

PROPOSITION DE SUJET DE THÈSE

Intitulé : Couplage temporel adaptatif d'ordre élevé pour des simulations multiphysiques

Référence : **SNA-DMPE-2024-27**

(à rappeler dans toute correspondance)

Début de la thèse : octobre 2024

Date limite de candidature : 01/06/2024

Mots clés : simulation, couplage, multiphysique, ordre élevé, adaptation, implicite, HPC

Profil et compétences recherchées : ingénieur/M2, attiré pour la simulation multiphysique (mécaniques des fluides, thermique...), les méthodes numériques (EDO, EDP), la programmation et le HPC

Présentation du projet doctoral

Contexte : De nombreux phénomènes ou systèmes sont intrinsèquement multiphysiques, c'est-à-dire que les mécanismes expliquant leur fonctionnement font appel à l'interaction entre différents domaines de la physique. Par exemple, la déformation dynamique des ailes d'un avion (aéroélasticité) peut être modélisée comme l'interaction entre un champ fluide et une structure mécanique. De même, la propagation d'un incendie sur un matériau thermiquement dégradable peut être modélisée par l'interaction entre un champ fluide (dans lequel se développe la flamme) et la conduction thermique dans le solide.

Il est souvent nécessaire de simuler de tels systèmes pour étudier finement leur comportement. La complexité des modèles associés à chaque physique, la grande variation des échelles spatio-temporelles que l'on peut rencontrer d'une physique à l'autre dans un même système, et l'omniprésence de méthodes numériques spécialisées pour chaque physique rendent difficile, voire impossible, l'implémentation de tous les modèles requis dans un unique code (approche dite *monolithique*). À l'inverse, chaque physique possède habituellement son lot de codes spécialisés (CFD, mécanique du solide...), qui ont pu être validés et éprouvés pendant plusieurs années. Il est donc extrêmement avantageux de pouvoir tirer parti de ces codes existants et de les coupler entre eux. Ainsi, un solveur fluide spécialisé dans la simulation de flammes pourra être couplé avec un solveur de la thermique du solide afin de calculer l'échauffement d'un matériau par une flamme au-dessus de sa surface. Cette stratégie, qui repose sur la résolution de chaque physique dans un solveur dédié, est classiquement appelée *approche partitionnée*.

La méthode la plus courante pour réaliser un tel couplage consiste à échanger de manière régulière un certain nombre de variables entre les différents solveurs. Ces variables sont celles qui interviennent dans les conditions de couplage entre les différents modèles physiques, par exemple un flux de chaleur, une température de surface ou une pression pariétale. L'écart temporel entre deux échanges successifs est appelé pas de temps de couplage. Il est habituellement constant, fixé par l'utilisateur.

Problématique motivant l'étude : Plusieurs défauts limitent l'efficacité de l'approche partitionnée classique. Tout d'abord, si le pas de couplage est fixé à une valeur faible, les codes vont être couplés plus fréquemment qu'il n'aurait été nécessaire pour obtenir un résultat suffisamment précis vis-à-vis de la dynamique multiphysique étudiée. Ceci induit donc un surcoût inutile du calcul.

En outre, certains modèles physiques peuvent devenir instables si le pas de couplage est trop grand. Dans certains cas, ceci limite drastiquement la valeur du pas de temps couplage utilisable, là aussi induisant un important surcoût de calcul.

Enfin, les variables de couplage étant habituellement considérées constantes durant un pas de temps de couplage, l'ordre de convergence en temps de la simulation multiphysique est généralement égal à 1. Ceci limite la précision de la solution numérique obtenue, et peut obliger à diminuer fortement le pas de temps de couplage.

La littérature scientifique ne comporte aucune étude visant à remédier à tous ces problèmes dans un cadre générique. La plupart des études publiées sont focalisées sur un problème, typiquement la stabilité ou la précision. Elles proposent des solutions souvent spécifiques à une application donnée, difficilement généralisables à d'autres cas, et qui requiert parfois de modifier un trop grand nombre d'éléments dans les codes à coupler.

Objectif et axes de recherche : L'objectif de la thèse est donc de développer une nouvelle stratégie de couplage qui remédie aux problèmes précédents. Ces dernières années, des recherches ont été initiées à l'ONERA sur une nouvelle méthode, nommée *couplage multipas*, qui permet de répondre à ces besoins et peut être considérée comme une généralisation de l'approche partitionnée classique. Elle se base sur l'utilisation des valeurs des variables de couplages à plusieurs instants précédents, pour construire des

approximations polynomiales d'ordre élevé de leur évolution au cours du temps. L'approche permet d'avoir un ordre de convergence global en temps arbitrairement élevé. Elle permet de sélectionner dynamiquement le pas de temps de couplage afin d'assurer la précision de la solution. En outre, une procédure itérative d'implicitation permet d'accroître sensiblement la stabilité du couplage.

À partir de ces travaux préliminaires, la thèse sera divisée en trois thèmes principaux : implémentation, théorie, calculs de démonstrations. Ces thèmes ont un certain nombre de connections entre eux et seront donc explorés en parallèle, tout au long de la thèse.

Le premier volet de la thèse porte sur l'étude théorique de la méthode de couplage multipas. Les travaux déjà effectués à l'ONERA et au CMAP (École Polytechnique) indiquent qu'elle permet d'améliorer la précision et la stabilité des calculs couplés de manière notable. Les outils théoriques mis en œuvre pour son étude sont en grande partie similaires à ceux utilisés pour l'analyse des méthodes numériques pour l'intégration des équations différentielles ordinaires. Toutefois, il est nécessaire d'approfondir leur mise en œuvre dans le cas du couplage multipas, à cause de difficultés supplémentaires inhérentes à la nature multiphysique des modèles couplés considérés. L'objectif est d'améliorer la maîtrise des propriétés mathématiques de la méthode. Cette étude permettra aussi de proposer des améliorations algorithmiques et des optimisations pour la stratégie de couplage.

Le second volet de la thèse sera focalisé sur l'introduction de la nouvelle méthode dans la librairie open-source CWIPI, développée à l'ONERA en C++, qui permet déjà de mettre en place l'approche partitionnée classique (couplage explicite d'ordre 1 à pas constant) pour le couplage de codes dans un contexte de calcul haute-performance (HPC). Cette implémentation permettra une adaptation dynamique du pas de temps de couplage, une augmentation de l'ordre de convergence en temps des solutions couplées obtenues, et une amélioration de la stabilité des calculs couplés. Tout cela aura un impact fort et direct sur les différentes applications utilisant actuellement CWIPI, au sein de l'ONERA ou chez ses partenaires, en grande partie grâce au gain de précision et de robustesse qu'elle permettra d'obtenir. Cette implémentation nécessitera de concevoir la structure du code, en garantissant sa performance dans un contexte HPC, sa lisibilité et sa facilité d'utilisation. Une attention particulière sera portée à l'implicitation du couplage, qui requiert la résolution efficace en parallèle de systèmes linéaires.

Le troisième volet consistera en la réalisation de simulations de démonstration en 3D sur supercalculateur afin de démontrer l'efficacité de la librairie et la qualité des résultats obtenus avec la nouvelle approche. L'application proposée dans le cadre de la thèse est la simulation de la propagation d'un incendie sur un matériau solide dégradable thermiquement, en interaction avec une flamme à sa surface. Cette application se fera avec les logiciels Yales2 (code CFD développé au CORIA) et Modethec (code de dégradation des matériaux développé à l'ONERA). Ce volet se basera sur une interaction privilégiée avec l'équipe de recherche de SafranTech, qui met actuellement en œuvre de tels calculs avec l'approche partitionnée classique. Un calcul typique met en œuvre un maillage fluide d'environ 100 millions de cellules, un maillage solide de quelques centaines de milliers de cellules. Approximativement 50 millions de pas de temps fluide et 50 000 pas de couplage sont nécessaires pour simuler une seconde de temps physique. Ceci représente plus d'un jour de calcul sur 1000 processeurs. Ce cas d'application sera donc un benchmark adapté pour démontrer la performance de la nouvelle stratégie sur des configurations industrielles.

Collaborations envisagées : SafranTech, CORIA, ONERA, CMAP

- Interactions avec les chercheurs de SafranTech, du CORIA et de l'ONERA (départements propulsion et énergétique, plasma, mécanique des matériaux) pour définir la nouvelle interface temporelle de CWIPI
- Interactions avec SafranTech, CORIA et le département énergétique de l'ONERA pour la définition et la réalisation de calculs de démonstration pour le risque incendie (codes Yales2, Modethec et CWIPI)
- Interactions avec le CMAP à l'école Polytechnique pour l'étude théorique des propriétés mathématiques de la stratégie de couplage multipas

Laboratoire d'accueil à l'ONERA

Département : DMPE / Multi-Physique pour l'Énergétique

Lieu (centre ONERA) : Palaiseau / Châtillon

Co-directeur de thèse : Laurent FRANCOIS

Tél. : 01 80 38 60 58

Email : laurent.francois@onera.fr

Directeur de thèse

Nom : Marc MASSOT

Laboratoire : CMAP, École Polytechnique

Tél. : 01 69 33 46 28

Email : marc.massot@polytechnique.edu

Pour plus d'informations : <https://www.onera.fr/rejoindre-onera/la-formation-par-la-recherche>