



Modélisation numérique d'écoulements multiphasiques tri-dimensionnels sur GPU.

Jonathan Jung,
sous la direction de Philippe Helluy.

IRMA, Université de Strasbourg

Exposé de suivi de thèse, Strasbourg, le 5 juin 2012.

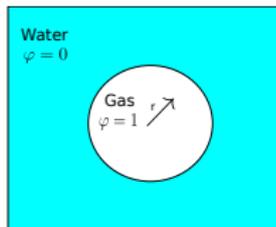
Outline

- 1 Introduction
- 2 Travaux effectués
- 3 Perspectives

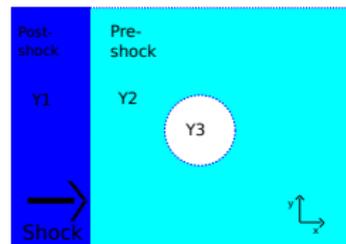
Contexte scientifique

- Membre de l'équipe "Equations aux dérivées partielles et théorie du contrôle" à l'Université de Strasbourg.
- Sujet de thèse : Modélisation numérique d'écoulements multiphasiques tri-dimensionnels sur GPU.
- Objectif : Développer des programmes numériques performants pour simuler des écoulements multiphasiques.
- Exemples d'application :

- Implosion de bulle de cavitation :



- Interaction choc-bulle :



Modèle mathématique

On considère les équations d'Euler pour des fluides compressibles :

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho) + \partial_x(\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) &= 0, \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + p)u) &= 0, \\ \partial_t(\rho\varphi) + \partial_x(\rho\varphi u) &= 0,\end{aligned}$$

où ρ est la densité, u la vitesse, E l'énergie totale, φ la fraction de masse de gaz et p satisfait la loi de pression des gazs raides :

$$p(\rho, e, \varphi) = (\gamma(\varphi) - 1)\rho e - \gamma(\varphi)\pi(\varphi),$$

où

$$e = E - \frac{1}{2}u^2.$$

Notations

- On peut écrire le système sous la forme conservative :

$$\partial_t W + \partial_x F(W) = 0,$$

où le vecteur de variables conservatives est :

$$W = (\rho, \rho u, \rho E, \rho \varphi)^T,$$

et le flux conservatif est :

$$F(W) = (\rho u, \rho u^2 + p, (\rho E + p)u, \rho \varphi u)^T.$$

Hyperbolicité

Propriété

Le système est hyperbolique si $p + \pi(\varphi) \geq 0$, il admet les quatre valeurs propres suivantes :

- $\lambda_1 = u - c$ (vraiment non-linéaire),
- $\lambda_2 = \lambda_3 = u$ (linéairement dégénéré),
- $\lambda_4 = u + c$ (vraiment non-linéaire),

où c est la vitesse du son, définie par

$$c = \sqrt{\gamma \frac{p + \pi}{\rho}}.$$

Problème de Riemann

Le problème de Riemann consiste à trouver une solution au problème

$$\begin{cases} \partial_t W + \partial_x F(W) = 0, \\ W(x, t = 0) = \begin{cases} W_L, & \text{si } x < 0, \\ W_R, & \text{si } x > 0. \end{cases} \end{cases}$$

Théorème

- Le problème de Riemann n'admet pas toujours de solution forte.
- On a l'existence de solutions faibles du problème de Riemann. Pour obtenir l'unicité, la solution doit satisfaire une inégalité physique appelée inégalité d'entropie.

Un rééchantillonnage aléatoire pour un écoulement diphasique

en collaboration avec Philippe Helluy, Hélène Mathis¹, Mathieu Bachmann² et Siegfried Muller³.

Article : Random Sampling Remap For Compressible Two-phases Flows soumis à Computers and Fluids.

-
1. Université de Nantes.
 2. Université d'Aachen.
 3. Université d'Aachen.

- Rappelons l'écriture du système sous la forme conservative :

$$\partial_t W + \partial_x F(W) = 0.$$

- On a

$$\partial_t \varphi + u \partial_x \varphi = 0$$

⇒ théoriquement φ est dans $\{0, 1\}$ à chaque instant.

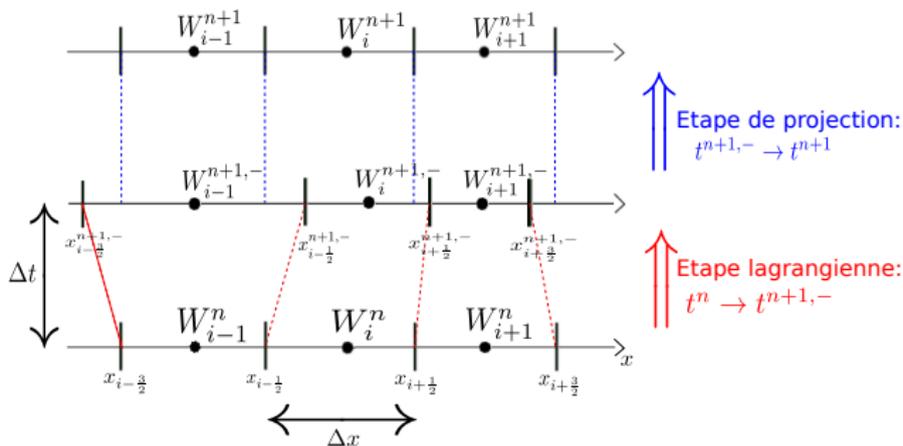
On souhaite construire un programme numérique préservant cette propriété.

- On discrétise l'espace $[a; b]$ par un maillage uniforme, on note $x_{i+1/2}$ la frontière entre la cellule i et la cellule $i + 1$. On cherche une approximation W_i^n de W sur la cellule $[x_{i-1/2}; x_{i+1/2}]$ au temps t^n .

Structure du schéma numérique

Le schéma numérique comporte deux étapes :

- l'étape lagrangienne pour résoudre le système $\partial_t W + \partial_x F(W) = 0$, entre les temps t^n et $t^{n+1,-}$,
- l'étape de projection pour calculer les variables d'Euler au temps t^{n+1} .



Quelques notations

- On propose un schéma de volumes finis à l'ordre 1 avec une approche lagrangienne, les frontières $x_{i+\frac{1}{2}}$ bougent à la vitesse du fluide $u_{i+\frac{1}{2}}^n$ entre t^n and $t^{n+1,-}$:

$$x_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,-} = x_{i+\frac{1}{2}}^n + \Delta t u_{i+\frac{1}{2}}^n.$$

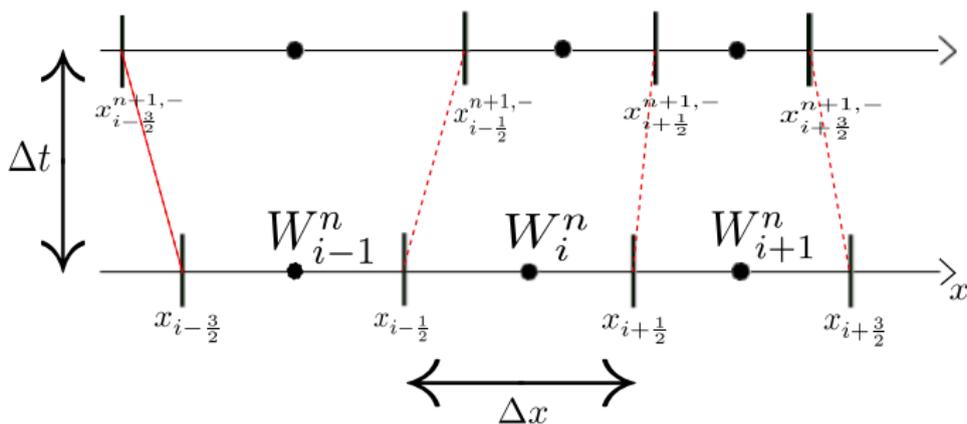
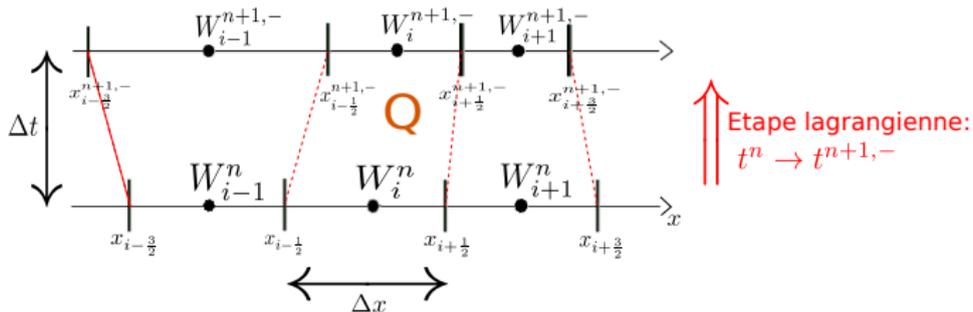


Schéma de volumes finis



L'intégration de $\partial_t W + \partial_x F(W) = 0$ sur le quadrilatère espace-temps Q donne :

$$\Delta x_i^{n+1,-} W_i^{n+1,-} - \Delta x W_i^n + \Delta t (F(W_i^n, W_{i+1}^n) - F(W_{i-1}^n, W_i^n)) = 0$$

où $F(W_L, W_R)$ est le flux lagrangien et Δt vérifie la condition CFL.

Flux lagrangien

On rappelle que le flux lagrangien a la forme :

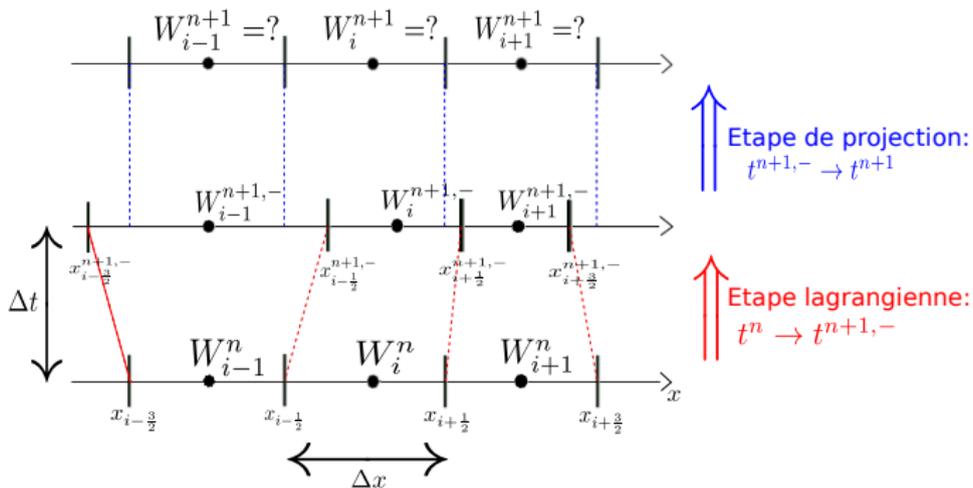
$$\begin{aligned} F(W_i^n, W_{i+1}^n) : &= F(W_{i+\frac{1}{2}}^n) - u_{i+\frac{1}{2}}^n W_{i+\frac{1}{2}}^n, \\ &= (0, p_{i+\frac{1}{2}}^n, u_{i+\frac{1}{2}}^n p_{i+\frac{1}{2}}^n, 0)^T. \end{aligned}$$

Pour calculer les quantités $i + 1/2$, on utilise un solveur de Riemann exacte.

Ceci nécessite la résolution d'une équation non linéaire par une méthode de type Newton à chaque interface.

Etape de projection

- L'étape lagrangienne a été décrite : on peut calculer $W_i^{n+1,-}$.
- Problème : comment effectuer la projection afin d'obtenir les variables sur la grille d'origine ?



Projection classique : la projection conservative

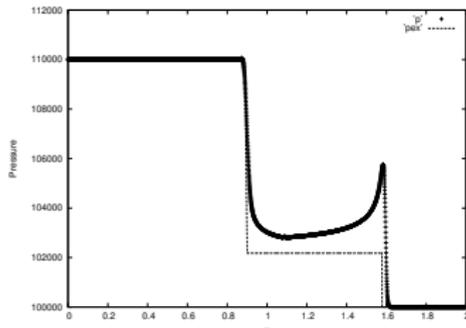
On prend :

$$W_i^{n+1} = W_i^{n+1,-} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\max(u_{i-\frac{1}{2}}, 0)(W_i^{n+1,-} - W_{i-1}^{n+1,-}) + \min(u_{i+\frac{1}{2}}, 0)(W_{i+1}^{n+1,-} - W_i^{n+1,-}) \right).$$

Problème : Si on considère

Quantities	Left	Right
$\rho(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	10	1
$u(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	50	50
$p(\text{Pa})$	1.1e5	1e5
φ	1	0
γ	1.4	1.1
π	0	0

On obtient des oscillations sur la pression :



Projection de Glimm

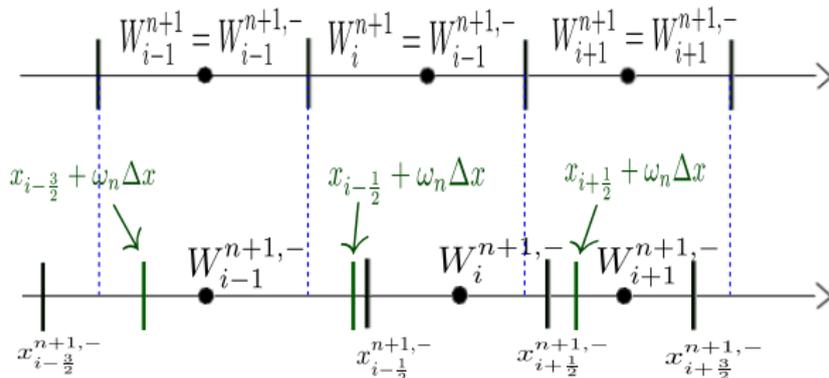
On pioche aléatoirement un point dans la cellule et on associe la valeur lagrangienne en ce point à W_i^{n+1} .

Plus précisément, soit ω_n un nombre aléatoire dans $[0; 1[$, on prend :

$$W_i^{n+1} = \begin{cases} W_{i-1}^{n+1,-}, & \text{if } x_{i-\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x < x_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,-}, \\ W_i^{n+1,-}, & \text{if } x_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,-} \leq x_{i-\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x \leq x_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,-}, \\ W_{i+1}^{n+1,-}, & \text{if } x_{i-\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x > x_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,-}. \end{cases}$$

Projection de Glimm

Illustration : On pioche un nombre aléatoire $\omega_n \in [0; 1[$.



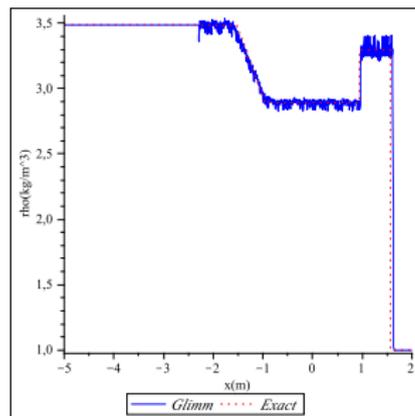
- $x_{i-\frac{3}{2}}^{n+1,-} \leq x_{i-\frac{3}{2}} + \omega_n \Delta x \leq x_{i+\frac{3}{2}}^{n+1,-} \Rightarrow W_{i-1}^{n+1} = W_{i-1}^{n+1,-}$,
- $x_{i-\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x < x_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,-} \Rightarrow W_{i-1}^{n+1} = W_{i-1}^{n+1,-}$,
- $x_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,-} \leq x_{i+\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x \leq x_{i+\frac{3}{2}}^{n+1,-} \Rightarrow W_{i-1}^{n+1} = W_{i-1}^{n+1,-}$.

Problème : le schéma résultant ne converge pas

On considère le problème de Riemann suivant : une onde de choc dans l'air percute le liquide.

Quantities	Left	Right
$\rho(\text{kg.m}^{-3})$	3.488	1
$u(\text{m.s}^{-1})$	1.13	-1
$p(\text{Pa})$	23.33	2
φ	1	0
γ	1.4	2
π	0	7

Le schéma résultant ne converge pas :



Solution : une projection mixte

On applique les projection de Glimm uniquement à l'interface entre les deux fluides

- If $(\varphi_{i-1}^n - \frac{1}{2})(\varphi_i^n - \frac{1}{2}) < 0$ or $(\varphi_i^n - \frac{1}{2})(\varphi_{i+1}^n - \frac{1}{2}) < 0$,

On choisit un nombre aléatoire $\omega_n \in [0, 1[$, et on prend :

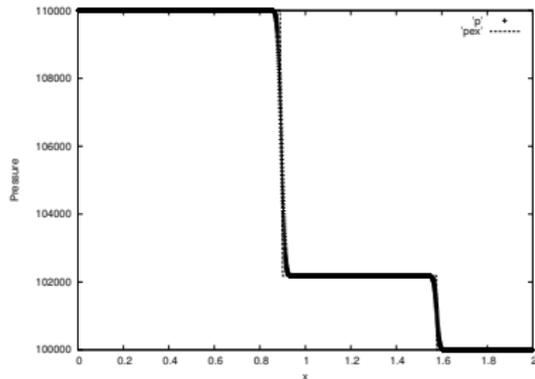
$$W_i^{n+1} = \begin{cases} W_{i-1}^{n+1,-}, & \text{if } x_{i-\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x < x_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,-}, \\ W_i^{n+1,-}, & \text{if } x_{i-\frac{1}{2}}^{n+1,-} \leq x_{i-\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x \leq x_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,-}, \\ W_{i+1}^{n+1,-}, & \text{if } x_{i-\frac{1}{2}} + \omega_n \Delta x > x_{i+\frac{1}{2}}^{n+1,-}, \end{cases}$$

- ailleurs,

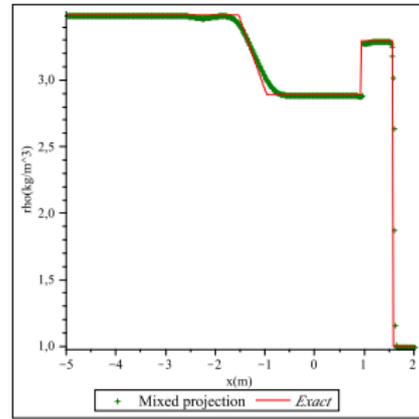
$$W_i^{n+1} = W_i^{n+1,-} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\max(u_{i-\frac{1}{2}}, 0)(W_i^{n+1,-} - W_{i-1}^{n+1,-}) + \min(u_{i+\frac{1}{2}}, 0)(W_{i+1}^{n+1,-} - W_i^{n+1,-}) \right).$$

Résultats obtenus avec la projection mixte

Il n'y a pas d'oscillations sur la pression dans le cas où la projection conservative échouait :

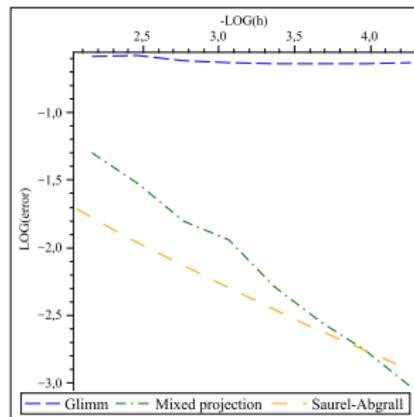


On n'a pas d'oscillations sur la densité dans le cas où la projection de Glimm échouait :



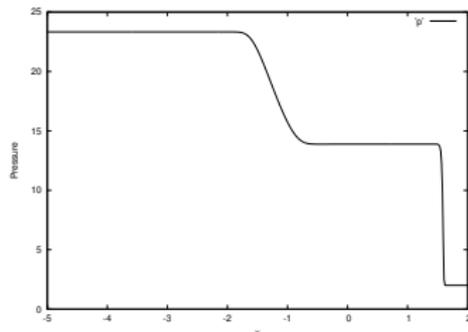
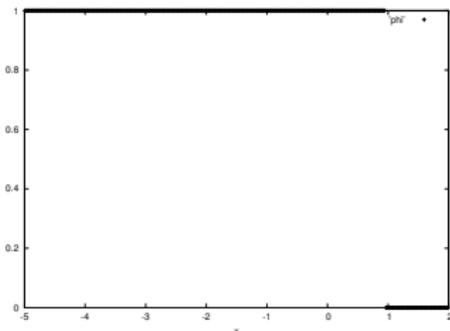
Convergence de la projection mixte

On observe la convergence numérique en norme L^1 .
Le taux de convergence est environ 0.5 pour l'approche d'Abgrall-Saurel et de 0.8 pour la projection mixte.



Propriétés du schéma numérique

- φ n'est pas diffusé : si $\varphi \in \{0, 1\}$, cette propriété est exactement préservée à chaque instant.
- Il n'y a pas d'oscillations sur la pression à l'interface.



Bulle sphérique

On considère les équations d'Euler en dimension 3, on suppose que l'écoulement admet une symétrie sphérique, le système peut alors s'écrire en coordonnées sphériques

$$\partial_t(A\rho) + \partial_r(A\rho u) = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t(A\rho u) + \partial_r(A(\rho u^2 + p)) = pA'(r),$$

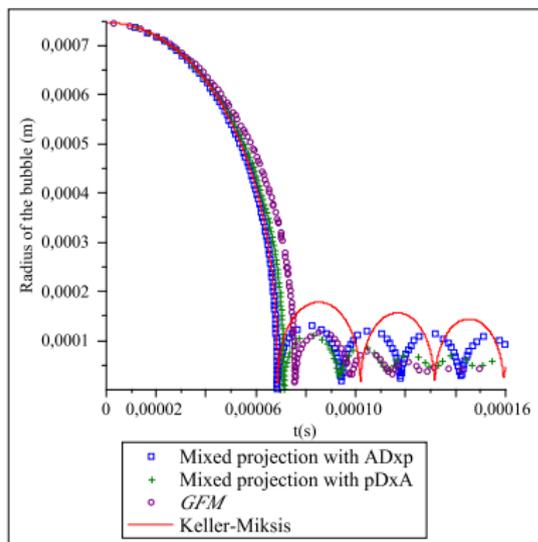
$$\partial_t(A\rho E) + \partial_r(A(\rho E + p)u) = 0,$$

$$\partial_t(A\rho\varphi) + \partial_r(A\rho\varphi u) = 0, \quad (2)$$

où $A(r) = r^2$ apparaît suite à la symétrie.

Résultats numériques

En observant la discontinuité de φ , on peut localiser le bord de la bulle à chaque instant. On peut alors tracer les oscillations de la bulle que l'on compare au modèle d'EDO de Keller-Miksis.



Calcul d'oscillations de bulle à l'aide d'un schéma well-balanced

en collaboration avec Philippe Helluy et Jean-Marc Hérard⁴.

Articles :

- A Coupled Well-Balanced And Random Sampling Scheme For Computing Bubble Oscillations, Proceedings CANUM 2011.
- A Well-Balanced Scheme For Two-Fluid Flows In Variable Cross-Section ducts, Proceedings FVCA VI.

4. EDF, Paris.

On souhaite résoudre numériquement le système

$$\begin{aligned}\partial_t(A\rho) + \partial_r(A\rho u) &= 0, \\ \partial_t(A\rho u) + \partial_r(A(\rho u^2 + p)) &= pA'(r), \\ \partial_t(A\rho E) + \partial_r(A(\rho E + p)u) &= 0, \\ \partial_t(A\rho\varphi) + \partial_r(A\rho\varphi u) &= 0,\end{aligned}$$

où $A(r) = r^2$ apparaît suite à la symétrie.

Soit A_Δ une approximation constante par morceaux de A :

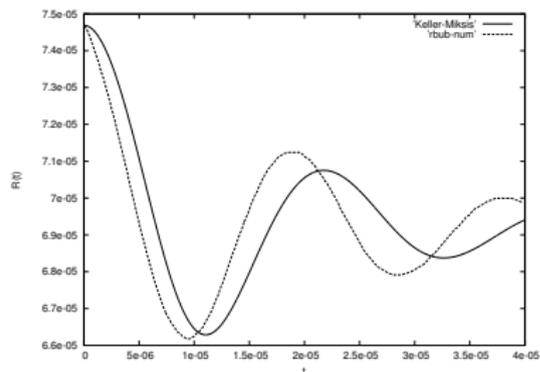
$$A_\Delta(x) = \sum_i A_i h_{]r_{i-1/2}; r_{i+1/2}[}(r).$$

On peut alors remplacer A par A_Δ dans le système et y ajouter l'équation $\partial_t A_\Delta = 0$.

Schéma numérique

- On construit un schéma well-balanced basé sur une approche VFRoe en les invariants de Riemann de l'onde stationnaire.
- Pour éviter les oscillations de pression, l'approche well-balanced est couplée à une technique ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) à l'interface et un rééchantillonnage aléatoire.

Tracé de l'évolution du rayon d'une bulle d'air dans un liquide visqueux :



Calcul d'interaction choc-bulle sur GPU

en collaboration avec Philippe Helluy.

Modèle

On considère les équations d'Euler en dimension deux :

$$\begin{aligned}\partial_t(\rho) + \partial_x(\rho u) + \partial_y(\rho v) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) + \partial_y(\rho uv) &= 0, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho uv) + \partial_y(\rho v^2 + p) &= 0, \\ \partial_t(\rho E) + \partial_x((\rho E + p)u) + \partial_y((\rho E + p)v) &= 0, \\ \partial_t(\rho \varphi) + \partial_x(\rho \varphi u) + \partial_y(\rho \varphi v) &= 0,\end{aligned}$$

où ρ est la densité, u la vitesse suivant x , v la vitesse suivant y , E l'énergie totale, φ la fraction de masse de gaz et p satisfait la loi de pression des gazs raides :

$$p(\rho, e, \varphi) = (\gamma(\varphi) - 1)\rho e - \gamma(\varphi)\pi(\varphi),$$

où

$$e = E - (u^2 + v^2)/2.$$

On peut écrire le système sous forme conservative :

$$\partial_t W + \partial_x F(W) + \partial_y G(W) = 0,$$

où le vecteur de variables conservatives est :

$$W = (\rho, \rho u, \rho v, \rho E, \rho \varphi)^T,$$

et les flux conservatifs sont :

$$F(W) = (\rho u, \rho u^2 + p, \rho uv, (\rho E + p)u, \rho \varphi u)^T,$$
$$G(W) = (\rho v, \rho uv, \rho v^2 + p, (\rho E + p)v, \rho \varphi v)^T.$$

Splitting

Pour résoudre

$$\begin{cases} \partial_t W + \partial_x F(W) + \partial_y G(W) = 0, \\ W(x, y, t = 0) = W_0(x, y), \end{cases}$$

entre les temps $t = 0$ et $t = \Delta t$, on utilise un splitting dimensionnel.

- Premièrement, on résout

$$\begin{cases} \partial_t W + \partial_x F(W) = 0, \\ W(x, y, t = 0) = W_0(x, y), \end{cases}$$

entre les temps $t = 0$ et $t = \Delta t$, on obtient W_1 .

- Ensuite, on résout

$$\begin{cases} \partial_t W + \partial_y G(W) = 0, \\ W(x, y, t = 0) = W_1(x, y), \end{cases}$$

entre les temps $t = 0$ et $t = \Delta t$, on obtient W_2 .

$\Rightarrow W_2$ est une **approximation à l'ordre 1 en temps** de la solution exacte à l'instant Δt .

Conséquences

- On peut donc utiliser deux fois notre algorithme 1D pour effectuer la résolution 2D.
- On utilise maintenant le solveur de relaxation de Bouchut pour la résolution du problème de Riemann à chaque interface.

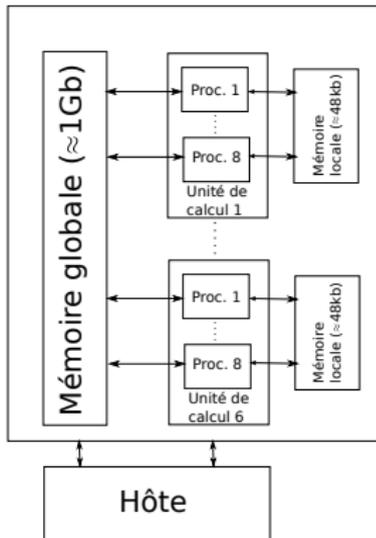
Propriétés du schéma

Le schéma numérique ainsi construit vérifie les propriétés suivantes :

- en dehors de l'interface, le schéma est **entropique**. Il peut traiter des cas **d'apparition du vide**. Nous conjecturons que le schéma global est **statistiquement entropique et conservatif** ;
- si u , v et p sont **constants** à l'instant initial, cette propriété est préservée au cours du temps ;
- si la fraction de masse de gaz φ ne prend que les deux valeurs 0 ou 1, cette propriété est préservée à tout moment.

Matériel

Un GPU avec 6 unités de calcul comportant chacune 8 processeurs.



- Le même programme peut être exécuté sur tous les processeurs **en même temps**.
- Chaque processeur a accès à la mémoire globale mais a seulement accès à la mémoire locale de son unité de calcul.
- L'accès à la mémoire globale est lent tandis que l'accès à la mémoire locale est rapide.

Logiciel : OpenCL

- OpenCL signifie “Open Computing Language”. Il comprend :
 - une librairie de fonctions C, appelées à partir de l'hôte, de manière à commander le GPU.
 - un langage de type C pour écrire les kernels qui seront exécutés par les processeurs.
- Virtuellement, il nous permet d'avoir autant d'unités de calcul et de processeurs que l'on souhaite.
- Le même programme peut être exécuté sur un CPU multi-coeur et un GPU. Il est possible d'utiliser plusieurs dispositifs dans le même programme.

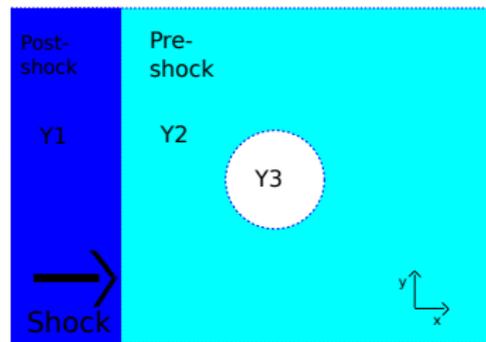
Implémentation en dimension deux

On décrit la méthode pour paralléliser le calcul sur le GPU.

- À chaque ligne de notre domaine 2D on associe une unité de calcul (virtuelle) et à chaque cellule de la ligne, on associe un processeur (virtuel). Il calcule le bilan des flux et effectue la projection dans la direction x pour chaque unité de calcul.
- On "transpose" : on échange les composantes ρu et ρv de W et on réorganise les données de sorte que les accès mémoire soient coalescents suivant y .
- On calcule le bilan des flux et on effectue la projection dans la direction y . Grâce à la transposition, les accès mémoires sont optimaux.
- On transpose de manière à réorganiser les données pour la prochaine étape temporelle.

Application : interaction choc-bulle

On considère un choc qui percute une bulle d'air à la vitesse $\sigma = 100 m.s^{-1}$.



Les données initiales sont :

Quantities	Y1	Y2	Y3
$\rho(kg.m^{-3})$	1384	1000	1
$u(m.s^{-1})$	27.8	0	0
$v(m.s^{-1})$	0	0	0
$p(Pa)$	2.87e6	1e5	1e5
φ	0	0	1
γ	4.4	4.4	1.4
π	4.68e5	4.68e5	0

Video

- Nombre de points de la grille = $512 \times 512 \simeq 262\,000$.
- Nombre d'inconnues par étape temporelle
= Nombre de points de la grille $\times 5$.
 $\simeq 1\,310\,000$.

Speedup

Le calcul a été effectué sur une grille 256×256 avec un temps final de $t_{max} = 0.004$.

	time (s)
AMD Phenom II x4 945 (1 coeur)	192
AMD Phenom II x4 945 (4 coeurs)	59
AMD Radeon HD5850	1.43
NVIDIA GTX 460	2.48
NVIDIA Geforce GTX470	0.93

Projet DICO

financé par BOSCH lors du CEMRAC'S 2011,

en collaboration avec Martina Friedrich⁵, Romuald Skoda⁶ et
Claus-Dieter Munz⁷.

Article : Evaluation Of Interface Models For 3D-1D Coupling Of
Compressible Euler Methods For The Application On Cavitating
Flows, Proceedings CEMRAC'S 2011.

5. Robert Bosch GmbH, Stuttgart.

6. Robert Bosch GmbH, Stuttgart.

7. Université de Stuttgart.

Motivation : les injecteurs diesels pour les voitures de tourisme.



Caractéristiques de l'écoulement :

- $u = 2000 \text{ km/h}$,
- $p = 2000 \text{ bar}$,
- $t = 1 \text{ ms}$.

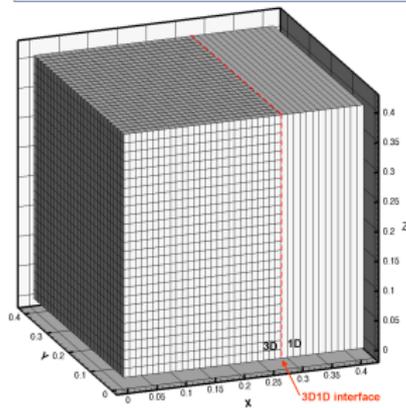
Couplage dimensionnel pour un écoulement monophasique satisfaisant une loi de pression barotrope.

3D- Model:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) + \partial_y(\rho v) + \partial_z(\rho w) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p(\rho, T_0)) + \partial_y(\rho uv) + \partial_z(\rho uw) &= 0, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\rho uv) + \partial_y(\rho v^2 + p(\rho, T_0)) + \partial_z(\rho vw) &= 0, \\ \partial_t(\rho w) + \partial_x(\rho uw) + \partial_y(\rho vw) + \partial_z(\rho w^2 + p(\rho, T_0)) &= 0, \\ p = p(\rho, T_0); \text{ barotrop (isentrop) pressure law,} \end{aligned}$$

1D- Model:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p(\rho, T_0)) &= 0, \\ p = p(\rho, T_0); \text{ barotrop (isentrop) pressure law.} \end{aligned}$$



On souhaite que notre couplage à l'interface nous permette de conserver $v = w = 0$ dans le domaine 1D.

Idée

- A l'interface, on considère le modèle :

$$\begin{aligned}\partial_t(\phi) &= 0, \\ \partial_t(\rho) + \partial_x(\rho u) &= 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p) &= 0, \\ \partial_t(\rho v) + \partial_x(\phi(\rho uv)) &= 0, \\ \partial_t(\rho w) + \partial_x(\phi(\rho uw)) &= 0,\end{aligned}$$

où

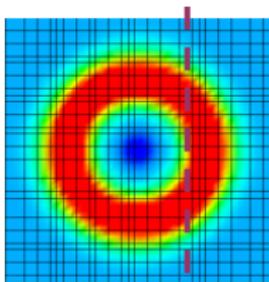
$$\phi(x, y, z, t) = \begin{cases} 1, & \text{à gauche de l'interface,} \\ 0, & \text{à droite de l'interface,} \end{cases}$$

- On résout le problème de Riemman à l'interface grâce à un solveur de Roe.

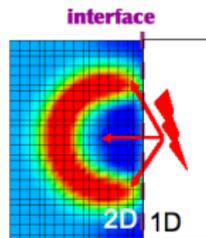
Résultats numériques sur un test 2D

On soumet l'interface à un pic de pression.

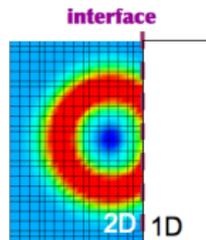
- Avec un modèle purement 2D on obtient :



- Avec le précédent modèle :



- Avec le nouveau modèle :



Perspectives

- Passer l'algorithme de calcul d'un écoulement diphasique en dimension 2 à l'ordre 2 en temps et en espace.
- Passer on dimension 3 de manière à pouvoir étudier les oscillations de bulle de cavitation en 3D.
- Programmer le code 3D sur 4 GPU de sorte à pouvoir utiliser des maillages assez fin pour que la bulle ne disparaissent pas lors du premier rebond.
- Comparer les résultats obtenus aux résultats déjà obtenus pour les oscillations de bulle.

Merci pour votre attention.

