Méthode des frontières immergées pour les maillages cartésiens anisotropes dans le code Notus

Joris Picot[1]
Stéphane Glockner[2] Thomas Milcent[3] Delphine Lacanette[2]

Présentation TASC – CORIA
24 février 2016

[1]Université de Bordeaux, I2M, UMR 5295
[2]Bordeaux INP, I2M, UMR 5295
[3]Arts et Métiers Paritech, UMR 5295

CPU
Le monde numérique au service de la certification et de la sécurisation des systèmes

Qui suis-je ?

Parcours

2006–2009 École d'ingénieur **MATMECA**

Spécialité : *fluides et énergétique*

2009–2014 Thèse et post-doc au **CERFACS**

Direction : *Roberto Paoli* et *Daniel Cariolle*

Sujet : *effets de la turbulence atmosphérique sur les traînées de condensations.*

2014–2016 Post-doc à **I2M**

Sujet : **méthode des frontières immergées pour les maillages cartésiens anisotropes dans le code Notus. Application à la simulation des écoulements dans la grotte de Lascaux**

Notus

Nouveau code CFD de l'I2M, depuis 2015

Développeurs :

Stéphane Glockner, Antoine Lemoine, Mathieu Coquerelle, Joris Picot

- Code en **phase de développement**

Écoulements d'air dans les grottes de Lascaux

Géométries des grottes complexes

- Utilisation d'une **méthode de frontières immergées**

Calculs très intensifs

$$\Delta x = 30\,\mathrm{cm} \quad \rightarrow \quad 5 \times 10^6 \text{ points} \quad \rightarrow \quad 50 \text{ cœurs}$$

$$\Delta x = 5\,\mathrm{cm} \quad \rightarrow \quad 1000 \times 10^6 \text{ points} \quad \rightarrow \quad 10\,000 \text{ cœurs}$$

en comptant 100 000 points par cœur

- Utilisation d'algorithmes **massivement parallèles**

Plan

Partie 1

Notus

Caractéristiques principales

- Code dédié aux **écoulements incompressibles, multiphasiques**
- Volumes finis, 2D et 3D, **maillages cartésiens**
- Pensé **massivement parallèle**

Méthodes numériques

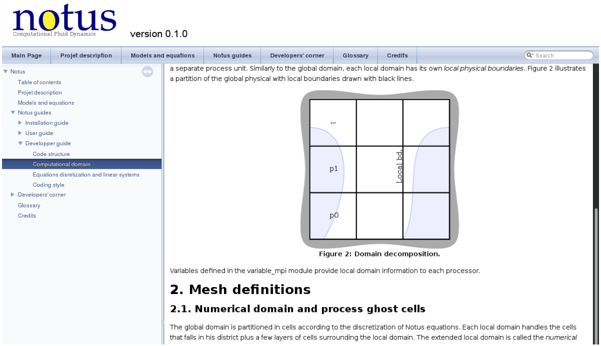
- Navier-Stokes : *fractional step method*, Goda et Timmermans
- Interfaces : Level-set, Volume-of-Fluid, **Moment-of-Fluid**
- Géométries complexes : **frontières immergées**

notus
Computational Fluid Dynamics

Objectifs visés

- Facile d'utilisation et facilement adaptable
  - Code **open-source** et **documenté** avec **Doxygen**

`http://notus-cfd.org/doc/index.html`



Objectifs visées

- Repose sur des technologies existantes
  - Systèmes linéaires : bibliothèques HYPRE et MUMPS
  - Entrées-sorties parallèles : ADIOS
- Développements coordonnés avec **git**
  - Permet de développer à 4 en parallèle
  - Déploiement sur différentes machines :
    curie (TTGC), occigen (CINES), turing (IDRIS), avakas (MCIA)
- Validation solide et **automatisée**

Validation de la convergence en espace

```
$ python notus_grid_convergence.py test_cases/poiseuille
              ... Notus output ...
$ cat test_cases/output/grid_convergence_poiseuille
#       Temperature L2 error        Mean temperature
   16 +4.490870e-03          +nan +1.441965e+00          +nan
   32 +1.288911e-03 +1.800842e+00 +1.445137e+00          +nan
   64 +2.916412e-04 +2.143887e+00 +1.446128e+00 +1.677552e+00
  128 +7.630639e-05 +1.934319e+00 +1.446343e+00 +2.208364e+00
  256 +1.892504e-05 +2.011508e+00 +1.446401e+00 +1.890371e+00
  512 +4.696270e-06 +2.010709e+00 +1.446415e+00 +2.065669e+00
 1024 +1.195573e-06 +1.973813e+00 +1.446418e+00 +1.988532e+00
```

- La démarche est **automatisée** le plus possible
- Les grandeurs à analyser sont précisées dans le cas test
- Possibilité d'utiliser la méthode de Richardson

Validation de la non régression

```
$ ./notus_validation.sh
Test case name            Validated Converged Iterations  Error
ibd_laplacian_dirichlet     FAIL
poiseuille                   OK        OK          356     1.387778e-17
poiseuille_viscosity         OK        OK         2989     0.000000e+00
level_set_sheared_2D         NO        N/A         200     3.820045e-08
mof_minimization_sheared     OK        N/A        1000     2.220446e-16
vof_plic_periodic            OK        N/A         141     3.330669e-16
ball_equilibrium             NO        OK         1128     1.496367e-07
driven_cavity                OK        OK         3449     5.162537e-15
dam_break_mof                OK        N/A          50     2.531308e-14
dam_break_vof_plic           OK        N/A          50     3.355649e-14
```

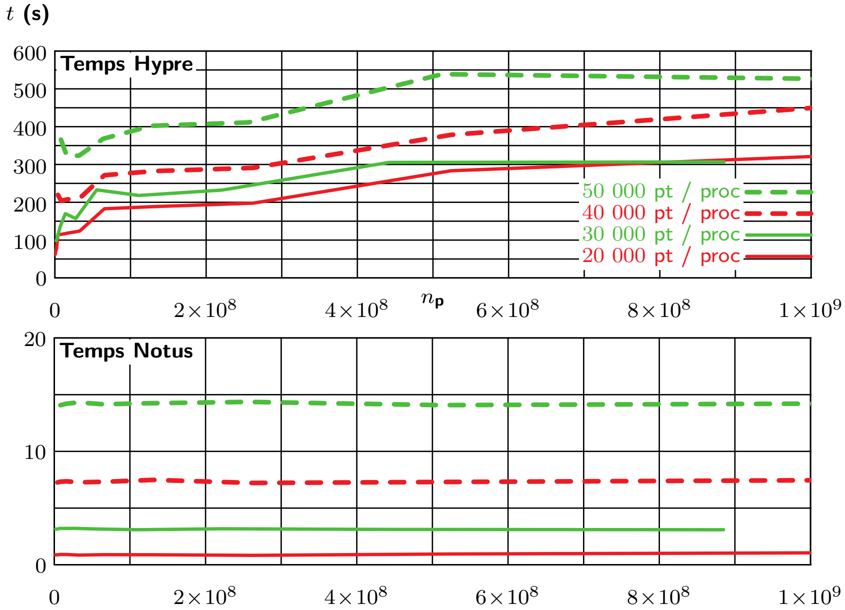
- Compare un résultat scalaire attendu, pour chaque cas test
- La démarche est **automatisée** le plus possible
- Différents jeux de validation selon le besoin (rapide, complet, etc.)

Validation des performances parallèles

```
$ ./scalability_script_turing.sh
Np         Total     Hypre (velocity) Hypre (pressure)     Notus
 128   0.26000e+01   0.86140e+00      0.94443e+00     0.79417e+00
 256   0.29297e+01   0.10660e+01      0.10462e+01     0.81751e+00
 512   0.30754e+01   0.11369e+01      0.11025e+01     0.83590e+00
1024   0.38859e+01   0.16025e+01      0.13959e+01     0.88751e+00
2048   0.43207e+01   0.18807e+01      0.15359e+01     0.90404e+00
4096   0.47281e+01   0.22302e+01      0.16268e+01     0.87108e+00
8192   0.65902e+01   0.32613e+01      0.23815e+01     0.94744e+00
```

- Relève le temps de calcul pour différentes parties du code
- La démarche est **automatisée** le plus possible

Validation des performances parallèles



Liste des écoulements physiques simulés

- Convection naturelle
- Cavité entraînée
- Bulle ascendante
- Rupture de barrage
- Vagues solitaires

Avancement du projet

Sortie interne : janvier 2016
Écoulements :

- Jet turbulent
- Interaction avec solides élastiques

Sortie publique : dernier trimestre 2016

`http://www.notus-cfd.org/`

Partie 2

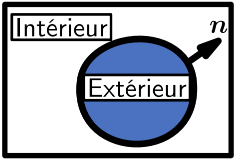
Frontières immergées pour l'équation de Laplace

Motivation des frontières immergées (FI)

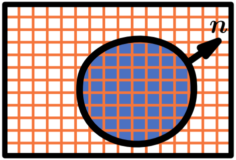
S'affranchir de la complexité des maillages curvilignes et non-structurés.

Possibilités offertes :

- Solution convergeante au 2e ordre,
- Frontières mobiles,
- Lois de paroi.



Domaines.



Frontière immergée.

Méthodes existantes

Beaucoup d'approches existent :

- Forçage continu (Peskin, 1972)
- Forçage discret
  - *Ghost-Cell Finite-Differences*
  - *Cut-Cell Finite-Volumes*

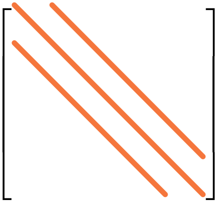
Dans Notus

Méthode de type **Ghost-Cell Finite-Differences.**

Contraintes liées au parallélisme

- Stockage des grands systèmes linéaires
- Performance des solveurs

- Notus utilise des **matrices à bandes**



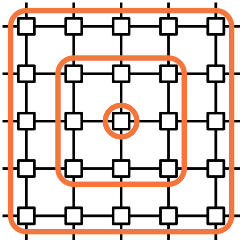
Matrice à bandes A

Compacité

Le stencil de discrétisation est **compact d'ordre** c **si :**

$$|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i| > \Rightarrow A_{ij} = 0$$

où A est la matrice.



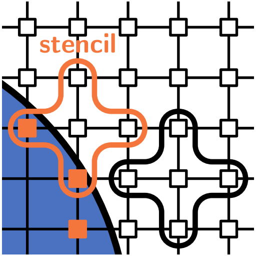
Compacités : 0, 1, 2.

Méthode *Ghost-Cell Finites-Differences*

Discrétisation de **l'équation de Laplace** :

$$\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2} = f_i$$

au points x_i du **domaine intérieur uniquement.**



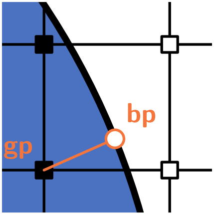
Stencil du sys. linéaire.

Près de la frontière, $u_{i\pm1}$ peut ne pas être défini,

- c'est un **nœud fantôme.**

Principe général

La CL au *boundary point* (**bp**) va définir une valeur au *ghost point* (**gp**).



Application de la CL.

Le point **bp** est obtenu à l'aide d'une *levelset.*

Discrétisation de la CL

Interpolation et différences finies :

$$\sum_j \beta_j u_j = u_{\mathbf{bp}} \qquad \text{(Dirichlet)}$$

$$\sum_j \gamma_j u_j = \partial_{\boldsymbol{n}} u_{\mathbf{bp}} \qquad \text{(Neumann)}$$

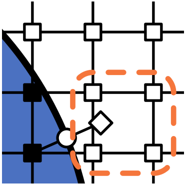
Équations **couplées** → modification du système linéaire, résolution **implicite**

$$(A + E) = f + b$$

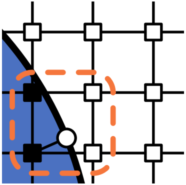
Interpolation

Différentes méthodes d'interpolation possibles

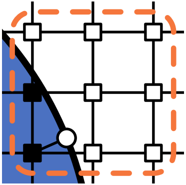
- Méthode **linéaire** (Mittal, 2008)
- Méthode **directe** (Cocco & Russo, 2012)
- Méthode des **moindres carrés** (Mousel, 2012)



Méthode linéaire.



Méthode directe.



Ordre plus élevé.

Cas des maillages anisotropes

Nombre d'anisotropie $a = \dfrac{\Delta_{\text{max}}}{\Delta_{\text{min}}}$

On a :

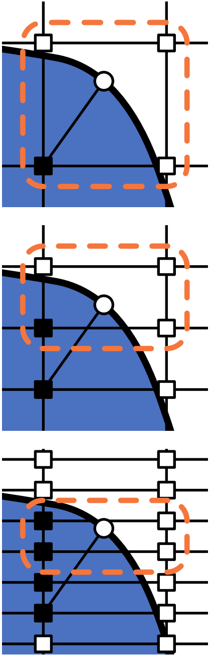
$$c = \lceil 2a \rceil \qquad \text{(Méthode linéraire)}$$

$$c = \lceil a \rceil \qquad \text{(Méthode directe)}$$

- L'anisotropie **augmente l'étendue du stencil**

Les matrices à bandes sont rapidement limités
Typiquement : $c \leq 1$ ou $c \leq 2$

- Nécessité de **modifier la méthode**



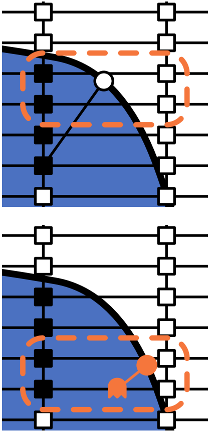
Ghost point shifting

Le point **gp** est **décalé** vers le nœud intérieur le plus proche.

- Le nouveau point **bp** est décalé aussi.
- L'équation devient plus **compacte.**

On obtient :

$$c = 2 \qquad \text{(Méthode linéraire)}$$
$$c = 1 \qquad \text{(Méthode directe)}$$



Tests — Équation de Laplace

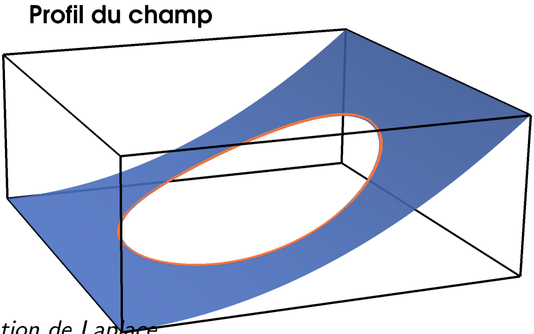
Domaine carré Ω avec un obstable circulaire Γ centré :

$$\Omega = [-1, +1] \times [-1, +1] \qquad \Gamma = \text{Disque}\left(O, r = 0.65\right)$$

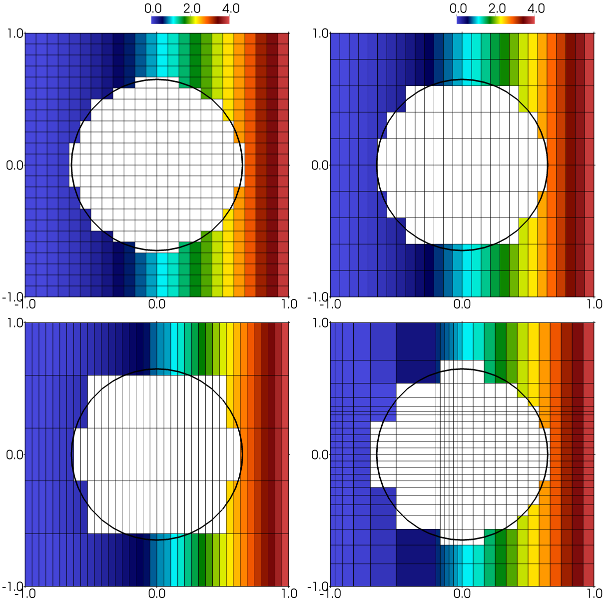
Solution paraboloïde avec conditions limites adaptées :

$$u(x, y) = (1 + x)^2 \qquad \Delta u(x, y) = 2$$

$$u_\Gamma = (1 + x_\Gamma)^2 \quad \text{(Dirichlet)} \quad \partial_{\boldsymbol{n}} u_\Gamma = 2(1 + x_\Gamma) \quad \text{(Neumann)}$$



Tests — Équation de Laplace



Maillages

Solutions convergées pour

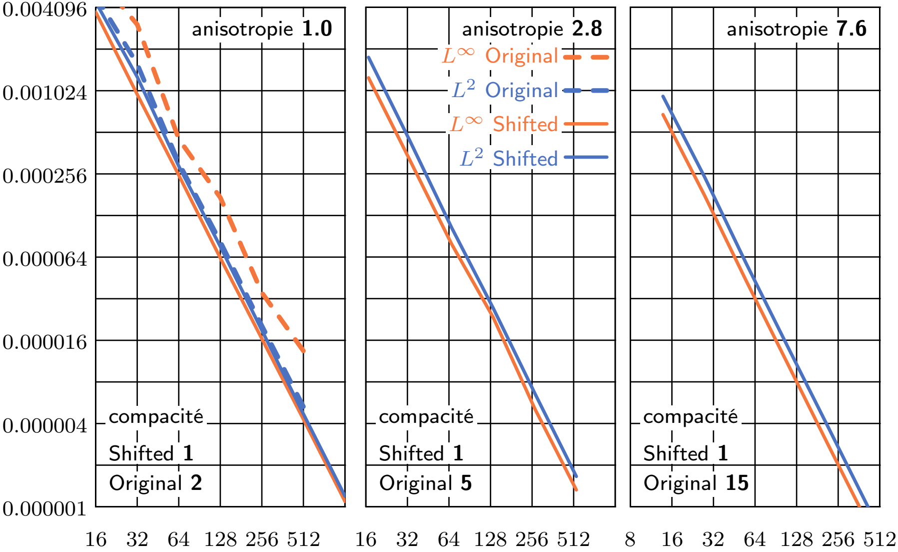
- $a = 1$ (isotrope)
- $a = 2.8$
- $a = 7.6$
- irrégulier

Test de convergence

Sur les maillages

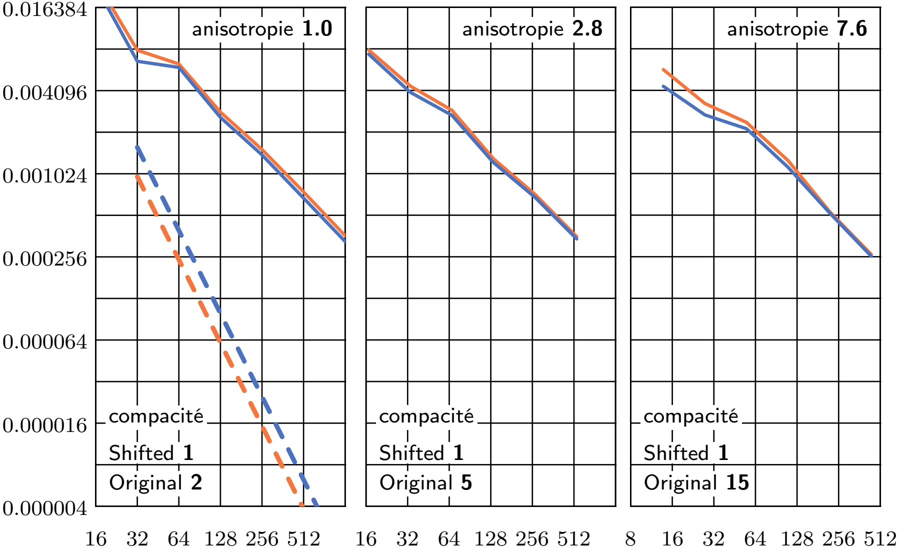
1, 2.8, 7.6

Condition limite de **Dirichlet**



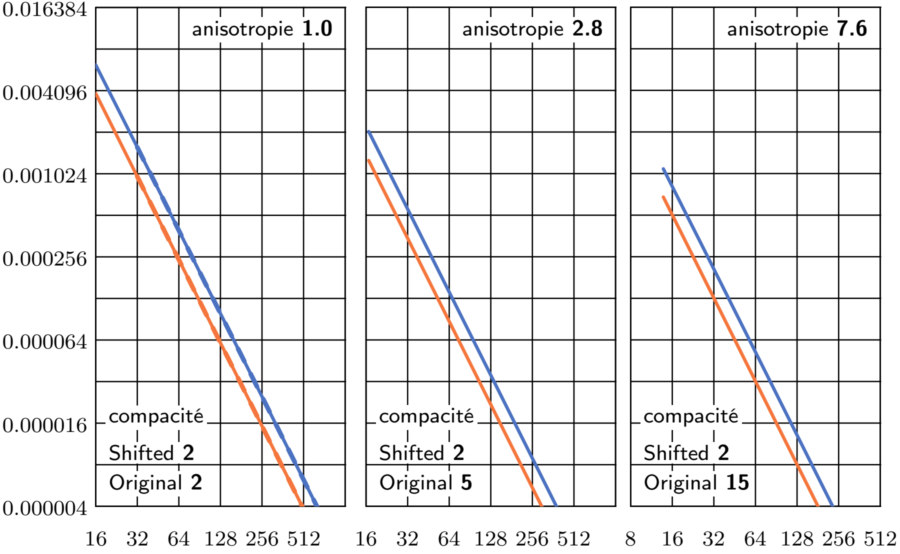
- **Compact et converge au deuxième ordre**

Condition limite de **Neumann**



- **Compact et converge au premier ordre**

Condition limite de **Neumann**



- **Un peu moins compact et converge au deuxième ordre**

Partie 3

Frontières immergées pour les équations de Navier-Stokes

Application aux équations de Navier-Stokes

Formulation incompressible

Conditions limites

$$\partial_t \boldsymbol{u} + \operatorname{div}(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) + \boldsymbol{\nabla} p = \nu \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{u} \qquad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$$

$$\operatorname{div} \boldsymbol{u} = 0 \qquad \partial_{\boldsymbol{n}} p = 0$$

Méthode prédicteur-correcteur

$$\partial_t \boldsymbol{u}^* + \operatorname{div}(\boldsymbol{u}^* \otimes \boldsymbol{u}^n) + \boldsymbol{\nabla} p^n = \nu \boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{u}^* + \boldsymbol{f} \tag{1}$$

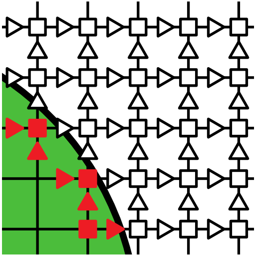
$$\delta t \, \Delta \Phi = \operatorname{div} \boldsymbol{u}^* \tag{2}$$

$$p^{n+1} = p^n + \Phi \tag{3}$$

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = \boldsymbol{u}^* - \delta t \, \boldsymbol{\nabla} \Phi \tag{4}$$

- L'inertie est semi-implicite : $\operatorname{div}(\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u}) \approx \operatorname{div}(\boldsymbol{u}^* \otimes \boldsymbol{u}^n)$
- Deux systèmes linéaires : (1) et (2)
- Trois différentiations : $\boldsymbol{\nabla} p^n$, $\operatorname{div} \boldsymbol{u}^*$, $\boldsymbol{\nabla} \Phi$

Discrétisation spatiale



Grille décalée

$$\boldsymbol{u} \to \begin{bmatrix} u_{i+\frac{1}{2},j} & v_{i,j+\frac{1}{2}} \end{bmatrix}$$

$$p \to p_{i,j}$$

Détermination des points fantômes

Idem à l'éq. de Laplace pour chaque variable

Les champs discrets sont-ils bien définis ?

- Oui, sauf pour u^n **sur les points fantômes.** (Cf. terme d'inertie)

Solution : Extrapolation de $\boldsymbol{u}^n$ après l'étape de correction

$$\boldsymbol{u}^{n+1} = \boldsymbol{u}^* - \delta t \, \boldsymbol{\nabla} \Phi \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} \boldsymbol{u}^{**} &= \boldsymbol{u}^* - \delta t \, \boldsymbol{\nabla} \Phi \\ (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\mathcal{E}})\boldsymbol{u}^{n+1} &= \boldsymbol{u}^{**} + b \end{aligned}$$

Tests — Écoulement de Poiseuille

Domaine canal plan avec grille non coïncidente

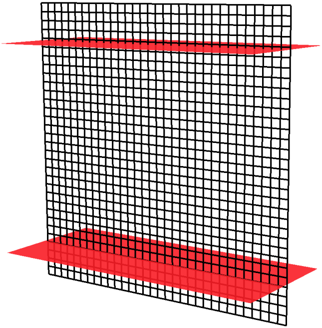
$$\Omega = [0, +2] \times [-1, +1] \qquad \Gamma = \text{Droite}\left(y = \pm H = \pm 0.65\right)$$

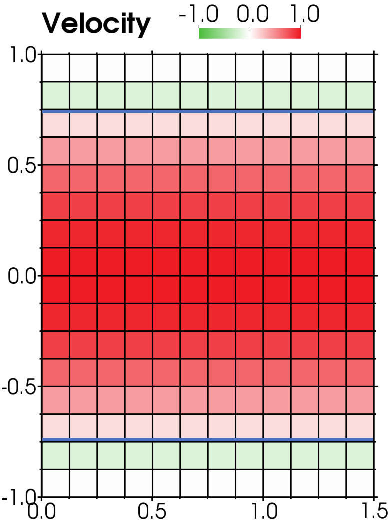
CL périodiques

Solution parabolique

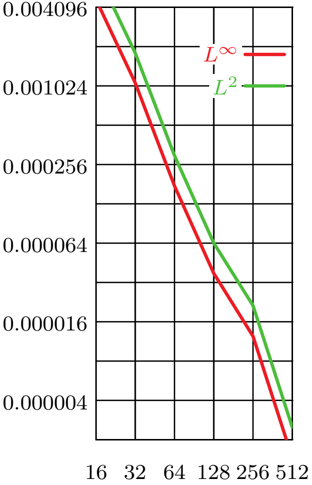
$$u(x, y) = u_{\max}\left(1 - \frac{y}{H}\right)^2$$

$$f_x = \frac{2\nu u_{\max}}{H^2}$$





Test de convergence



- **Converge au deuxième ordre**

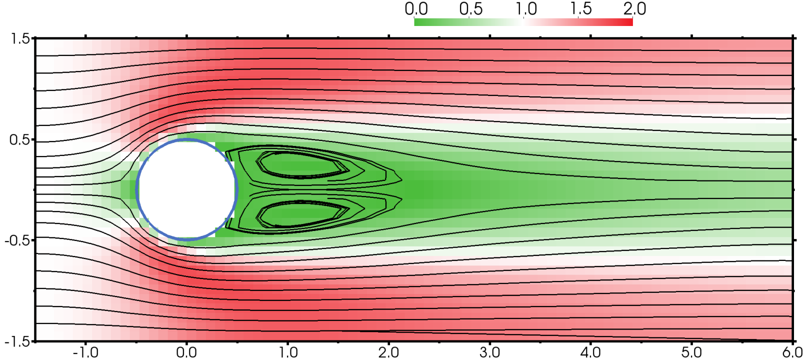
Tests — Écoulement autour du cylindre

Domaine canal plan avec grille non coïncidente

$$\Omega = [-1.5, +6.0] \times [-1.5, +1.5] \quad \Gamma = \text{Cylindre}\left(O, r = 0.5\right)$$

CL vitesse imposée en entrée. symmétrie sur les côtés

Régime stationnaire : $Re = 40$



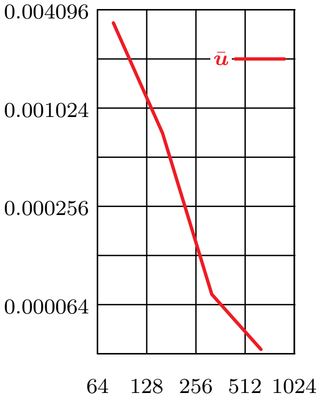
Tests — Écoulement autour du cylindre

Validation

Étude de convergence par extrapolation de Richardson

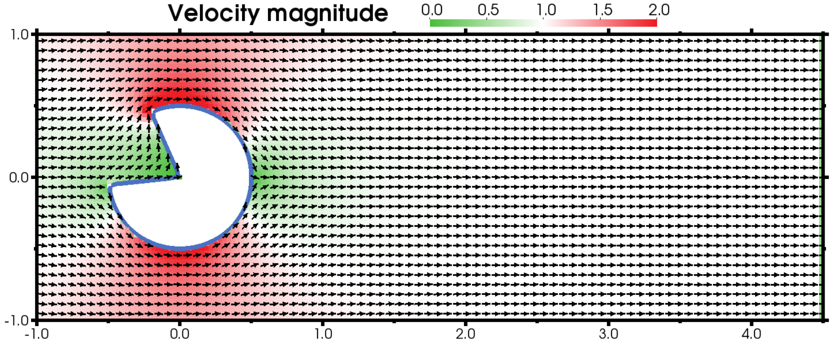
- Erreur « perturbée » par le volume changeant avec la grille
- **Converge au deuxième ordre**

Test de convergence



Frontière irrégulière « pacman »

$Re = 60$



Partie 4

Conclusions

Conclusions

Méthode des frontières immergées

Implémentée dans Notus

- Convergente au 2^{e} ordre
- Reste compacte pour des maillages anisotropes

Validation

- Équation de la chaleur
- Écoulement de Poiseuille
- Écoulement autour du cylindre
- Validation 3D en cours

Perspectives

- Analyse des performances parallèles
- Implémentation des objets, application à Lascaux