Calcul Intensif et Mécanique des fluides
Rencontres OSUG-LJK

Christophe Picard (LJK)

18 mars 2013

Variations de paramètres

Etude numérique afin d'étudier l'influence des paramètres

- Vérification de programmes.
- Construction de plan d'expériences.
- Calibration de modèles.
- Quantification d'incertitude.
- Analyse de sensibilité.

$\Longrightarrow$ Calcul sur grille

28 Mars 2013 - Workshop Quantification d'incertitude et calcul intensif

Passage à l'échelle

Résolution séquentielle à atteint ses limites

- Limitation géométrique du problème.
- Limitation dans l'étude des caractéristiques physiques.
- Exemple 1 - étude des écoulements écoulements à haut nombre de Schmidt.
- Exemple 2 - étude de la turbulence.

$\Longrightarrow$ Changement de solveur

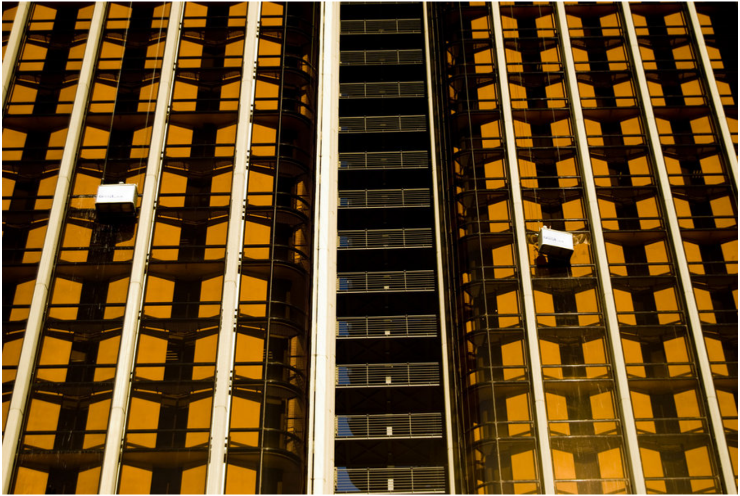
22 Janvier 2013 - Introduction to PETSc : a user's point of view

Nouveaux problèmes

Problèmes ne pouvant pas être séquentiels

- Modèles complexe.
- Couplage de modèles.
- Exemple 1 - simulation microfluidique
- Exemple 2 - colonne à bulle
- Exemple 3 - cuve à mélange : fluides complexes, multiphasiques et réactifs

$\Longrightarrow$ Couplage de codes, méthodes numériques dédiées



Quelques éléments

- Des architectures :
  distribuées, partagées, accélérateurs
- Des méthodes numériques :
  décomposition de domaine
- Des solveurs :
  LU mutltifrontal, itératifs, FFT, multigrille
- Des algorithmes :
  réduction, map, tri, motif, gather, scatter

Modèle général

- Équations de Navier-Stokes

$$\partial_t U + U \cdot \nabla U - \nabla \cdot (\eta(\nabla U + (\nabla U)^T)) = \nabla P + F,$$
$$\nabla \cdot U = G$$

  - η est la viscosité (anisotrope) du ou des fluides étudiés,
  - U est la vitesse du fluide,
  - P est la pression dans l'écoulement,

- Fluide visco-élastique

$$F = \nabla \cdot T, \; G = 0$$

  T modélise les contraintes.

- Evolution de l'interface

$$\partial_t \phi + U \cdot \nabla \phi = 0$$

Schwarz Additif

On considère formellement le problème suivant

$$L[U] = f \ in \, \Omega, \ U_{|\partial\Omega} = g.$$

On suppose que le problème est bien posé et qu'il admet une unique solution. Schwarz additif s'écrit

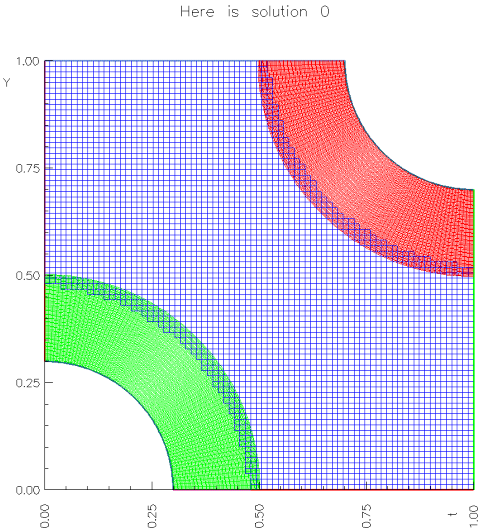
$$L[u_1^{n+1}] = f in \, \Omega_1, \ u_{1|\Gamma_1}^{n+1} = u_{2|\Gamma_1}^{n},$$
$$L[u_2^{n+1}] = f in \, \Omega_2, \ u_{2|\Gamma_2}^{n+1} = u_{1|\Gamma_2}^{n}.$$

L étant linéaire, on définit l'opérateur T^a ,

$$(u_{1|\Gamma_1}^{n} - U_{|\Gamma_1}, u_{2|\Gamma_2}^{n} - U_{|\Gamma_2}) \rightarrow (u_{1|\Gamma_1}^{n+1} - U_{|\Gamma_1}, u_{2|\Gamma_2}^{n+1} - U_{|\Gamma_2})$$

également linéaire.

Exemples de domaines



Préliminaire

La solution de Schwarz additif dans l'espace de Fourier s'écrit

$$\hat{u}_1^{n+1}(x,k) = \hat{u}_1^{n-1}(L/2,k)e^{k(x+L/2)}$$
$$\hat{u}_2^{n+1}(x,k) = \hat{u}_2^{n-1}(-L/2,k)e^{k(x-L/2)}$$

Le taux de convergence est donné par

$$\begin{aligned}\rho(k,l) &= \frac{\hat{u}_1^{n+1}(L/2,k)}{\hat{u}_1^{n-1}(L/2,k)} \\ &= e^{-kL}\end{aligned}$$

Aitken Additif

(Ref. Garbey Tromeur-Dervout 2000)
On définit les opérateurs T_l^a,

$$u_{1|\Gamma_1}^n - U_{\Gamma_1} \rightarrow u_{2|\Gamma_2}^{n+1} - U_{\Gamma_2}$$

et T_r^a

$$u_{2|\Gamma_2}^n - U_{\Gamma_2} \rightarrow u_{1|\Gamma_1}^{n+1} - U_{\Gamma_1}$$

En utilisant une base discrète pour l'interface (Γ_i^h dans E_i^h, pour $i = 1..2$,) :

$$(u_{2,j}^{n+1} - U_{j,\Gamma_2})_{j=1,..,N} \;=\; P_l \,(u_{1,j}^n - U_{j,\Gamma_1})_{j=1,..,N},$$

et

$$(u_{1,j}^{n+1} - U_{j,\Gamma_1})_{j=1,..,N} \;=\; P_r \,(u_{2,j}^n - U_{j,\Gamma_2})_{j=1,..,N},$$

avec P_l (resp. P_r) la matrice associée à T_l^a (resp. T_r^a).

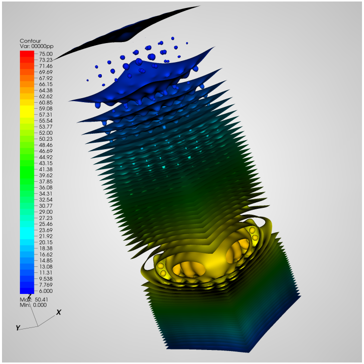
Algorithme

1. Calculer P^l et P^r.
2. A partir de la condition initiale artificielle sur l'interface u_1^0 et u_2^0 calculer le premier itéré de Scwharz .
3. A partir de u_1^0, u_1^1 et du système linéaire P^a

   $$\begin{pmatrix} Id & -P_r \\ -P_l & Id \end{pmatrix}$$

   calculer les solutions exactes sur l'interfaceU_{j,Γ_1} et U_{j,Γ_2}.
4. A partir des conditions aux limites artificielles $U_{|\Gamma_1} = \sum_{j=1..N} U_{j,\Gamma_1} b_1^j$ and $U_{|\Gamma_2} = \sum_{j=1..N} U_{j,\Gamma_2} b_2^j$, calculer le dernier itéré de Schwarz U.

Outils et méthodes



- Discrétisation volumes finis sur des maillages cartésiens.
- Description des structures complexes avec des Level-set.
- Pénalisation pour les géométries complexes.

$\Longrightarrow$ Excellent pré-requis pour des calculs efficaces

Problème

(*Ref. Cottet, Etancelin*)

Résoudre l'équation de continuité

$$\frac{d}{dt}\int_{V(t)} u dv = \int_{V(t)} F(x, u, \nabla u, t, \dots) dv$$

- $u(x, t)$: vecteur ou scalaire
- $V(t)$: le volume de fluide considéré
- Equation de transport :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + div(Au) = 0$$

- $A(x, t)$ champ de vecteur

Remaillage

Principe

- Utilisation d'une grille sous-jacente
- Interpolation des particules sur la grille
- Initialisation des particules sur la grille

En pratique

- Formules d'ordre élevé
- Remaillage à chaque étape

$$M'_4(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}\left(2 + 2|x| - 3|x|^2\right)(1 - |x|) & \text{if } 0 < |x| < 1 \\ \frac{1}{2}(2 - |x|)^2(1 - |x|) & \text{if } 1 < |x| < 2 \\ 0 & \text{if } 2 < |x| \end{cases}$$

Transport du scalaire

1. Advection : opérateur de grille
   Résolution d'une EDO par particule
   Calcul des caractéristiques des particules

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{x}_p}{\mathrm{d}t} = a(\tilde{x}_p, t)$$

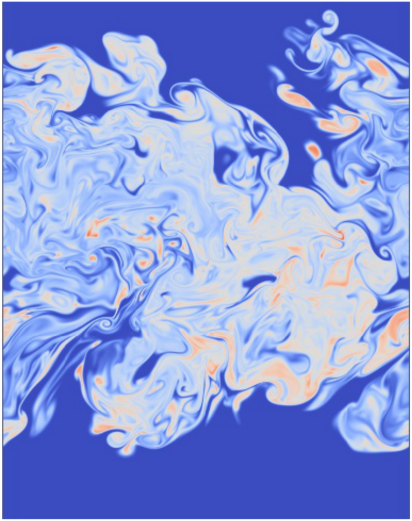
2. Remaillage : opérateur sur les particules
   Interpolation

Points clés pour le calcul intensif

- Mêmes opérations sur chacune des particules
- Condition de stabilité du remaillage ne dépend que du gradient de vitesse.

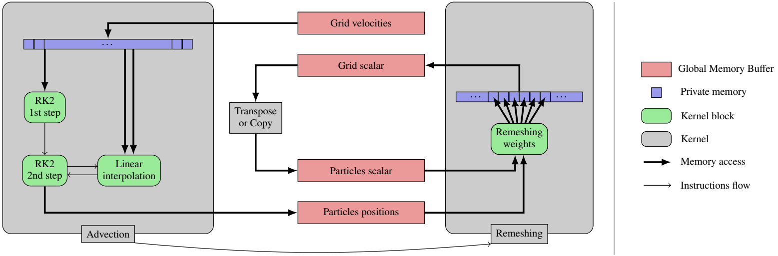
$$dt \leqslant \frac{C}{|\nabla A|_\infty}$$

Application

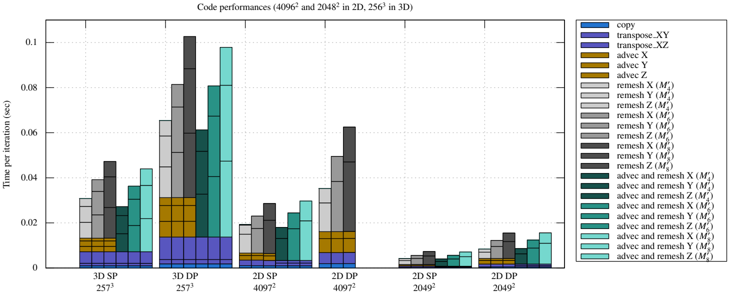


Jet à haut nombre de Schmidt, Lagaert, Balarac (LEGI)

Mise en forme sur GPU



Performances



Bilan

- Elaboration de méthodes de résolution rapide et scalable pour des problèmes spécifiques

Les clés

- Déterminer dans les méthodes numériques les éléments parallèles.
- Déterminer à partir des modèles les verrous du calcul intensif.
- Modifier les modèles numériques pour être plus efficace dans les résolutions.
- Mettre l'accent sur le problème plutôt que sur l'outil de résolution.

Pour aller plus loin

- Comment mesurer les performances ?
- Influence des autres éléments de la simulation :langage, réseau, ...

19 Avril 2013 - Accélérateurs - collaboration BULL