

Sujet de postdoc : limitation de la diffusion d'une interface entre fluides compressibles par la reconstruction d'un gradient multidimensionnel appliqué au schéma Lagrange-Projection

1 Informations générales

- Lieu d'accueil : ENS Paris-Saclay, Centre Borelli, laboratoire LRC Meso
- Encadrants : M. Beaupère, V. Mahy, R. Motte, F. De Vuyst
- Autres participants : M. Peybernes
- Date de début : 01/04/2027
- Durée : 1 an renouvelable 1 an
- Contacts : M. Beaupère (matthias.beaupere@cea.fr), R. Motte (renaud.motte@ens-paris-saclay.fr), F. De Vuyst (florian.de-vuyst@utc.fr)

2 Contexte

Lors de la simulation d'un écoulement multimatériau compressible, avec une interface entre fluides non miscibles, on est amené à calculer la position de cette interface. Dans le contexte d'un schéma volumes-finis, une alternative est d'utiliser la méthode des interfaces diffuses [1, 2, 3], qui permet une zone de recouvrement des deux fluides, car elle permet un profil plus régulier de la fraction volumique, une interface moins déformée et la prise en compte, si le modèle physique le requiert, d'une zone de mélange des deux matériaux. Il est cependant parfois nécessaire de limiter ou de contrôler la taille de ce recouvrement.

3 Motivations

À titre d'exemple, dans le code MaHyCo, est utilisée la méthode pente-borne [4] pour la limitation de la diffusion numérique. Cette méthode est unidimensionnelle avec reconstruction du profil de la densité sur trois mailles, au sein d'une projection par directions alternées. La figure 1 décrit une simulation d'advection pure, régie par l'équation $\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0$. On déplace un pavé de matière incliné de 22.5° par un champ de vitesse uniforme d'amplitude sinusoïdale et d'angle 22.5° par rapport à l'horizontale. On présente le résultat de la méthode pente-borne associée au limiteur superbee. On observe aux coins du rectangle une diffusion numérique de très faible amplitude (inférieure à 10^{-4}), qui vient "polluer" les mailles du matériau extérieur. En propageant le matériau à une fraction volumique très faible en dehors de l'interface, ce type de problème peut fragiliser les calculs (difficulté de convergence des modèles de mailles mixtes) et rend la simulation plus coûteuse et moins précise avec des méthodes numériques généralement plus chères dans les zones de mélange. À l'heure actuelle le seul remède est une suppression du matériau dans les mailles où il a une faible fraction volumique, entraînant une perte de masse. On peut imputer ce problème au caractère 1D de la reconstruction pente-borne.

On notera qu'avec la méthode décentrée aval [5], qui correspond à une interpolation plus raide que pente-borne, les résultats 2D montrent une diffusion numérique semblable (on précise que [6] utilise une méthodologie similaire pour le calcul des flux) et que si de bons résultats peuvent être obtenus avec la méthode de reconstruction d'interface Volume-of-Fluids sur ce problème (voir par exemple [7]), cette méthode ne permet pas - par construction - de traiter les zones de mélange.

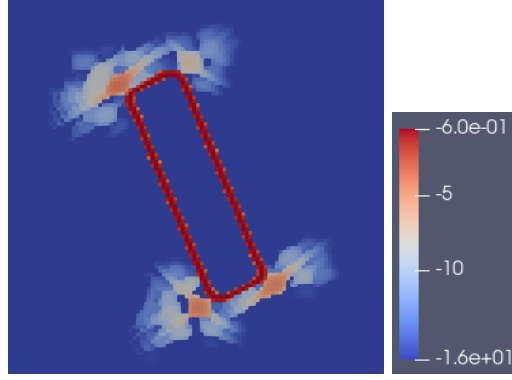


FIGURE 1 – La reconstruction pente-borne associée au limiteur superbee. Pour faire ressortir les mailles contenant plusieurs matériaux, on affiche la grandeur $\log_{10}(\rho \times (1 - \rho) + 10^{-16})$ avec ρ la masse volumique d’un des deux matériaux.

4 Description du sujet

Nous proposons d’appliquer et étendre le travail sur les interfaces diffuses réalisé dans la thèse de V. Mahy [6], afin d’améliorer les étapes de projection en 2D et 3D. Ce travail, qui est une alternative à pente-borne, utilise la reconstruction d’un gradient multidimensionnel (en anglais *Multidimensional Limiting Process* ou MLP [8, 9]) pour calculer l’interface entre les matériaux, et a obtenu des résultats prometteurs pour nos problématiques.

Cette méthode est pour l’instant utilisée dans un schéma Lagrange-Flux [6, Ch. 3], un schéma eulérien qui s’affranchit du calcul d’un état intermédiaire sur maillage déformé, calculant ainsi directement les flux entre les mailles régulières. Afin d’appliquer cette méthode au Lagrange-Projection, on propose d’ajouter la méthode de gradient dans la projection par directions alternées. On aura recours, si besoin, à la méthode en un pas de temps définie dans [6]. On veillera également à la performance de cette méthode sur GPUs. En parallèle, nous proposons d’améliorer les méthodes de [6] avec une extension au 3D.

Enfin, en replaçant cette méthode d’interface diffuse dans le contexte d’une simulation hydrodynamique multimatériau complète, nous pourrions dans un second temps l’évaluer pour la prise en compte des changements de phase [10, 11]. En effet la cinétique de changement de phase induit une transition continue d’une phase à l’autre, et donc un profil de fraction de phase étalé sur plusieurs mailles. La méthode mise en œuvre dans le cadre de ces travaux doit permettre de traiter la zone biphasique, tout en contrôlant les bords mélange/phase pure.

5 Objectifs

- Implémentation de la méthode MLP en Lagrange-Projection dans **MaHyCo** :
 - (P0) ajout au sein de la projection par direction alternée existante ;
 - (P0) si la projection par direction alternée ne donne pas de résultats satisfaisants, modification de la projection pour se rapprocher de celle en un pas de temps de [6] ;
 - (P0) cas-tests multimatériau complexes ;
 - (P1) portage sur architectures GPU afin de proposer une méthode robuste, précise et performante sur les architectures de nouvelle génération ;
 - (P2) méthode hybride pente-borne et MLP, en ajoutant un plateau au gradient multidimensionnel.
- Extension de la méthode Lagrange-Flux dans le **code de V. Mahy** [6] :
 - (P0) extension au 3D ;
 - (P1) portage GPU sur les architectures NVIDIA Grace Hopper, NVIDIA Blackwell B200 ainsi que les GPU AMD Instinct qui équiperont le futur supercalculateur Alice Recoque.
 - (P2) prise en compte des changements de phase afin d’étudier les phénomènes de vaporisation et de condensation tout en conservant les propriétés de stabilité, de conservation et de capture précise des interfaces.

Les objectifs sont priorisés par ordre d’importance, P0 pour les objectifs primordiaux jusqu’à P2 pour les objectifs souhaitables.

6 Compléments sur les ressources logicielles

Nous avons deux codes cibles pour ces développements.

- Le code MaHyCo basé sur la bibliothèque Arcane pour les avancées dans le schéma Lagrange-Projection, il est entièrement porté sur GPU via l’API accélérateur d’Arcane. Le développement de la nouvelle méthode en GPU se fera dans ce cadre, et donc sans grande complexité. On précise que MaHyCo GPU a pour l’instant été principalement testé sur architecture Nvidia, mais qu’il est possible de le lancer sur d’autres architectures, ou en multi-thread (modèle de programmation MPI+multithread) sans développement supplémentaire.
- Le code de V. Mahy [6] pour les avancées dans le schéma Lagrange-Flux, qui a été écrit en vue d’un portage GPU, et donc ne devrait pas induire de grande difficulté à être porté sous cuda (spécifique Nvidia), Kokkos ou openAcc (non spécifique).

Les calculs pourront être lancés sur le TGCC.

Références

- [1] S. Kokh and G. Allaire. Numerical simulation of 2-D two-phase flows with interface. In E. F. Toro, editor, *Godunov Methods : Theory and Applications*, pages 513–518. Springer US, New York, NY, 2001.
- [2] Keh-Ming Shyue and Feng Xiao. An eulerian interface sharpening algorithm for compressible two-phase flow : The algebraic THINC approach. *Journal of Computational Physics*, 268 :326–354, July 2014.
- [3] B. Després, S. Kokh, and F. Lagoutière. Chapter 4 - sharpening methods for finite volume schemes. In Rémi Abgrall and Chi-Wang Shu, editors, *Handbook of Numerical Methods for Hyperbolic Problems*, volume 17 of *Handbook of Numerical Analysis*, pages 77–102. Elsevier, 2016.
- [4] Christina Paulin, Antoine Llor, Thibaud Vazquez-Gonzalez, Jean-Philippe Perlat, and Eric Heulhard De Montigny. Doubly Monotonic Constraint on Interpolators : Bridging Second-Order to Singularity Preservation to Cancel “Numerical Wetting” in Transport Schemes. *SIAM J. Sci. Comput.*, 44(3) :A1227–A1253, June 2022. Number : 3.
- [5] Bruno Després and Frédéric Lagoutière. Un schéma non linéaire anti-dissipatif pour l’équation d’advection linéaire. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences - Series I - Mathematics*, 328(10) :939–943, May 1999. Number : 10.
- [6] Vincent Mahy. *Méthode eulérienne faiblement diffuse appliquée à un modèle totalement conservatif pour la simulation des écoulements multifluides*. PhD thesis, Agence Bibliographique de l’Enseignement Supérieur, 2023.
- [7] David L. Youngs. Time-Dependent Multi-Material Flow with Large Fluid Distortion. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, 1982. Publisher : Academic Press.
- [8] Florian De Vuyst, Christophe Fochesato, Vincent Mahy, Renaud Motte, and Mathieu Peybernes. A geometrically accurate low-diffusive conservative interface capturing method suitable for multimaterial flows. *Computers & Fluids*, 227 :104897, September 2021.
- [9] Vincent Mahy, Florian De Vuyst, Mathieu Peybernes, and Renaud Motte. Fully conservative model with a pressure-oscillation-free scheme for the simulation of compressible multifluid flows. *Computers & Mathematics with Applications*, 217 :331–354, 2026.
- [10] Manuel Bernard, Stéphane Dellacherie, Gloria Faccanoni, Bérénice Grec, and Yohan Penel. Study of a low mach nuclear core model for two-phase flows with phase transition i : stiffened gas law. *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 48(6) :1639–1679, 2014.
- [11] M.G. Rodio and R. Abgrall. An innovative phase transition modeling for reproducing cavitation through a five-equation model and theoretical generalization to six and seven-equation models. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 89 :1386–1401, October 2015.