avec des travaux sur la reconstruction d'interface, le calcul des forces de tension de surface et les méthodes des frontières immergées. Mes perspectives à court terme, en collaboration avec A. Lemoine et M. Coquerelle, sont de réaliser les extensions suivantes :

- *sur le calcul des tensions de surface.* En effet nous avons montré la complémentarité des méthodes MOF et Level-Set. Si l'hybridation de ces deux méthodes permet de tirer parti de leurs avantages respectifs, je pense néanmoins qu'il est possible, dans le cadre de l'approche MOF, d'obtenir un calcul plus précis de ces forces que ceux obtenus avec les méthodes VOF-PLIC et ses extensions (lissage, fonction hauteur), en utilisant l'intégrale de la force des tensions de surface sur la portion de l'interface contenue dans un volume de contrôle. Il serait aussi intéressant d'augmenter la précision de la description de l'interface en augmentant d'un facteur 2 ou 4 le raffinement du maillage associé au transport de l'interface.
- *sur le transport d'une interface le long d'une géométrie complexe.* Il s'agit ici d'aborder le problème de la ligne triple. Avant d'envisager la prise en compte des forces de tension de surface à ce niveau, il faut déjà être en mesure de transporter à l'ordre 2 en espace une interface dans une maille coupée par une frontière immergée. La méthode MOF se prêtera assez bien à cet exercice car elle est « nativement » tournée vers les aspects multimatériaux. Pour la méthode level-set, en revanche, il faudrait étendre les travaux réalisés à l'ordre 2 sur les frontières immergées à des ordres plus élevés, et donc des stencils plus larges. Pour cela, il serait possible d'ajouter des nœuds fantômes sur lesquels une extrapolation doit être faite, et/ou décaler les stencils vers les nœuds du domaine fluide.

Ce dernier point ouvre bien entendu la voie à l'étude de la modélisation et la simulation numérique des phénomènes de mouillage et de capillarité. Pour cela, j'ai engagé un autre projet il y a un peu plus d'un an avec la thèse de N.T. Le que je dirige et co-encadre avec M. Coquerelle (suite à une demande d'Autorisation à Diriger une Thèse). La prise en compte d'une ligne triple est complexe, aussi bien en raison de la physique du phénomène, de leurs modélisations mais aussi des méthodes numériques associées. Pour l'instant j'ai

choisi le cadre simplifié de l'étude de la remontée capillaire dans un tube et de l'advection de l'interface par une méthode particulière de *front-tracking* de la librairie open-source *FronTier*⁴³. L'approche repose sur le constat qu'il est difficile, dans une simulation tridimensionnelle, de descendre aux échelles microscopiques de ce phénomène. Il faut donc s'appuyer sur une modélisation numérique *macro-micro* dans laquelle l'écoulement est résolu à l'échelle macroscopique, le passage à l'échelle microscopique se faisant par une modélisation *ad hoc* des conditions aux limites. Des travaux intéressants en la matière sont ceux de Yamamoto⁴⁴ et de Spelt⁴⁵ qui s'appuient tous les deux sur la théorie asymptotique de Cox⁴⁶ reliant l'angle de contact macroscopique à l'angle microscopique. Il faut noter que Yamamoto utilise la condition à la limite de Navier-Stokes généralisée, et Spelt une condition de glissement. Spelt propose aussi une évolution de la loi de Cox pour les vitesses plus élevées de la ligne triple. Un premier objectif de la thèse est la confrontation de leurs travaux dans le contexte numérique simplifié de la remontée capillaire. Un second objectif est la prise en compte de géométries complexes par des méthodes numériques déjà évoquées (MOF, level-set).

D'un point de vue des applications auxquelles je participe, on retrouve l'étude du déferlement des vagues et du mascaret pour lequel l'intérêt du calcul massivement parallèle a été démontré. Ces synergies ont été motrices pour la recherche et la production scientifique, et je souhaite étendre cette expérience aux quatre autres sujets suivants :

- *les écoulements de fluides supercritiques*. Je participe depuis fin 2017 au projet ANR Superfon porté par A. Erriguible (I2M) sur les écoulements en milieux supercritiques. Dans ce cadre, j'ai proposé de travailler à la réduction drastique des temps de calcul afin d'envisager des simulations sur un réacteur chimique de taille réelle. Avec A. Lemoine, nous avons initié un travail d'optimisation sur les solveurs itératifs dans le cadre d'une programmation hybride MPI / OpenMP / Vectorisation. J'espère que ce nouvel investissement sera aussi profitable que celui mené sur la parallélisation du code il y a quelques années. Cette démarche de recherche sur la performance et l'efficacité d'un code destiné à l'expérimentation est aussi, au-delà des aspects purement techniques, source d'évolution et d'adaptation des méthodes numériques, comme le montrent les contributions sur les frontières immergées et la méthode MOF par exemple.
- *l'étude du micro-climat dans les grottes ornées*. Sur ce sujet porté par D. Lacannette I2M, je co-dirigerai une thèse avec elle et A. Lemoine à compter de septembre 2018. L'objectif numérique sera de prendre en compte à l'ordre 2 en espace les transferts

43. Jian Du, Brian Fix, James Glimm, Xicheng Jia, Xiaolin Li, Yuanhua Li, Lingling Wu, A simple package for front tracking, *Journal of Computational Physics*, 213, pp613–628, 2006.

44. Yasufumi Yamamoto, Katsunori Tokieda, Tatsuro Wakimoto, Takahiro Ito, Kenji Katoh, Modeling of the dynamic wetting behavior in a capillary tube considering the macroscopic–microscopic contact angle relation and generalized Navier boundary condition, *International Journal of Multiphase Flow*, 59, pp. 106-112, 2014

45. Sui, Y., Spelt, P.D.M., An efficient computational model for macroscale simulations of moving contact lines, *Journal of Computational Physics*, 242, pp. 37-52, 2013

46. The dynamics of the spreading of liquids on a solid surface. Part 1. Viscous flow. *Journal of Fluid Mechanics*. **168**, 169-194, 1986.

de masse et de chaleur à l'interface air/roche et d'améliorer ainsi l'outil numérique d'aide à la conservation du patrimoine archéologique.

- *le stockage de l'énergie dans des matériaux à changement de phase.* Avec A. Lemoine et C. Le Bot nous avons commencé à nous intéresser au traitement de l'interface marquant un front de solidification par la méthode MOF (problème de Neumann). La vitesse du front est donnée par une cinétique de changement de phase, le front étant reconstruit linéairement dans la maille. C'est une approche originale par rapport aux méthodes basées sur une fonction level-set que l'on rencontre plus habituellement. Notons que ces travaux nécessiteront aussi de s'intéresser aux conditions de continuité ou de saut des variables sur les interfaces passant de manière quelconque dans la maille.
- *les écoulements atmosphériques.* Je souhaite déposer des projets de recherche en collaboration avec l'équipe Éphyse de l'INRA de Bordeaux (S. Dupont) avec laquelle nous avons déjà collaboré dans le passé durant ma thèse de doctorat. La plupart des études environnementales ou écologiques appliquées à l'échelle du paysage négligent ou simplifient fortement les gradients horizontaux liés à l'hétérogénéité de la surface. Il convient donc de comprendre comment le vent est impacté par ces hétérogénéités et les conséquences induites sur les processus de dispersion, et ceci sur une gamme d'échelles spatiales allant du local ($\sim m$) au paysage ($\sim km$). Le projet relèverait plusieurs défis dont celui de la prise en compte dans Notus de conditions aux limites pour la turbulence dans le cadre des frontières immergées. Cet outil permettra de fédérer deux communautés scientifiques. Il pourra ainsi être utilisé dans de nombreux domaines d'applications où l'échelle du paysage est prégnante. *In fine*, cet outil aidera à établir des règles, des scénarios d'aménagement pour limiter, par exemple, la dispersion de contaminants, la vulnérabilité des arbres au vent, et intégrer ces résultats détaillés de simulations dans des modèles plus simples d'aide à la décision ou dans des modèles de plus grande échelle.

La réalisation de ces perspectives de recherche devrait être un pas supplémentaire vers l'utilisation du numérique comme outil d'exploration et d'expérimentation.

Le choix de travailler sur des grilles cartésiennes présente certains avantages comme la robustesse des schémas, la scalabilité des solveurs, la « simplicité » de l'approche. L'utilisation des frontières immergées est une approche intéressante pour traiter les géométries complexes. Ce contexte peut encore très largement, pour quelques années à venir, être exploité pour une recherche sur la compréhension de phénomènes physiques et sur les méthodes numériques pour les écoulements en présence d'interfaces.

Néanmoins, le traitement des problèmes multiéchelles ne saurait être complètement résolu par le calcul massivement parallèle sur une simple grille cartésienne. C'est par exemple le cas pour capter les couches limites laminaires sur des frontières immergées dans le cadre d'écoulements à très haut nombre de Reynolds, pour capter les plus petites inclusions d'air dans un déferlement, pour augmenter le dimensionnement des domaines d'étude. Si je replace mes travaux dans le cadre du projet collaboratif Notus, je pense que nous avons encore quelques années de travail avant d'envisager sereinement le passage à la prise en compte des plus petites échelles, une fois la capitalisation des travaux en cours et la

maîtrise fine des techniques et méthodes traduites dans un code de production. Il sera alors temps de développer une approche du raffinement de maillage, par exemple avec des Octree, qui a pour avantage de ne pas complètement rompre avec le caractère cartésien du maillage.

4 Liste des publications et communications

Les divers travaux auxquels j'ai pris part ont pu faire l'objet d'une diffusion sous la forme :

- d'un chapitre d'ouvrage ;
- de dix-neuf publications dans des revues de rang A ;
- de treize communications avec actes et comité de lecture ;
- de trois communications avec comité de lecture sans actes ;
- d'un rapport technique ;
- de six conférences invitées ;
- de cinq communications dans des séminaires ou groupes de travail.

Chapitres dans des ouvrages

1. H. Chanson, P. Lubin, S. Glockner, Chapter 3 : Unsteady Turbulence in a Shock : Physical and Numerical Modelling in Tidal Bores and Hydraulic Jumps. *In Turbulence : Theory, Types and Simulation*, edited by R. J. Marcuso, Series of Physics Research and Technology, Nova Science Publishers, pp 113-148, 2011.

Publications dans des revues à comités de lecture

19. 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*, 364, pp18–48, 2018.
18. A. Lemoine, S. Glockner, J. Breil, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 2D Cartesian Grids, *Journal of Computational Physics*, 328, pp131–139, 2017.
<http://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.10.013>
17. 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*, 305, pp. 838-876, 2015.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.11.014>
16. P. Lubin, S. Glockner, Numerical simulations of three-dimensional plunging breaking waves : generation and evolution of aerated vortex filaments, *Journal of Fluid Mechanics*, Volume 767, pp. 364- 393, 2015.
<http://dx.doi.org/10.1017/jfm.2015.62>
15. E. Ahusborde, M. Azaiez, S. Glockner, Poux, A., A contribution to the outflow boundary conditions for Navier-stokes time-splitting methods, *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 95, pp. 75-86, 2014.
http://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-319-01601-6_5

14. A. Poux, S. Glockner, E. Ahusborde, M. Azaiez, Open boundary conditions for the velocity-correction scheme of the Navier-Stokes equations, *Computers & Fluids*, vol. 70, pp. 29-43, 2012.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.08.028>
13. A. Poux, S. Glockner, M. Azaiez, Improvements on open and traction boundary conditions for NavierStokes time-splitting methods, *Journal of Computational Physics*, 230, pp. 4011-4027, 2011.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2011.02.024>
12. 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.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2010.07.009>
11. X. Nicolas, M. Medale, S. Glockner, S. Gounand, Benchmark Solution for a Three-Dimensional Mixed-Convection Flow, *Numerical Heat Transfer Part B-fundamentals*, vol. 60, no. 5, pp. 325-345, 2011a.
<http://dx.doi.org/10.1080/10407790.2011.616758>
10. X. Nicolas, S. Gounand, M. Medale, S. Glockner, Benchmark Solution for a Three-Dimensional Mixed-Convection Flow, Part 2 : Analysis of Richardson Extrapolation in the Presence of a Singularity, *Numerical Heat Transfer Part B-fundamentals*, vol. 60, no. 5, pp. 346-369, 2011b.
<http://dx.doi.org/10.1080/10407790.2011.616761>
9. P. Lubin, S. Glockner, O. Kimmoun, H. Branger, Numerical study of the hydrodynamics of regular waves breaking over a sloping beach, *European Journal of Mechanics B-fluids*, vol. 30, no. 6, pp. 552-564, 2011.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.euromechflu.2011.01.001>
8. P. Lubin, S. Glockner, H. Chanson, Numerical simulation of a weak breaking tidal bore. *Mechanics Research Communications*, 37 (1), pp. 119-121, 2010.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.mechrescom.2009.09.008>
7. P. Lubin, H. Chanson, S. Glockner, Large Eddy Simulation of turbulence generated by a weak breaking tidal bore. *Environmental Fluid Mechanics*, 10 (5), pp. 587-602, 2010.
<http://dx.doi.org/10.1007/s10652-009-9165-0>
6. P. Lubin, S. Glockner, H. Chanson, Numerical simulation of a weak breaking tidal bore, *Mechanics Research Communications* 37 (1), pp. 119-121, 2010.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.mechrescom.2009.09.008>
5. S. Abadie, D. Morichon, S. Grilli, S. Glockner, Numerical simulation of waves generated by landslides using a multiple-fluid Navier-Stokes model, *Coastal Engineering*, vol. 57, no. 9, pp. 779-794, 2010.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.coastaleng.2010.03.003>
4. 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.
<http://dx.doi.org/10.1002/flid.2044>
3. 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.
<http://dx.doi.org/10.1002/flid.1439>
 2. C. Romé, S. Glockner, An implicit multiblock coupling for the incompressible Navier-Stokes equations, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, vol. 47, no. 10-11, pp. 1261-1267, 2005.
<http://dx.doi.org/10.1002/flid.898>
 1. P. Joubert, P. Le Quéré, C. Beghein, B. Collignan, S. Couturier, S. Glockner, D. Groleau, P. Lubin, M. Musy, S. Vincent, A numerical exercise for turbulent natural convection and pollutant diffusion in a two-dimensional partially partitioned cavity. *International Journal of Thermal Sciences*, 44 (4), pp. 311-322, 2005.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2004.09.005>

Communications avec comités de lecture et actes

13. J. Picot, S. Glockner, T. Milcent, D. Lacanette, Extension of immersed boundary methods to anisotropic grids. ECCOMAS Congress, 2016, Crete Island.
12. A. Lemoine, S. Glockner, J. Breil, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on Cartesian Grids, ECCOMAS Congress, 2016, Crete Island.
11. P. Lubin and S. Glockner, Three-dimensional numerical simulations of aerated vortex filaments under plunging breaking waves. *ASCE 34th International Conference on Coastal Engineering*, 2014.
10. B. Simon, P. Lubin, S. Glockner, Simulation de l'écoulement sous une onde positive ondulée. *21ème Congrès Français de Mécanique*, 2013.
9. P. Lubin and S. Glockner, Detailed numerical investigation of the three-dimensional flow structures under breaking waves. *7th International Conference on Coastal Dynamics Conference*, pp. 1127-1136, 2013.
8. P. Lubin and S. Glockner, Numerical simulations of breaking solitary waves. *ASCE 33rd International Conference on Coastal Engineering*, 1 (33), waves.59, 2012.
7. B. Simon, P. Lubin, S. Glockner, H. Chanson, Three-dimensional numerical simulation of the hydrodynamics generated by a weak breaking tidal bore., *34th IAHR World Congress*, Engineers Australia Publication, Eric Valentine, Colin Apelt, James Ball, Hubert Chanson, Ron Cox, Rob Ettema, George Kuczera, Martin Lambert, Bruce Melville and Jane Sargison Editors, pp. 1133-1140 (ISBN 978-0-85825-868-6), 2011.
6. P. Lubin, S. Glockner, O. Kimmoun and H. Branger, Numerical simulations of spilling breaking waves. *ASCE 32nd International Conference on Coastal Engineering* (2010), Paper : waves.10, 2011.

5. P. Lubin, S. Glockner, H. Chanson, Numerical Simulation of Air Entrainment and Turbulence in a Hydraulic Jump, *SHF « Modèles physiques hydrauliques : outils indispensables du XXIe siècle ? »*, 2009.
4. Abadie, S, Gandon, C., Grilli, S., Fabre R., Riss, J., Tric, E., Morichon D., Glockner, S., “3D Numerical simulations of waves generated by subaerial mass failures. Application to La Palma case”, 31th International Conference on Coastal Engineering 2008, 1384-1395, Hamburg.
3. Abadie, S, Grilli, S., Glockner, S., ”A coupled numerical model for tsunami generated by subaerial and submarine mass failures”, in Proc. 30th International Conference on Coastal Engineering 2006, San Diego, California, USA. 1420-1431, 2006
2. C. Romé, S. Glockner, J-P. Caltagirone, Méthode de connexion de maillages multi-blocs non conformes pour les équations de Navier-Stokes, *17 ème Congrès Français de Mécanique*, 29 août-2 septembre, Troyes, 2005.
1. P. Joubert, P. Le Quéré, C. Beghein, B. Collignan, S. Glockner, D. Groleau, P. Lubin, M. Musy, S. Vincent, Sodé observed differences between DNS, LES and standard RANS approaches. Panel Discussion in *12th International Heat Transfer Conference*, 2002.

Communications avec comité de lecture et sans acte

L'intervant est indiqué en italique.

3. *E. Ahusborde*, M. Azaiez, S. Glockner, A. Poux, A contribution to the outflow boundary conditions for Navier-Stokes time-splitting methods, *International Conference on Spectral and High Order Methods (ICOSAHOM)*, Gammarth Tunisia, June 25-29, 2012.
2. *P. Lubin*, S. Glockner, H. Chanson, Numerical simulation of turbulence generated by a tidal bore. *Conference on Turbulence and Interactions TI2009*, 2009.
1. *S. Glockner*, S. Vincent, J.-P. Caltagirone, M. Azaiez, D. Lacanette, P. Lubin, P. Pianet, T. N. Randrianarivelo, Comparisons among VOF, TVD and Marker Methods, AMR Techniques, penalisation methods and incompressibility treatment for incompressible flows - *Industrial applications. Macsinet Working Group Geometric Modeling, CAD, evolving interfaces and surfaces at the Vrije Universiteit Brussel*, 2003.

Rapport technique

1. S. Glockner, N. Audiffren, H. Ouvrard, Porting and Evolution of Thétis on the Curie Supercomputer, *Partnership for Advanced Computing in Europe preliminary access report*, 2013.

Conférences invitées

L'intervant est indiqué en italique.

6. *S. Glockner*, M. Coquerelle, A. Lemoine, J. Picot, CFD code Notus (0.2.0) : environnement, architecture, verification and validation, performances, Journée RNC COSIN "Développement et maintenance de grands codes de simulation", ENSAM Paristech, september 11th 2017.
5. *J. Picot*, *S. Glockner*, T. Milcent, D. Lacanette, Méthode des frontières immergées pour les maillages cartésiens anisotropes dans le code Notus. Présentation TASC - CORIA, 24 février 2016.
4. *A. Lemoine*, *S. Glockner*, J. Breil, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 2D Cartesian grids. Los Alamos National Laboratory 01/22/2016.
3. *A. Lemoine*, *S. Glockner*, J. Breil, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 2D Cartesian grids. Florida State University 01/25/2016.
2. *P. Lubin*, *S. Glockner*, Numerical CFD simulations of the three-dimensional flow structures under breaking waves. The University of Queensland, School of Civil Engineering, 2013.
1. *S. Glockner*, E. Ahusborde, Multiphase flow simulations in a block-structured framework, *High Accuracy Flow Simulations*, EPFL, Lausanne, 2010.

Séminaires et groupes de travail

Le(s) intervenant(s) sont indiqués en italique.

5. *J. Picot*, *S. Glockner*, Notus testing framework, *Groupe de Travail « Plate-forme de tests pour codes parallèles »*, INRIA Bordeaux, 26 jan. 2016.
4. *S. Glockner*, M. Coquerelle, A. Lemoine, J. Picot, Notus : un code pour la mécanique des fluides incompressibles, groupe de travail « Modèles numériques pour les écoulements complexes incompressibles », *Groupe de Travail cluster CPU*, Université de Bordeaux, 22/05/2015
3. *S. Glockner*, *P. Lubin*, Un solveur Navier-Stokes massivement parallèle pour l'étude du mascaret et le déferlement des vagues. *Journée scientifique du MCIA*, Université de Bordeaux, 2013.
2. *B. Simon*, *P. Lubin*, *S. Glockner*, H. Chanson, Numerical CFD simulation of tidal bores : comparison with laboratory data, *Workshop on Environmental Fluid Mechanics, Geophysical Flows and Modelling*, The University of Queensland, School of Civil Engineering, 2013.
1. *S. Glockner*, *P. Lubin*, Évolutions d'un solveur Navier-Stokes massivement parallèle pour la simulation du déferlement de vagues, *Journées Succès 2013, Rencontres Scientifiques des Utilisateurs de Calcul Intensif, de Cloud et de Stockage*, Institut de Physique du Globe de Paris, 2013.