Méthode de décomposition de domaine espace-temps et parallèle en temps pour les écoulements incompressibles

Sujet proposé par Caroline Japhet *, Camille Coti † et Pascal Omnes ‡

28 mai 2021

Dans le contexte de la modélisation d'écoulements de fluides turbulents, il est crucial de pouvoir réaliser des simulations numériques des différents phénomènes complexes à l'œuvre dans ce type d'écoulements. Les applications sont nombreuses (prévisions météorologiques, aérodynamique des avions et des automobiles, hydrodynamique des bateaux, aérothermie pour les bâtiments, écoulements dans les cœurs de réacteurs nucléaires, ...). Ces simulations nécessitent de grandes ressources informatiques (typiquement plusieurs milliards de degrés de liberté sur des millions de pas de temps) de façon à atteindre une précision permettant de résoudre correctement tous les phénomènes aux différentes échelles d'espace et de temps. De ce fait, de nombreux outils de simulation numérique ont recours au calcul parallèle pour accélérer les calculs. Néanmoins, il est fréquent que ce parallélisme se limite uniquement à l'accélération des produits matrice-vecteur intervenant dans la résolution, par des méthodes itératives, des systèmes linéaires issus de la discrétisation des équations, pas de temps par pas de temps. Sans autre stratégie (préconditionnement, deuxième niveau de parallélisme, ...) le temps de calcul de ces simulations peut augmenter rapidement et devenir prohibitif. De plus, ces techniques parallèles ne prennent pas en compte la physique des phénomènes en jeu.

Les méthodes de décomposition de domaine espace-temps (DD) ont été introduites pour résoudre efficacement en parallèle des équations aux dérivées partielles dépendantes du temps. Leur principe est de transformer le problème physique en une suite de sous-problèmes découplés, de taille plus petite, qui peuvent être résolus en parallèle sur plusieurs processeurs. Pour cela, le domaine de calcul est découpé en sous-domaines, le problème physique est ensuite résolu de façon indépendante dans chaque sous-domaine sur tout l'intervalle de temps, puis des données espace-temps sont échangées sur les interfaces à l'aide de conditions de transmissions adaptées à la physique. On réitère ce processus jusqu'à convergence vers la solution du problème global. Un avantage de ces méthodes est qu'elles permettent à la fois de partager les calculs et de servir d'outil de préconditionnement, en se basant sur le problème original continu (ce qui permet d'utiliser des conditions de transmissions entre sous-domaines prenant en compte la physique). Ces méthodes permettent aussi d'utiliser des discrétisations différentes dans chaque sous-domaine, adaptées aux différents phénomènes physiques.

Les approches parallèles usuelles mentionnées plus haut pourraient être alors utilisées dans chaque sous-domaine de la méthode DD, ce qui permettrait deux niveaux de parallélisme.

Une autre stratégie pour réduire encore plus le temps de calcul global consiste à coupler la méthode DD avec un algorithme parallèle en temps, appelé "Pararéel" [4]. Le principe de ce dernier est de diviser l'intervalle de temps en sous-fenêtres temporelles, et d'utiliser à la fois une résolution séquentielle à l'aide d'un solveur grossier (peu coûteux et peu précis) et une résolution en parallèle dans chaque sous-fenêtre à l'aide d'un solveur fin (plus coûteux et précis). Les conditions initiales

*Co-directrice de thèse, Maître de conférences à l'Université Sorbonne Paris Nord, Laboratoire Analyse, Géométrie et Applications

†Co-encadrante de thèse, Maître de conférences à l'Université Sorbonne Paris Nord, Laboratoire d'Informatique de Paris Nord

‡Directeur de thèse, Directeur de recherche au Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives et Professeur associé à l'Université Sorbonne Paris Nord, Laboratoire Analyse, Géométrie et Applications

dans chaque sous-fenêtre sont mises à jour à l'aide de corrections venant du solveur grossier. Il est possible de faire des itérations incomplètes pour le solveur fin [5, 6]. Le couplage avec la méthode DD se fait alors en remplaçant le solveur fin par des itérations incomplètes de DD. Ceci permet une parallélisation aussi dans la direction temporelle, lorsque la parallélisation dans la direction spatiale n'est plus suffisante.

Un élément déterminant pour une mise en œuvre efficace dans un contexte industriel concerne l'optimisation de l'algorithmique de ces différentes étapes et de leur couplage, la scalabilité des algorithmes lorsque le nombre de processeurs disponibles augmente et enfin la tolérance aux pannes, la probabilité que l'un des processeurs connaisse une avarie pendant le calcul augmentant rapidement avec leur nombre et la durée de celui-ci.

En plus des références liées à l'application de ces techniques à des problèmes d'advection-diffusion [2, 3], cette thèse s'appuiera sur les résultats obtenus pendant la thèse de Duc Quang BUI [1], dans laquelle une méthode de décomposition de domaine, couplée à la méthode Pararéel, a été proposée et étudiée pour un problème d'advection-diffusion, ainsi que pour le problème de Stokes. Quelques résultats numériques bi-dimensionnels sont proposés, ainsi qu'une extension au problème d'Oseen (linéarisation de Navier-Stokes). Sur le volet tolérance aux pannes et parallélisme, nous nous appuierons sur les résultats obtenus dans le cadre de la thèse de Daniel Torres [7].

Il est maintenant nécessaire de progresser dans les directions suivantes :

— Compléter l'étude de la méthode DD couplée à Pararéel pour le problème de Stokes en 2D : la convergence de l'algorithme DD couplé à Pararéel est prouvée dans [1], pour la vitesse, sans résultat numérique. Une première étude sera de regarder s'il est possible de montrer la convergence pour la pression, puis d'ajouter dans le code Freefem DD pour Stokes le couplage avec l'algorithme Pararéel, afin de valider numériquement cette approche.
— Étendre la méthode DD au problème de Stokes instationnaire 3D : écrire l'algorithme DD pour un problème tridimensionnel et étendre les preuves de [1], sur le caractère bien posé de l'algorithme et sa convergence. En particulier, une étude du taux de convergence de la méthode DD pourra être faite sur le problème continu, puis éventuellement sur le problème discret avec le schéma "marker and cell". Le passage au 3D permettra des simulations plus réalistes, qui seront réalisées en Freefem.
— Compléter l'étude de la méthode DD pour le problème d'Oseen en 2D : une étude théorique est proposée dans [1]. On pourra étudier numériquement le taux de convergence de la méthode, puis effectuer des essais numériques, avec un champ de vitesse issu d'un calcul Navier-Stokes.
— Étude du problème d'advection-diffusion avec une vitesse d'advection dépendant du temps : étudier théoriquement et numériquement l'algorithme DD sur un problème d'advection-diffusion linéaire puis éventuellement non-linéaire, avec une vitesse d'advection dépendante du temps. Étudier le couplage de cette approche avec l'algorithme Pararéel. Plusieurs stratégies pourront être proposées pour traiter le terme d'advection. Cette étape fournira des outils qui pourront ensuite être utilisés sur le problème de Navier-Stokes.
— Étendre la méthode DD au problème de Navier-Stokes en 2D : écrire l'algorithme DD et effectuer des simulations réalistes (cavité entraînée) en Freefem.
— Utiliser les différent niveaux de parallélisme possible pour optimiser le temps de calcul et la scalabilité des algorithmes.
— Mettre au point des stratégies peu coûteuses permettant à l'ensemble du calcul d'être tolérant aux éventuelles pannes de processeurs.

Références

[1] D. Q. Bui, New space-time domain decomposition algorithms combined with the Parareal algorithm, Thèse de l'Université Sorbonne Paris-Nord, submitted.

[2] M.J. Gander and L. Halpern, Optimized Schwarz waveform relaxation methods for advection reaction diffusion problems, SIAM J. Numer. Anal., 45 (2007), pp. 666–697.

[3] T.T.P. Hoang, C. Japhet, M. Kern and J.E. Roberts, Space-time domain decomposition for advection-diffusion problems in mixed formulation, Mathematics and Computers in Simulation 137 : 366-389 (2017).

[4] J.-L. Lions, Y. Maday, and G. Turinici, A "Parareal" in time discretization of PDE's, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences - Series I - Mathematics, 332 (2001), pp. 661–668.

[5] Y. Maday and G. Turinici, The Parareal in time iterative solver : a further direction to parallel implementation, in Domain Decomposition Methods in Science and Engineering, Springer Berlin Heidelberg, 2005, pp. 441–448.

[6] O. Mula Hernandez, Quelques contributions vers la simulation parallèle de la cinétique neutronique et la prise en compte de données observées en temps réel, Thèse de doctorat dirigée par Yvon Maday, Mathématiques appliquées, Université Pierre et Marie Curie, 2014.

[7] D. Torres, Thèse de l'Université Sorbonne Paris-Nord (attendue en 2021).