Méthodes et applications en mécanique des fluides numérique autour du code Notus

S. Glockner, A. Lemoine, M. Coquerelle, J. Jansen,
équipe SIMFI du TREFLE/I2M

Journée Simulation Numérique et ses Applications MIRES/MARGAUX

25 septembre 2024

- Enjeux, stratégie, équipe, impact
- Modèles, méthodes numériques, V&V, environnement
- Quelques exemples de travaux numériques
- Quelques exemples de simulations (massivement parallèles)

- **Résoudre** des problèmes de mécanique des fluides et transferts par le biais de la simulation *et du calcul intensif*
- **Proposer** un outil d'expérimentation numérique qui suit l'évolution des supercalculateurs (vers le calcul exaflopique), "*double numérique*" d'expériences ou de procédés
- **Travailler** ensemble devant la multidisciplinarité croissante de la recherche (mécaniciens, thermiciens, physiciens, chimistes, expérimentateurs, numériciens), dans un contexte académique, industriel, de formation
- **Fédérer** des communautés scientifiques différentes
- **Capitaliser** des savoir-faire dans des **codes ouverts**, validés, facile de déploiement et d'utilisation, documentés
- **Coupler** certains outils dédiés et développés dans des communautés différentes
- **Masquer** les complexités du calcul parallèle, du numérique et l'hétérogénéité des machines

Projet initié *from scratch* en 2015 (libre et open-source, licence CeCILL)

- Bénéficie de l'expérience acquise avec les projets Aquilon/Thétis
- Modélisation et simulation d'**écoulements (in)compressibles**, turbulents, diphasiques, anisothermes, subsoniques, transferts de masse, etc.
- Maillage cartésien, géométries complexes (frontières immergées), volume finis
- **Masquer la complexité des développements parallèles**, jusqu'à 131 072 processeurs
- **Portage** du code sur les supercalculateurs GENCI et au mésocentre MCIA
- **Un cadre éprouvé de vérification et validation, de non-régression des fonctionnalités et des performances**
- <https://notus-cfd.org>, <https://doc.notus-cfd.org>, <https://git.notus-cfd.org>

Développement logiciel sur le moyen / long terme

- **Toujours en développement (version 0.6.0)**
- Tenir compte du rythme de la recherche et des projets académiques
- Recherche en numérique / mécanique

Ce que n'est pas Notus

- Un concurrent de...
- Un code *clac bouton* !

Numériciens / mécaniciens / thermiciens / chimistes de l'équipe TREFLE/SIMFI

- 4/5 EC : recherche sur les méthodes numériques, le développement, le maintien, l'expertise numérique
- 4/5 C-EC : recherche et portage de projets en lien avec une application physique
- 10^{aine} de post-doc et 1/2 douzaine de thèses depuis 2015, 20^{aine} de stagiaires
- Atouts de l'équipe : pluridisciplinarité, travail d'équipe, synergies de projets

Passage à l'open source en 2015

- Transparence, confiance, efficacité dans les développements collaboratifs, cadre juridique clair
- 3 MCF recrutés en lien avec le projet
- Une certaine reconnaissance dans les évaluations de projets académiques, HCERES, plateforme I2M
- Recherche ouverte : reproductibilité des résultats, mise à disposition des résultats et des avancées

Impact

- Dénominateur commun, à des degrés différents, de l'équipe SIMFI
- Ouverture vers d'autres GT du TREFLE (MP, ICT, E3BUS)
- Projets académiques IdEX, RRI BEST4, ANR, RNA, et projets "industriels" (ROXEL, SAFRAN, CEA)

Revue scientifique

- 8 articles dans *Journal of Computational Physics*, 10^{aine} dans *Chemical engineering Journal*, *Chemical engineering Science*, *Computational Material Science*, *Water Waves*, *International Journal of Multiphase Flow*

- Enjeux, stratégie, équipe, impact
- Modèles et méthodes numériques, V&V, environnement
- Quelques exemples de travaux numériques
- Quelques exemples de simulations (massivement parallèles)

Domaine

- 2D/3D cartésien
- Sous-domaines immergés
 - Objets de forme analytique (1/2 espace, sphère, rectangle, cylindre, tore)
 - Maillages surfaciques (format *obj*)
 - Transformations (translation, rotation, dilatation)
 - Opérations booléennes (union, intersection, différence, complément)
 - Représentation volumique des objets et intersection avec le maillage

Ecoulements incompressibles et compressibles $Mach < 1$

- Navier-Stokes
- Equation de l'énergie
- Scalaires passifs
- Turbulence : LES (échelle mixtes, WALE), RANS $k-\omega$ SST

Ecoulements diphasiques immiscibles

- Modèle 1-fluide (par opposition aux modèles *sharp*)
- Formulation (non-)conservative des équations de Navier-Stokes
- Volume-of-Fluid, Moment-of-Fluid, Level-Set
- Tensions de surface (modèle *Continuum Surface Force*)
- Changement de phase liquide/solide franc

Equations d'état

- Gaz parfaits
- Peng-Robinson
- Bibliothèque de propriétés thermophysiques NIST

Discretisation

- **Grilles décalées en vitesse / pression**, partitionnement automatique
- **Schémas implicites** : volumes finis ordre 2 (advection et diffusion), Euler ou BDF2
- **Schémas explicites** : TVD LW Superbee, WENO3/5, RK2/3
- **Géométries complexes** : méthode des frontières immergées (1^{er} & 2^{eme} ordre)

Navier-Stokes

- **Couplage vitesse / pression** : méthode de correction de pression/time splitting (Chorin, Goda, Timmermans)
- **Momentum preserving method** (écoulements diphasiques)
- **Courbure** : méthode des fonctions hauteurs ou méthode du *Closest-Point*

Interfaces fluide/fluide : représentation et advection

- **Volume-of-Fluid PLIC** (reconstruction linéaire de l'interface - advection 1D /splitting directionnel)
- **Moment-of-Fluid** (fraction volumique + centroid - advection 2D/3D)
- **Level-set / WENO**

Résolution des systèmes linéaires

- **Solveurs itératifs** : bibliothèque HYPRE (LLNL) : BiCGStab, GMRES, préconditionnements **multigrilles** géométriques et algébriques
- **Solveur direct** : bibliothèque MUMPS

Pourquoi faire du calcul parallèle ?

- Accélérer les temps de calcul et augmenter la dimension des maillages
- Vers l'expérimentation numérique de phénomènes physiques ou de procédés

Comment faire ?

- Partitionnement du domaine pour répartir l'effort de calcul sur plusieurs processeurs
- EDP $\rightarrow$ dépendance spatiale de la solution $\rightarrow$ mémoire des noeuds non-partagée $\rightarrow$ Echanges explicites des données entre les processeurs (bibliothèque MPI)

Les limites...

- A maillage constant, plus le nombre de processeurs est grand, plus les échanges de données sont nombreux
- Communications MPI sont "lentes" par rapport aux opérations de calcul $\rightarrow$ goulot d'étranglement
- Perte d'efficacité inéluctable de tout algorithme parallèle $\rightarrow$ utilisation parsimonieuse des ressources de calcul

Calculer vite n'est pas tout...

- Comment écrire des To de données sur disque par des dizaines de milliers de processeurs : bibliothèques dédiées ADIOS, ASIOS, HDF5, (jusqu'à 50GBs^{-1})
- Comment visualiser les données : en parallèle CPU/GPU avec VisIt ou Paraview

Grand challenge GENCI

- Joliot Curie, processeurs AMD Rome Epic2
- 1 noeuds = bi-socket = 128 cœurs
- 293 376 cores, réseau d'interconnexion Infiniband HDR100, 12.2 petaflops
- En 2022, limite d'efficacité de l'implémentation de la bibliothèque MPI à environ 16 384 cœurs
- Mise en place d'une programmation hybride MPI / OpenMP → **amélioration de la scalabilité faible et forte**
- Test de scalabilité forte : maillage de 1 milliard de cellules

n_process_mpi*n_threads	1 thread		2 threads		4 threads	
	Temps	Efficacité	Temps	Efficacité	Temps	Efficacité
1024	102,15	1,00	99,42	1,00	99,98	1,00
2048	50,93	1,00	49,40	1,01	48,61	1,03
4096	23,79	1,07	23,65	1,05	23,39	1,07
8192	12,12	1,05	11,68	1,06	11,89	1,05
16384	8,45	0,76	6,79	0,92	7,30	0,86
32768	8,85	0,36	5,23	0,59	4,42	0,71

- Test de scalabilité faible : 60 000 cellules par processeur

Nb of Cores	Mesh size	1 thread / process MPI		2 threads / process MPI		4 threads / process MPI	
		Notus (s)	Hypre (s)	Notus (s)	Hypre (s)	Notus (s)	Hypre (s)
128	8,2E+06	6,1	3,6	5,6	3,3	6,1	3,4
512	3,3E+07	6,1	4,0	6,1	5,8	6,5	4,5
2048	1,3E+08	6,6	4,7	6,4	4,3	6,6	4,2
8192	5,2E+08	7,2	5,6	6,9	5,1	7,3	5,1
32768	2,1E+09	8,7	9,1	8,4	7,1	8,5	6,6
131072	8,4E+09	41,6	34,1	14,5	13,0	14,1	10,5

- Et ensuite... **portage sur GPU** pour atteindre l'échelle (pré-)exaflopique

Vérification

Principalement un processus mathématique et numérique, parfois découplé d'un problème physique.

Analyser la solution numérique, quantifier et réduire les erreurs, calculer des ordres de convergence spatio-temporels.

→ **Prouve que le modèle continu est résolu précisément par l'approche discrète**

Validation

Analyse la capacité du modèle numérique à représenter un phénomène physique.

Comparer la solution numérique à l'expérience, identifier et quantifier les erreurs et incertitudes.

Cas tests de verification

- Laplacian, advection
- Navier-Stokes (Poiseuille, Couette, injection isentropique, propagation d'une onde acoustique linéaire, tension de surface)
- Cas tests manufacturés

Cas tests de validation

- Écoulements laminaires (cavité entraînée, écoulement autour d'une marche, cylindre, ...)
- Écoulements de convection naturelle, convection mixte
- Écoulements compressibles (onde thermoacoustique, convection naturelle)
- Écoulements multiphasiques (bulle, onde solitaire, ...)

Tests de nombreuses configurations

- Rotations du domaine, sens des écoulements, schémas, solveurs
- → **plus de 1000 cas tests assurent la non-regression du code**

Script Notus en Python de V&V

Non-régression

- **liste de cas tests** et une **base de données de valeurs de référence**
- Le processus de validation fonctionne en parallèle sur supercalculateurs (+ 1000 cas en //)
- Resultats dans un fichier texte : OK, NO, FAIL, différences avec les valeurs attendues

Etude de convergence spatiale ou temporelle d'un cas test

- En interactif ou par soumission (Slurm)
- Collecte les résultats sur les quantités choisies, calcul automatique des ordres de convergence et valeurs extrapolées
- **Les résultats de convergence sont inclus dans le processus de non régression**

Vérification des performances

- Efficacités forte et faible, sur plusieurs (super)calculateurs
- Mesurer l'efficacité, comparer les machines pour optimiser leur utilisation
- **Assure la non-regression des performances (base de données de l'efficacité du code)**

Environnement de développement

- **Fortran 2008**, MPI/OpenMP : GNU+OpenMPI ; Intel+IntelMPI
- Gestionnaire de source : **Git** <https://git.notus-cfd.org>
- Compilation : **CMake**
- Documentation : **Doxygen** <https://doc.notus-cfd.org>
- **Scripts de déploiement** des bibliothèques tierces et de compilation

Concept

- Fichier texte `.nts` files (unicode)
- Mots-clés explicites, grammaire précise
- *Parser* efficace qui supporte :
 - déclaration de variables
 - formules
 - 'include'
 - tests logiques, boucles, etc.
- **Documentation associée** → répertoire `test_cases/doc`

Structure des fichiers `.nts`

- Base de données des propriétés thermophysiques de fluides: fichier `std/physical_properties.nts`
- Un fichier `.nts` par cas test, structuré par bloc:
 - `include` and variable declarations
 - `system{}`
 - `domain{}`
 - `mesh{}`
 - `modeling{}`
 - `numerical_methods{}`
 - `post_processing{}`

Interface avec l'utilisateur : exemple de fichier .nts

```
include std "physical_properties.nts";
system { measure_cpu_time; }
domain {
  spatial_dimension 2;
  corner_1_coordinates (0.0, 0.0);
  corner_2_coordinates (1.0, 2.0);
}
grid {
  grid_type regular;
  number_of_cells (32, 32);
}
modeling {
  fluids { fluid "water"; }
  equations {
    energy {
      boundary_condition {
        left dirichlet 0.0;
        right dirichlet 1.0;
        top neumann 0.0;
        bottom neumann 0.0;
      }
      source_term { constant -2.0; }
      disable_advection_term;
      disable_temporal_term;
    }
  }
}
numerical_parameters {
  time_iterations 1;
  energy {
    solver mumpsmetis;
  }
}
post_processing {
  output_library adios;
  output_frequency 1;
  output_fields temperature, energy_source_term;
}
```

- Enjeux, stratégie, équipe, impact
- Modèles et méthodes numériques, V&V, environnement
- Quelques exemples de travaux numériques
- Quelques exemples de simulations (massivement parallèles)

Méthode de forçage direct de Mittal (2008)

- **Extrapoler la solution sur des noeuds fantômes grâce à une relation linéaire/quadratique entre les noeuds fantômes et les points images tenant compte de la condition limite ; interpolation de la solution sur les points images, Lagrange $p=2$ ou $p=3$ (4 ou 9 points in 2D)**

→ **Stencils non compacts** (perte de précision, les matrices ne sont plus à bandes, solveurs moins efficaces)

Cellules carrées

Dirichlet : taille du stencil = 2, ordre 2

Neumann : taille du stencil = 2, ordre 1 → taille du stencil = 3 (ordre 2)

- **Améliorations - réduction de la taille du stencil grâce à différentes méthodes de décalage des points fantômes/images**

Stencil 1 : ordre 2 pour Dirichlet et ordre 1 pour Neumann

Stencil 2 : ordre 2 pour Neumann

Conclusion : précision et régularité de la convergence améliorées, temps CPU réduits

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*, 2018.

A. Jost, S. Glockner, Direct forcing immersed boundary methods: Improvements to the Ghost Node Method, *Journal of Computational Physics*, 2021.

Partitionnement et géométries complexes

Partitionnement d'un maillage cartésien

- Equilibre des charges ET minimisation des communications MPI entre processeurs
- *Trivial* (topologie cartésienne de processeurs)
- Notus est efficace jusqu'à plus de 100 000 processeurs (MPI/OpenMP)

Partitionnement et géométries complexes ?

- **Le nombre de cellules inactives peut devenir grand** : partitions inactives
- → **Temps de calcul pénalisés** (ex. système artériel : 97% de cellules inactives)
- **Solution de Anupindi 2013** : partitionnement initial, suppression des partitions inactives
- **Amélioration proposée**: contracter les lignes de partitions (glissement des partitions)

Exemple d'un système artériel

- **Grille initiale de 53 milliards de cellules** - 3% de cellules actives - 8192 partitions
- **Sans glissement** 5.5 milliards de cellules - 30% de cellules actives - 856 partitions
- **Avec glissement** 4.4 milliards de cellules - 40% de cellules actives - 686 partitions

Reconstruction d'interfaces fluide/fluide : méthode Moment-of-Fluid

Volume-of-Fluid - Reconstruction linéaire de l'interface (VOF-PLIC)

- Fraction volumique + **normale** à l'interface → reconstruction linéaire
- **Stencil à 9 points** (2D) pour le calcul de la normale

Moment-of-Fluid

- Fraction volumique + **centroïde** du volume de fluide dans la maille → reconstruction linéaire :
 - conservation de la fraction volumique
 - minimisation de la distance entre le centroïde de référence et celui du polygone reconstruit
- → **Stencil d'un point**, reconstruction plus précise, d'ordre 2 en espace

Améliorations en 2D/3D de la méthode sur grilles cartésiennes

- 2D: courbes analytiques des lieux des centroïdes (pour une fraction volumique donnée)
- Extension réalisée aussi en 3D
- Plus robuste et jusqu'à 100x plus rapide

A. Lemoine, S. Glockner, J. Breil, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 2D Cartesian Grids, *Journal of Computational Physics*, 2017.

T. Milcent, A. Lemoine, Moment-of-Fluid Analytic Reconstruction on 3D Rectangular Hexahedrons, *Journal of Computational Physics*, 2020.

Source: Dyadechko & Shashkov, 2006

Level-set et méthode du *closest point*

Contexte

- Calcul précis de la **courbure** ET du transport de l'interface est toujours **délicat**
- **Continuum Surface Force [Brackbill]** $\sigma \kappa \nabla C$; $\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right)$ sur des noeuds où κ n'est pas définie ?
- Le calcul de la courbure est basé sur des dérivées secondes de la surface/interface → **transport de l'interface d'ordre élevé**
- WENO5 / Level-Set
- Calcul de κ dans le domaine : κ du point de l'interface Γ le plus proche [Hermann, 2008]
- → **Extension de la courbure dans la direction normale à l'interface** $\kappa(\mathbf{x}) = \kappa(CP(\mathbf{x}))$

Contribution

- Level-set $\neq$ fonction distance
- Amélioration de l'algorithme de descente par gradient pour trouver le point le plus proche qui assure la **colinéarité avec la normale à l'interface**
- **Cas test de l'advection** d'un disque : convergence au 4ème ordre
- **Utilisation du CP pour réinitialiser la level-set et détecter les zones où elle est mal définie (kinks)**

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*, 2015.

F. Henri, M. Coquerelle, P. Lubin, Geometrical level set reinitialization using closest point method and kink detection for thin filaments, topology changes and two-phase flows *Journal of Computational Physics*, 2022.

Contexte

- Ecoulements diphasiques avec de forts gradients de masse volumique
- Approche 1-fluide (VOF, MoF, Level-Set)
- **L'inconsistance entre les flux de masse volumique et de quantité de mouvement peut conduire à des instabilités de l'interface**

Solution

- Utiliser la forme conservative de la quantité de mouvement
- Ajouter une étape de prédiction de la masse volumique
- Utiliser les mêmes schémas d'intégration en temps et de discrétisation spatiale pour les deux équations
- → **La discontinuité de la quantité de mouvement est advectée à la même vitesse que la discontinuité de la masse volumique**
- Approche d'ordre élevée (WENO5+RK3) indépendante de la représentation de l'interface (VOF, MoF, Level-Set), **suppression des instabilités**

F. Desmons, M. Coquerelle, A generalized high-order momentum preserving (HOMP) method in the one-fluid model for incompressible two phase flows with high density ratio, *Journal of Computational Physics*, 2021.

- Enjeux, stratégie, équipe, impact
- Modèles et méthodes numériques, V&V, environnement
- Quelques exemples de travaux numériques
- Quelques exemples de simulations (massivement parallèles)

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

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

2005 → 2013

- **2005: 1 processeur, 300 000 points, 3 mois de calcul !**
→ besoin de calcul massivement parallèle
 - **Développement et améliorations successives de la version parallèle du code**
- 2013 → **Simulations de 600 millions de points au TGCC**
8 192 processeurs, 5 jours (projet PRACE)

Identification de nouvelles structures

- Visualisation exploratoire de **fins filaments aérés**
- Structures tourbillonnaires dans la direction de l'écoulement
- Ces filaments s'étirent et connectent le splash-up au rouleau
- **Étude du mécanisme de génération**
- → **Premier pas vers l'expérimentation numérique**

P. Lubin, S. Glockner, Numerical simulations of three-dimensional plunging breaking waves: generation and evolution of aerated vortex filaments, *Journal of Fluid Mechanics*, 2015.

Procédés en microfluidique de génération continue de nanoparticules

avec A. Erriguible (I2M/ICMCB), S. Marre (ICMCB)

Macro-réacteurs vs micro-réacteurs. Le challenge du changement d'échelle.

- Mélange d'éthanol et de CO₂ supercritique dans des puces microfluidiques à haute pression
→ Nucléation et croissance de particules dont on souhaite contrôler la taille
- **Un mélange rapide réduit la taille des particules**
→ **Écoulements turbulents dans des micro-tubes (expériences ICMCB)**
→ **Très bon mélange (en comparaison avec les réacteurs de plus grande taille), taille des particules autour de 20nm**
- **Simulation numérique directe de ces écoulements : résolution de toutes les échelles de la turbulence (Kolmogorov $\approx$ Batchelor)**
- **Production limitée.** Du laboratoire à l'échelle industrielle? Sizing-up où numbering-up?
→ **Changement d'échelle, une approche purement numérique...**

Large reactor (1cm). Injection velocity $3m \cdot s^{-1}$, $R_{inj} = 90 \mu m$,
co-flow velocity $0.001m \cdot s^{-1}$, $Re = 432$
Fully explicit (except pressure), $390 \cdot 10^6$ cells, 3584 processors

Micro reactor (0,3mm). Injection velocity $2.81m \cdot s^{-1}$, $R_{inj} = 50 \mu m$,
co-flow velocity $3.97m \cdot s^{-1}$, $Re = 5505$
Fully explicit (except pressure), $300 \cdot 10^6$ cells, 3584 processors

Changement d'échelle du procédé

- Explicitation du code, version MPI/OpenMP du code → **Amélioration de l'efficacité parallèle**
 - **De micro-tubes à des milli-tubes**
 - $Re=5245$ → **$Re=71000$** , simulation numériques directes du mélange (DNS)
 - GENCI grand challenge (TGCC), 40 millions CPU hours
de 300 millions to 11 milliards de cellules, jusqu'à 131 072 processeurs
- **Mélange toujours rapide**
→ **Production x100**

Concentration volume rendering, Kelvin-Helmholtz instabilities,
fast mixing, co-flow velocity effect, confinement effect

S. Glockner, A.M.D. Jost, A. Erriguible, Advanced petascale simulations of the scaling up of mixing limited flow processes for materials synthesis, *Chemical Engineering Journal*, 2022.

Modélisation et simulation de la construction de revêtements céramiques par un procédé de projection plasma de suspension

avec C. Le Bot (I2M), IRCER, SAFRAN

Etude de la dernière étape du procédé : impact d'un grand nombre de particules sur un substrat

- Vitesse des particules de 100m/s, température de 3000K
- Transfert thermiques et solidification sur un substrat froid (500K)
- Comprendre les phénomènes physiques, l'impact des conditions opératoires sur la structure du revêtement
- Ecoulements diphasiques compressibles avec changement d'état liquide / solide
- HPC → plusieurs milliers de particules

D'autres projets

- Ecoulements compressibles $Mach < 1$
- Transferts de masse aux interfaces (S. Bordère, A. Erriguible)
- Prise en compte de la ligne triple
- Procédé de mélange par résonance acoustique (ANR SINRAM, ROXEL, M. Azaiez)
- Interaction fluide / structures élastiques (T. Milcent)
- Stockage d'énergie en milieux supercritiques (D. Lasseux)
- Stockage d'énergie par changement d'état (C. Le Bot, R. Bouzoudja)
- Portage sur architecture GPU ? OpenACC, nouveaux solveurs CUDA, vers le calcul exaflopique ?
- Ouverture vers d'autres thématiques (intérêt du HPC) : milieux poreux, santé

Un projet de longue haleine

- Notus est un projet d'équipe, interactions de mécaniciens, thermiciens, chimistes, numériciens
- Projet pluridisciplinaire
- Objectifs logiciels, académiques, industriels
- Orienté vers l'expérimentation numérique grâce au HPC
- De la version 0.6.0 à 1.0.0, finaliser des développements, challenge de tout faire fonctionner ensemble !
- Version 1.0.0 en 2026