

Méthodes multi-grilles pour la modélisation d'écoulements turbulents réactifs

Journées des thèses IRSN, 25-27 septembre 2006

Guillaume ANSANAY-ALEX (1^{ère} année de thèse)

Contrat de Thèse IRSN / Région PACA : Octobre 2005 - Octobre 2008
Université : Ecole doctorale Mathématiques et Informatique de Marseille
Université de Provence

Encadrant universitaire : Raphaële HERBIN, CMI/LATP Université de Provence

Responsable IRSN : Didier VOLA, DPAM/SEMIC/LIMSI
Entreprise partenaire : AGEFLUID, correspondant : Gabriel GIOVANNELLI

Introduction

La DPAM est confrontée à des problèmes de modélisation d'écoulements turbulents réactifs pour lesquels les équations régissant la dynamique de l'écoulement (incompressible ou faible nombre de Mach) sont fortement couplées à un ensemble d'équations de bilan du type advection-diffusion-réaction (énergie, composition chimique, densité d'énergie turbulente, ...). La simulation des incendies dans des locaux par le code ISIS relève de cette problématique. Dans le code ISIS, les bilans de masse et de quantité de mouvement sont approximés à l'aide d'une formulation mixte de Galerkin avec des éléments finis non-conformes de bas degré [9] pour la vitesse et résolu à l'aide d'une méthode de projection [2]. L'objectif principal de ma thèse est de participer à l'optimisation numérique du code ISIS en étendant les algorithmes multi-grilles à la stratégie de résolution non standard de ce code. Cela m'a naturellement conduit à m'intéresser pendant cette première année à la résolution de la dynamique de l'écoulement qui, pour les simulations concrètes réalisées par ISIS, est la plus coûteuse en temps de calcul. Plus précisément, mon objectif pour cette année est de développer des solveurs linéaires multi-grilles parallèles pour les étapes de prédiction de vitesse et de correction de pression de la méthode de projection. Ainsi mon travail s'est organisé, jusqu'à ce jour, autour des deux points suivants :

- Dans un premier temps, analyser un cas-test qui soit à la fois dimensionnant pour les cas concrets d'ISIS et consacré à la seule résolution d'une dynamique d'écoulement incompressible par une méthode de projection. Cela a permis de mettre en évidence l'influence du choix des schémas numériques de stabilisation des termes de transport quand l'écoulement devient sensiblement advectif. Ces schémas font actuellement l'objet d'une action de recherche au LIMSI [5] et leur choix conditionne le développement des solveurs linéaires multi-grilles.
- Implémenter des solveurs multi-grilles pour des approximations par éléments finis non conformes. Si les méthodes multi-grilles ont fait l'objet d'une littérature abondante dans le cadre des approximations conformes, leur extension aux approximations non conformes est bien plus récente. Suivant une démarche naturelle, je me suis attaché dans un premier temps à retrouver les caractéristiques multi-grilles trouvées dans la littérature en approximation conforme. Leur implémentation est validée sur un cas-test classique, le problème de Poisson, qui est un problème modèle pour l'étape de correction de pression de la méthode de projection.

Ces derniers développements sont effectués dans le code ISIS et dans la plate-forme PELICANS développée au LIMSI [8] qui est la base de certains codes de simulation de l'IRSN.

1 Simulation d'un écoulement instationnaire dans un tube coudé

Pour cette première étape, je me suis basé sur un cas-test d'écoulement incompressible représentatif, pour ce qui concerne la partie dynamique de l'écoulement, des cas concrets traités par le code ISIS. Ce cas représente une modélisation simplifiée d'un écoulement sanguin dans une crosse aortique lors d'une impulsion de pression (Fig. 1). Il fait par ailleurs l'objet d'une action de "benchmarking" entre des codes de simulation internes à l'IRSN et le logiciel commercial FLUENT pour l'IRPHE (Marseille [3]). Une première comparaison [6] en terme de précision a été réalisée entre FLUENT et un applicatif basé sur la plate-forme PELICANS (discrétisation conforme - approximation quadratique sur des tétraèdres pour la vitesse). La simulation présente viendra compléter ce travail, qui devrait alors être valorisé par une publication. Cet écoulement fortement tri-dimensionnel se caractérise par des couches limites très fines et des phénomènes de recirculation et pour en reproduire les caractéristiques principales (couches limites à la paroi), un maillage typique compte jusqu'à quelques millions de degrés de liberté. Le transitoire se compose de 600 pas de temps de $2,5 \cdot 10^{-3}$ seconde. La plate-forme PELICANS a fait l'objet d'efforts importants de développement pour être parallélisée et j'ai participé à sa phase de test ; ainsi ce calcul passe en 5 heures sur 14 processeurs du cluster de calcul Cosinux de la DPAM.

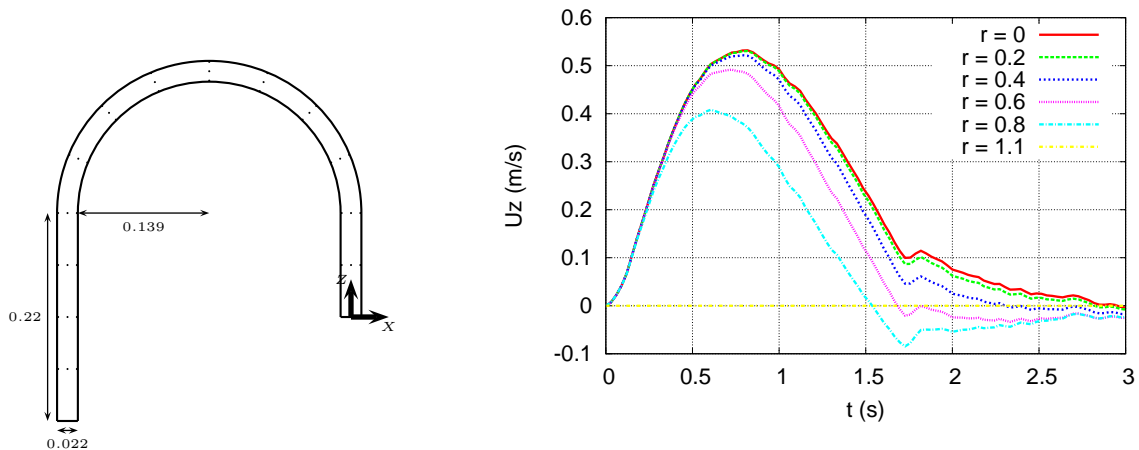


Fig. 1 – Géométrie du tube 3D et profil transitoire d'entrée (vitesse axiale en fonction du rayon)

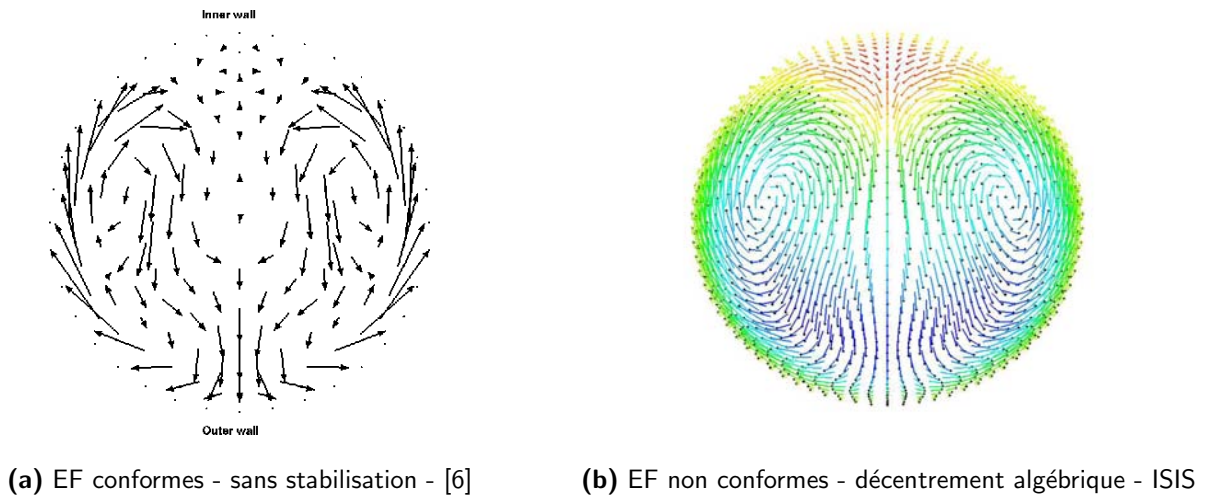


Fig. 2 – Coupes des vecteurs vitesses dans la section haute du tube

Les formulations discrètes du système d'équations de Navier-Stokes par la méthode de Galerkin peuvent présenter des pertes de stabilité lorsque l'écoulement devient sensiblement advectif. La simulation PELICANS (Fig. 2a - approximation conforme) a été effectuée sans stabilisation des termes advectifs. Les approximations non conformes accroissent la sensibilité du schéma à ce type d'instabilités et une action de recherche est actuellement menée au sein du LIMSIS pour développer des schémas à la fois stables et suffisamment précis. Ainsi, la simulation ISIS (Fig. 2b) a été menée en utilisant une stabilisation de l'opérateur d'advection par ajout d'un opérateur de diffusion (décentrement algébrique) proposée par Kuzmin et al. [11]. Cette technique permet de construire un schéma d'approximation à la fois stable et monotone mais au prix d'une diffusion numérique excessive comme le montrent les recirculations lissées sur la coupe de la Fig. 2b. Or cette propriété additionnelle de monotonie n'a pas, pour la dynamique de l'écoulement, le caractère crucial qu'elle a pour le transport de quantités scalaires.

Deux approches sont ainsi à l'étude au sein du laboratoire : d'une part l'approximation des termes advectifs par une forme stable construite sur un maillage dual [5], d'autre part la stabilisation de la formulation Galerkin par des méthodes variationnelles multi-échelles comme la pénalisation des sauts aux interfaces [4], dans la continuité de mon travail de stage de Master [1]. Ces techniques ont été testées sur des cas modèles et je suis en train de le faire pour le problème considéré ici.

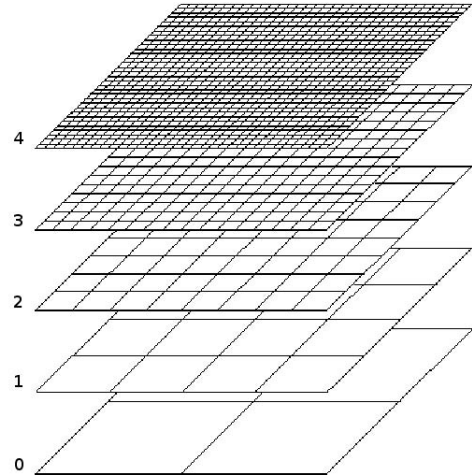
2 Approximation multi-grilles/éléments finis

Les méthodes multi-grilles sont au cœur des solveurs d'algèbre linéaire les plus performants. Elles permettent en effet de construire des solveurs qui, pour des problèmes elliptiques, ne nécessitent qu'un nombre d'opérations proportionnel à la dimension du système.

Comme leur nom l'indique, la particularité des méthodes multi-grilles est de considérer un problème non pas sur un seul maillage, mais sur différents maillages successivement raffinés (figure ci-contre), dans le but de fournir une méthode performante pour approcher le résultat à l'échelle la plus fine.

Le principe général de ces méthodes est, partant de la grille la plus fine :

- par des étapes de lissage de l'erreur, déterminer successivement sur les grilles de plus en plus grossières des résidus d'approximation de la solution,
- en déduire la correction sur la solution associée à la grille la plus grossière par une résolution complète,
- appliquer cette correction sur les grilles de plus en plus fines, en faisant suivre chaque correction de la solution par des étapes de lissage.



En résumé, les algorithmes multi-grilles font intervenir trois ingrédients principaux :

- des solveurs basiques, peu performants (Gauss-Seidel, Jacobi, ...), mais qui sont de bons lisseurs, utilisés à toutes les échelles sauf la plus fine,
- une méthode de résolution complète utilisée uniquement sur l'échelle la plus grossière,
- des opérateurs de prolongation et de restriction permettant de transférer les champs inconnus respectivement d'une grille grossière à une grille plus fine et d'une grille fine à une grille plus grossière.

L'utilisation combinée de la résolution complète sur la grille la plus grossière et des relaxations successives sur les grilles raffinées permet, respectivement, de supprimer les composantes de basse fréquence de l'erreur et, à chaque niveau plus fin, les composantes de fréquence plus élevée associées.

Ces ingrédients de base permettent de construire différentes stratégies multi-grilles qui seront détaillées plus loin.

2.1 Grilles et opérateurs de transfert entre grilles

Un algorithme multi-grilles se construit sur la base de maillages successivement raffinés et des espaces d'approximation V_k correspondants. Un point crucial de la définition d'un algorithme multi-grilles est la définition des opérateurs de transfert (prolongation et restriction) entre niveaux de grille, soit entre les espaces V_k et V_{k-1} .

- Pour les éléments finis conformes, on a choisi d'utiliser la technique classique des bases hiérarchiques [12]. La base hiérarchique se construit selon le processus récursif suivant :
 1. ajout de toutes les fonctions de bases nodales (fonctions de base éléments finis classiques) du maillage le plus grossier,
 2. puis, en raffinant successivement le maillage et en ajoutant la fonction de base nodale correspondante à tous les noeuds créés par le raffinement courant.

L'opérateur de prolongation qui permet de passer entre un niveau V_{k-1} et le niveau raffiné suivant V_k se construit directement en utilisant les fonctions de bases hiérarchiques et l'opérateur de restriction correspondant comme sa transposée.

- Pour les éléments finis non conformes de Rannacher-Turek [9], il se pose un problème lors de la définition des opérateurs de transfert entre grilles : le champ est continu aux nouveaux degrés de liberté se trouvant à l'intérieur de la maille raffinée (croix vertes), mais discontinu aux autres degrés de liberté (grandes croix rouges). Pour ces derniers, la valeur est différente selon la maille grossière dans laquelle on la calcule. Dans ce cas-là, on utilise la moyenne entre les valeurs des deux mailles concernées [7, 10].

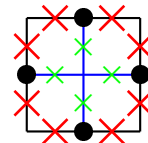
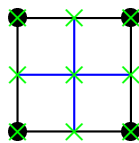


Fig. 3 – Motif de raffinement Q_1 (conforme)

Fig. 4 – Motif de raffinement \tilde{Q}_1 (non conforme)

Les algorithmes implémentant les opérateurs de transfert propres aux approximations non conformes sont en cours de développement dans la plate-forme PELICANS, en parallèle. On s'est attaché dans un premier temps à retrouver les caractéristiques multi-grilles trouvées dans la littérature pour une approximation conforme. On présente donc ici

la méthode associée à une discrétisation en éléments $Q1$ conformes.

Par la suite on schématisera les ingrédients des méthodes multi-grilles par :

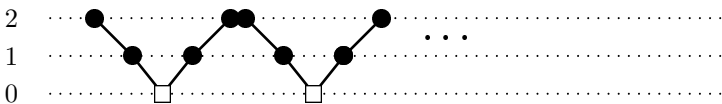
- Correction sur grille grossière
- Pre/Post-lissage

et les barres obliques descendantes et montantes représenteront respectivement la restriction et la prolongation.

2.2 Résolution par itérations de V-cycles

Le V-cycle est la brique de base permettant, avec l'opérateur de prolongation, de construire les différentes stratégies multi-grilles (suite de V-cycles, W-cycles, FMG).

Processus :



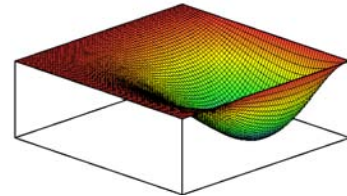
Les différentes stratégies multi-grilles présentées par la suite sont validées sur un cas-test classique :

Domaine d'étude : $\Omega = [0, 1]^2$

$$-\Delta u = 2[(1 - 6x^2)y^2(1 - y^2) + (1 - 6y^2)x^2(1 - x^2)]$$

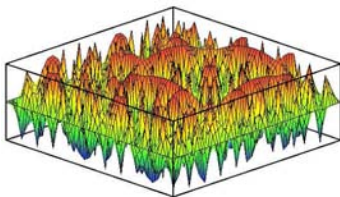
Conditions aux limites du type Dirichlet homogène

Solution exacte : $u(x, y) = (x^2 - x^4)(y^4 - y^2)$



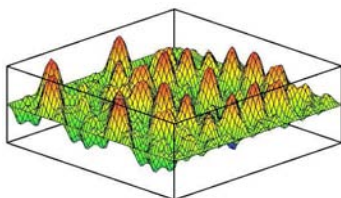
En choisissant une condition initiale présentant une erreur par rapport à la solution attendue occupant tout le spectre, et en traçant l'approximation obtenue après chaque étape de l'algorithme, on fait apparaître les propriétés spectrales des méthodes multi-grilles : les itérations de relaxation diminuent les composantes de haute fréquence de l'erreur mais rajoutent de l'erreur à basse fréquence, tandis que les étapes de correction sur grille grossière ont l'effet inverse.

Condition initiale :

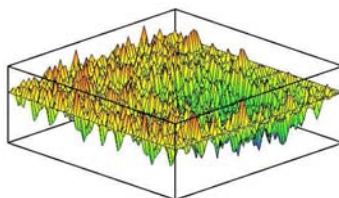


Cycle 1 :

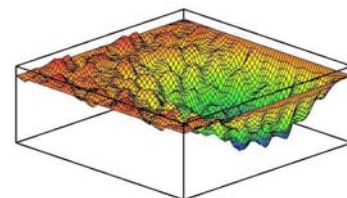
Après pré-lissage



Après correction

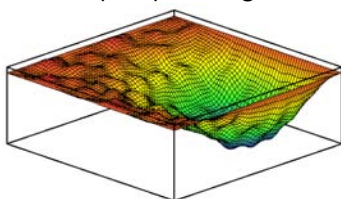


Après post-lissage

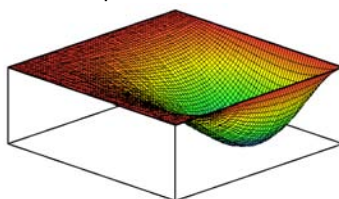


Cycle 2 :

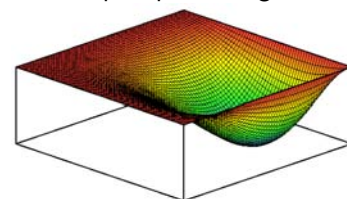
Après pré-lissage



Après correction



Après post-lissage



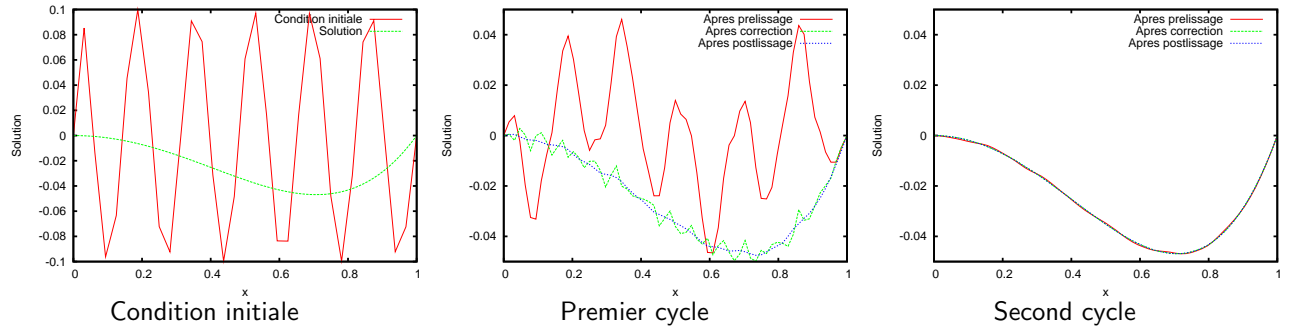


Fig. 5 – Coupes de la solution exacte et de la solution approchée en cours de cycle

En répétant le calcul pour 4 niveaux de grilles grossières : $N = 8, 16, 32, 64$, on vérifie une propriété des algorithmes multi-grilles : le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre une valeur d'erreur donnée ne dépend pas du pas de maillage (Fig. 6). On s'intéresse ensuite Fig. 7 au gain en temps de calcul que permet d'obtenir un solveur linéaire multi-grille par rapport à un solveur linéaire classique sur une grille donnée. Le solveur multi-grilles construit sa hiérarchie de grilles en considérant cette grille donnée comme étant la plus raffinée. On peut observer Fig. 7 que pour seulement 3 ou 4 niveaux de grilles et dès que la grille initiale est suffisamment fine, le solveur multi-grilles permet de diminuer d'un facteur important le temps de calcul.

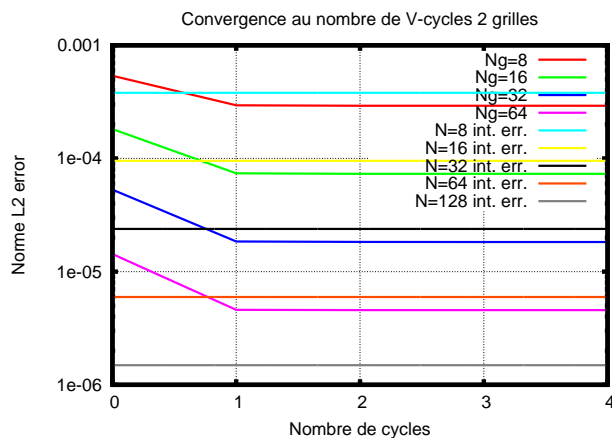


Fig. 6 – Convergence au nombre de V-cycles 2 grilles

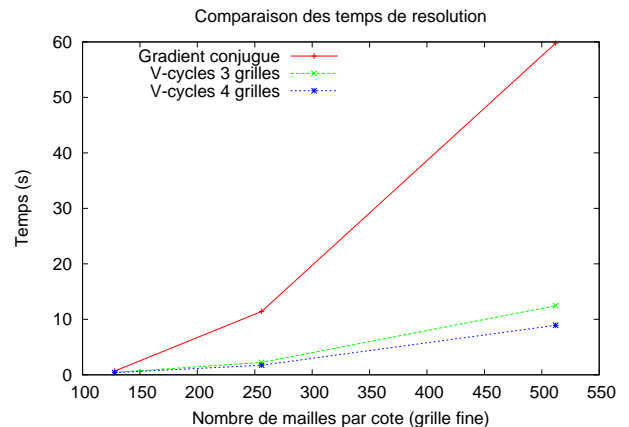
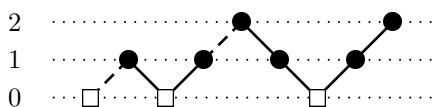


Fig. 7 – Comparaison V-cycles/Gradient conjugué

2.3 Cycles multi-grilles emboîtés : Full Multi-Grid (FMG)

L'idée du processus FMG est d'enchaîner des cycles à des niveaux de grilles de plus en plus fins en partant de la grille la plus grossière, pour fournir à la fin du processus une bonne approximation initiale de la solution avant de passer à des itérations de V- ou W-cycles. Posséder une bonne approximation initiale permet de diminuer le nombre de cycles nécessaires à la résolution et donc le coût de la méthode.

Processus :



On observe Fig. 8 l'erreur en norme L^2 après chaque V-cycle 3 grilles. Le point initial de la courbe rouge correspond à l'erreur de départ, le point initial de la courbe verte est l'erreur après le processus FMG illustré ci-dessus. Le processus

FMG permet d'obtenir pour un coût faible (6 étapes de relaxation et 3 corrections sur grille grossière) une très bonne estimation de la solution qui nécessiterait jusqu'à 4 V-cycles, soit 16 relaxations et 4 corrections sur grille grossière, en partant de l'hypothèse initiale.

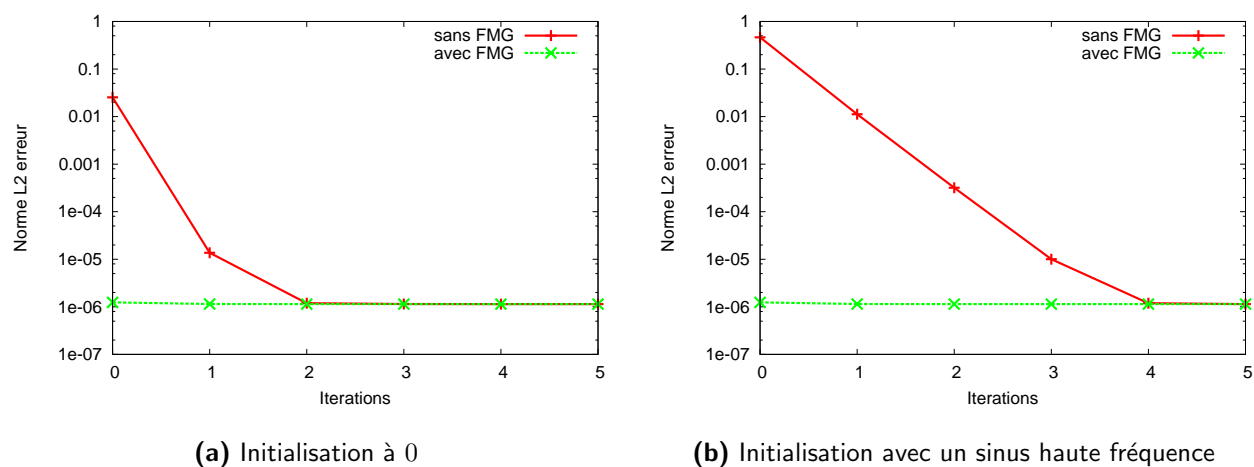


Fig. 8 – Norme de l'erreur pour chaque V-cycle successif et en FMG, pour deux types d'initialisation

3 Conclusion et perspectives

Après une étude bibliographique sur les méthodes multi-grilles, une part importante du travail de cette première année de thèse a été consacrée à la prise en main du code de calcul ISIS et de la plate-forme PELICANS développés dans le laboratoire (parallélisme). Les premiers développements dans la plate-forme PELICANS concernent les méthodes multi-grilles qui n'existaient pas auparavant et ont été réalisés en cohérence avec les développements consacrés au raffinement local. Ces méthodes ont été validées dans un cas d'approximation conforme pour lequel on peut construire une suite d'espaces d'approximation emboîtés, par exemple en utilisant la méthode des bases hiérarchiques.

D'ici la fin de cette première année, les objectifs principaux sont liés au développement de solveurs linéaires multi-grilles pour des approximations non conformes. Sur la base des algorithmes publiés récemment dans la littérature, je proposerai des solveurs dédiés aux choix d'approximation du code ISIS. Ils seront analysés, validés sur des cas-tests appropriés, puis appliqués au traitement des étapes de correction de pression puis de prédiction de vitesse de la méthode de projection. Je continuerai par ailleurs à participer à l'action interne au laboratoire dédiée à la stabilisation de l'advection pour des approximations de Galerkin. Le cas-test de l'écoulement instationnaire dans un tube coudé me servira de cas de référence pour la validation de l'ensemble des développements à venir, et j'en continuerai l'analyse.

La deuxième année sera consacrée à la définition d'algorithmes de marche en temps performants sur la base des méthodes multi-grilles non-linéaires, thème sur lequel je débute actuellement une étude bibliographique.

Références

- [1] G. Ansanay-Alex. Master's thesis, EGIM/U. Provence, 2005.
- [2] F. Babik, T. Gallouet, J.-C. Latché, S. Suard, and D. Vola. In *The International Symposium on Finite Volumes for Complex Applications IV - Problems and Perspectives - Marrakech, July 4-8, 2005*.
- [3] O. Boiron, V. Deplano, and R. Pellissier. *Journal of Fluid Mechanics*, 2004.
- [4] M. Braack and E. Burman. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43(6) :2544–2566, 2006.
- [5] L. Gastaldo et al. In *European Conference on Computational Fluid Dynamics*, 2006.
- [6] H. Labidi. Master's thesis, EGIM/U. Provence, 2005.
- [7] P. Oswald. *Mathematics of Computation*, 67 :667–693, 1998.
- [8] B. Piar. Note Technique SEMAR 03/94, IRSN, oct 2003.
- [9] R. Rannacher and S. Turek. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 8 :97–111, 1992.
- [10] S. Turek. *Efficient Solvers for Incompressible Flow Problems*. Springer, 1999.
- [11] S. Turek and D. Kuzmin. *Journal of Computational Physics*, 175 :525 – 558, 2002.
- [12] H. Yserentant. In R. E. O'Malley, editor, *ICIAM 91*, chapter 17, pages 256–276. SIAM, Philadelphia, 1991.