



Advanced numerical techniques for multiphase flows in image-based simulations

Génération de maillage à partir d'imagerie 3D in-situ de l'écoulement et calcul

L. Silva Ecole Centrale de Nantes, Institut de Calcul Intensif

P. Laure, T. Coupez, H. Digonnet

MINES ParisTech – CMM J.-X. Zhao E. Décencière D. Jeulin INP Grenoble – 3SR T. Laurencin L. Orgéas P. Dumont S. Rolland du Roscoat



ICI – Ecole Centrale de Nantes

O Centre de recherche et technologie en Calcul Intensif

- Crée le 1er Septembre 2014, projet Connect Talent (Pays de la Loire) et Ecole Centrale de Nantes
- Equipe Sep 2015: 10 personnes
- Equipe depuis Sep 2016: ~ 30 personnes
 - 9 permanents (2 ECs titulaires, 5 ECs contractuels, 1 IR, 1 IE)
 - 1 assistante de direction
 - ~ 20 doctorants et stagiaires

• Structuration: laboratoire de recherche et mésocentre de calcul pour

- la démocratisation du calcul intensif et l'usage par le plus grand nombre
- développer un mésocentre régional (Tier2) attractif: puissance de calcul à min 1/10 du plus gros supercalculateur national -> LIGER
- développer un laboratoire de recherche en modélisation par le calcul intensif
 - développer des applications logicielles en collaboration avec les autres laboratoires d'ECN, d'autres partenaires académiques, des centres techniques et des industriels de la région
- développer des outils de formation et de transfert au calcul intensif



ICI – Ecole Centrale de Nantes

O Centre de recherche

- Thématiques de Recherche
 - Equipe HPC: méthodes numériques pour une plateforme logicielle massivement parallèle, ICITech
 - Approche monolithique, interfaces implicites et immersion, éléments finis
 - Génération et adaptation de maillage anisotrope automatique
 - Calcul et programmation massivement parallèle, « cloud computing » ou CI en ligne, lien avec les grands volumes de données pour le calcul scientifique



• Visualisation parallèle, immersive 3D et réaliste



iPGD: Real-time Simulation in handheld devices

Equipe DATAbest: apprentissage automatique et réduction de modèle

- Numerical Methods for Parametric and Highdimensional Problems: PGD
- Data Dimensionality Reduction
- Multi-resolution and Non-intrusive Approaches
- Dynamic Data-Driven Application Systems (DDDAS)
- Simulation Apps and Real-time Simulation



ICI-Tech

O Structure

- ICI-Tech est un environnement pour la création d'applications logicielles et qui comprend, entre autres, les items suivants :
 - ICI-lib, une bibliothèque d'objets de calcul scientifique écrite en C++, basée sur des éléments finis et associée à une librairie de maillage, les deux hautement parallèles. Cette librairie est libre, avec une licence type CeCILL-B;
 - ICI-store, des applications orientées utilisateurs, qui peuvent inclure les scripts pour les composer, ainsi que des fichiers sources spécifiques, qui ne seront pas mis dans la distribution ICIIib commune, pour des raisons de confidentialité/exclusivité. Ces fichiers source devront concerner des développements très spécifiques et en aucun cas toucher au coeur de la librairie.





ICI-Tech

O Applications Materials and processes Centrale Nantes **Arcelor**Mittal Wiping and steel treatments Composites Internal mixing SOLVAY MICHELI **Urban environments** Neuron reconstruction, 3D imaging **3D** reconstruction **Biological systems** Multiphase CFD and thermal computations at different scales Air flows in ducts, linking Energy Z-Axis T MANN+ WEST ATLANTIC Offshore wind farms **i**RSTV





Equipe HPC Méthodes numériques



Motivations (I)

O Example of wiping: an extreme process

Heavy Liquid (molten Zinc) moving up along a vertical surface at 2 m/s High surface tension coefficient (10 times the water/air value) Geometry: 0.20 m large, 0.60 cm high Air jet impacting the liquid surface: 200 m/s Liquid thickness above the impacting jet: less that 10 μ m = 10⁻⁵ m Smallest edge of the mesh = 1 μ m = 10⁻⁶ m uniform mesh would require : 120 billions of nodes Present anisotropic adaptive calculation: **50 000 nodes**





Motivations (II)

O Example of wiping: an extreme process





Approche numérique

O Description courte et composantes principales

• Approche parallèle, monolithique et adaptative





Frontières implicites (I)

- O Répresentation et ε -regularisation
- Signed distance function

$$\alpha = \bar{d}(x, \Gamma) = \begin{cases} d(x, \Gamma) \text{ if } x \in \omega \\ -d(x, \Gamma) \text{ if } x \notin \omega \end{cases}$$

• Heaviside function
$$H(\alpha) = 1_{\omega}(x) = \begin{cases} 1 \text{ if } \alpha > 0 \\ 0 \text{ if } \alpha < 0 \end{cases}$$

 $H(\alpha)$

 α



• Smoothing
$$u_{\varepsilon} = u(\alpha, \varepsilon) = \varepsilon \tanh(\alpha/\varepsilon)$$

$$H_{\varepsilon}(u,\varepsilon) = \frac{1}{2}(1+\frac{u_{\varepsilon}}{\varepsilon})$$

 u_{ε}





[Ville et al, 2011], [Silva et al, 2014]



Frontières implicites (II)

O Interfaces implicites dynamiques

- Driven motion: convective reinitialization
 - Advection of the interface by solving a classical hyperbolic equation $\frac{\partial u_{\epsilon}}{\partial t} + v \cdot \nabla u_{\epsilon} = 0$
 - Loss of the metric properties of the phase function
 - Reinitialization

$$\frac{\partial u_{\epsilon}}{\partial \tau} = s(u_{\epsilon})(|\nabla u_{\epsilon}| - (1 - (\frac{u_{\epsilon}}{\epsilon})^2))$$

Original idea: combine convection and reinitialization

$$\frac{\partial u_{\epsilon}}{\partial t} + (v + \lambda v_r) \cdot \nabla u_{\epsilon} = \lambda s(u_{\epsilon})(1 - (\frac{u_{\epsilon}}{2})^2)$$

 $\longrightarrow v_r = s(u_\epsilon) \frac{u_\epsilon}{|\nabla u_\epsilon|}$

is the reinitialization velocity

$$\lambda \sim \frac{\partial \tau}{\partial t}$$

will guarantee one mesh contour displacement per time step, enough if CFL





Anisotropic H-R-P adaptation



O A short summary

- On each core the mesher works using a metrics field
- Computation of the metrics field is based on an a posteriori error estimator directly computed at nodes and equi distribution of the error under the constraint of a imposed number of nodes
- Is extended to multi-solution fields: phase functions and their Dirac, velocity
- Combined with R-adaptation (mesh velocity)
- New developments: P-adaptation





An adaptive anisotropic VMS formulation (I)

O Starting point: the heterogeneous Navier-Stokes equations

Incompressible Navier-Stokes equations, with surface tension

$$\rho \frac{dv}{dt} - \nabla \cdot (2\eta \varepsilon(v)) + \nabla p = \rho g + f_{st}$$
$$\nabla \cdot v = 0$$

- Stabilized VMS formulation
- Multiphase incompressible Navier-Stokes equations
 - Mixture laws $\xi = \xi_{\epsilon} = \xi_{\omega} H_{\epsilon} + \xi_{\Omega \setminus \omega} (1 H_{\epsilon})$
- Boundary conditions by penalisation of the motion or of the deformation, in a volumic way, using Lagrange multipliers
- Numerical resolution: in //
 - Newton for linearisation
 - PETSc library (Krylov + multigrid methods)



Multiphase flows (I)

O Implicit boundary conditions

• Imposing boundary conditions in a volume

$$(u - u_0, w)_{\Gamma} = 0$$
 $(\delta_{\Gamma}(u - u_0), w)_{\Omega} = 0$
 $(\delta_{\epsilon}[u - u_0], w)_{\Omega} = 0$



- The Dirac function is the derivative of the Heaviside (in our *ɛ*-smooth manner),

$$\delta_{\epsilon} = H'_{\epsilon} = \frac{1}{2\epsilon} \left[1 - \left(\frac{u_{\epsilon}}{\epsilon}\right)^2\right]$$

Changes in the variational formulation -> weak imposition

$$\mathcal{L}(u,\lambda) = \frac{1}{2} (\nabla u, \nabla u)_{\Omega} + \frac{r}{2} (\delta_{\epsilon} [u - u_{0}], u)_{\Omega}^{2} + \lambda (\delta_{\epsilon} [u - u_{0}], u)_{\Omega}$$

- Resolution using an Uzawa's
- Important:
 - no need of the sign of the distance function, meaning less problems when using the point clouds
 - the Lagrange multiplier gives us the force, interesting for other applications





Images et simulation



Plan

- Contexte
- Premiers travaux sur la simulation directe sur image
 - Mailleur d'images
- Construction des fonctions de phase par une méthode de redistanciation
- Ecoulements multiphasiques
 - Applications
 - Calcul de perméabilité 3D
- Conclusions et perspectives



Contexte

O La triple échelle

• Calcul aux échelles micro/meso, en prenant en compte le caractère aléatoire du renfort





M-CFD: calcul multiphasique basé mécanique des fluides

- notre choix: Efs stabilisés, une approche Eulérienne et des fonctions de phase implicites
 - Interface diffuse et épaisseur d'interface ε
- calcul directe à partir des images

Ecoulement microscopique



Simulation directe sur image: l'avant

O Exemple : traction d'un aliage à l'état pâteux

ANR Simuzal (2008-2011): essais /carac SIMAP (L. Salvo) Essai de traction d'un Al-8%Cu Tomographie-X 3D (ESRF) in-situ Cylindre de 2mm de diamètre et 8mm de longueur 400 images de 1024x1024x1024 voxels

Maillage: 3 Mnoeuds Temps de calcul: 4 jours sur 50 coeurs Comportement viscoplastique (Loi Norton-Hoff)





Simulation directe sur image: l'avant

O Exemple : traction d'un aliage à l'état pâteux

ANR Simuzal (2008-2011): essais /carac SIMAP (L. Salvo) Essai de traction d'un Al-8%Cu Tomographie-X 3D (ESRF) in-situ Cylindre de 2mm de diamètre et 8mm de longueur 400 images de 1024x1024x1024 voxels

Maillage: 3 Mnoeuds Temps de calcul: 4 jours sur 50 coeurs Comportement viscoplastique (Loi Norton-Hoff)







Simulation directe sur image: l'avant

O Exemple : traction d'un aliage à l'état pâteux

- Problème: bloquage à 3 millions de noeuds
 - sur la géneration du maillage initial et de la répresentation des différentes phases et sur le suivi des phases au cours de la traction



- <u>Géneration directe du maillage de la microstructure sur l'image, avec sa segmentation</u>
- sur notre solveur itérative « classique » (Krylov) qui a une complexité non-linéaire ($O(n^{3/2})$)
 - Implementation d'une méthode multigrille interfacée avec PETSc
- Application au suspensions de fibres dans une matrice polymère







O Acquisition et image

• Calcul de la valeur du voxel dans le maillage: interpolation directe



Smartphone



O La méthode d'immersion d'image

• Calcul de la valeur du voxel dans le maillage: interpolation directe







 $\begin{array}{ccc} & \text{Mesh 140 Nodes} & \text{Mapping} \\ (512 \times 512 = \hat{L} \times \hat{H} = 262114) & [0,1] \times [0,1] = [0,X] \times [0,Y] \\ \mathbf{X}^{i}, \text{ noeud du maillage avec coordonnée } (x^{i},y^{i}) \text{ et valeur } u(\mathbf{X}^{i}) \\ & \mathbf{X}^{i} & u(\mathbf{X}^{i}) = \hat{u}(Pixel^{k}) \\ \end{array}$

$$\widehat{l^{k}} = \operatorname{int}\left(\frac{x^{i}}{X} \cdot (\widehat{L} - 1) + 1\right), \widehat{h^{k}} = \operatorname{int}\left(\frac{y^{i}}{Y} \cdot (\widehat{H} - 1) + 1\right)$$



- O La méthode d'immersion d'image
- Calcul de la valeur du voxel dans le maillage: interpolation directe







Valeurs aux noeuds

255 n

Image interpolée P1



Interpolation de Lagrange



- O La méthode d'immersion d'image
- Calcul de la valeur du voxel dans le maillage: augmenter le nombre de noeuds



Original Image u



41 nodes



140 nodes



531 nodes



3216 nodes



12849 nodes



50372 nodes

81881 nodes



O Compression via adaptation

• Calcul de la valeur du voxel dans le maillage: augmenter **de façon intelligente** le nombre de nœuds: comme une superpixelisation







O Compression via adaptation

• Idée: optimiser le placement des nœuds par adaptation anisotrope à l'aide d'un mailleur topologique par optimisation locale (parallèle)



• Utilisée dans un contexte parallèle avec un repartitionnement dynamique



O Compression via adaptation

• Calcul de la valeur du voxel dans le maillage: augmenter **de façon intelligente** le nombre de nœuds: comme une superpixelisation



- (a) 500 nodes
- - (b) 3214 nodes





- (c) 12758 nodes
- (d) 82427 nodes



[Silva, Zhao et al (2014)] [Zhao , Silva et al (CMAME, 2016)]



O Compression via adaptation

• Calcul de la valeur du voxel dans le maillage: augmenter **de façon intelligente** le nombre de nœuds: comme une superpixelisation





O La méthode d'immersion d'image

 $MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\widetilde{u}^{i} - u_{h}^{i} \right)^{2}$ 900 MeshNodes $Density = \frac{1}{\text{ImagePixel s}(512 \times 512)}$ 800 700 600 -Anisotropic Mesh 300 —Isotropic Mesh 200 100 0 0 0.02 0.04 0.06 0.08 0.1 Density



Applications images 3D

• Gros volumes spatio-temporels: performance de la méthode d'adaptation





O Goals

•

- Firstly: we dispose of a sequential topological mesher
 - Meshing by local mesh modification
 - Generation by local modification, volume minimization and selection is based on a quality criteria
 - Results in an iterative improvement of an initial mesh
 - Input is a metric field
- Secondly: meshing parallelization must
 - not be intrusive
 - be able to deal efficiently with isotropic and anisotropic mesh sizes
 - use unstructured an unhierarchical simplex meshes

Finally, the chosen solution is

we don't parallelize directly the mesher, but we use it in a parallel context coupled with a parallel mesh (migration) repartitioner: **DRAMA**





O Parallelization





Without constraint : we don't have a global mesh !



Constrained (frozen interfaces): we have a global but not perfect mesh



O Illustration: 2d case

Initial partition on 7 cores







O Illustration: 2d case

1st remeshing with blocked interfaces





O Illustration: 2d case

1st repartitioning to displace interfaces inside the subdomains





O Illustration: 2d case

2nd remeshing





O Illustration: 2d case

2nd repartitioning





O Illustration: 2d case

3rd remeshing





O Illustration: 2d case

Last repartitioning for FE load balancing





Anisotropic mesh adaptation (I)

O A short summary

- On each core the mesher works using a metrics field
- Computation of the metrics field is based on an a posteriori error estimator directly computed at nodes and equi distribution of the error under the constraint of a imposed number of nodes



Is extended to multi-solution fields



[Coupez, 2011], [Coupez, 2013]



Applications images 3D

• Gros volumes spatio-temporels: performance de la méthode d'adaptation





Scalabilité

O Adaptation de maillage

Parallelisation interpolation avec découpe des images •

5

4.5

0.5 0 L







Scalabilité

O Adaptation de maillage

Parallelisation interpolation avec découpe des images

Hard Speed-Up: adaptation sur un maillage initial de 5 à final de 21 millions de noeuds (2D) et de 3.6 à 30 millions de nœuds (3D) , jusqu'à 4096 coeurs (Curie)

WeakSpeed-Up: 1 à 131 072 cœurs, avec une charge de travail constante par cœur (500 000 nœuds sur Curie et 250 000 sur JuQUEEN). Maillage final: 33,3 milliards de nœuds et 67 milliards d'éléments



Excellentes performances jusqu'à 1024 cœurs et dégradation au-delà, compte tenu de la charge par coeur par rapport au coût des communications

[Silva et al (IJCFD 2016)]







O Problematique

• Sauf.. comment obtenir les fonctions de phase implicites?





•

Segmentation par redistanciation

O Problematique

Sauf.. comment obtenir les fonctions de phase implicites?





O Resolution d'une equation type Hamilton-Jacobi: réinitialisation convective

 Connaissant seulement le signe (qui peut venir d'une segmentation "grossière"), on peut reconstruire u_ε directement par resolution d'une équation type Hamilton-Jacobi

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial \tau} = s(u)(|\nabla u| - (1 - (\frac{u}{\epsilon})^2)) \\ u(\tau = 0) = 0 \text{ on } \Gamma \end{cases} \text{ parce que } u'_{\epsilon}(\alpha) = 1 - (\frac{u_{\epsilon}}{\epsilon})^2 \end{cases}$$

Vitesse de réinitialisation
$$v_r = S(\tilde{u}) \frac{\nabla u_{\varepsilon}}{||\nabla u_{\varepsilon}||_2}$$

Equation de réinitialisation convective

$$\frac{\partial u_{\varepsilon}}{\partial \tau} + v_r \cdot \nabla u_{\varepsilon} = S(\tilde{u})g(u_{\varepsilon})$$

- Résolution par éléments finis stabilisés
- Etape de correction

$$S(\mathbf{X}^{i}) = \begin{cases} 1, if \ \hat{u}(Pixel^{k}/Voxel^{k}) > threshold \ value \\ 0, if \ \hat{u}(Pixel^{k}/Voxel^{k}) = threshold \ value \\ -1, if \ \hat{u}(Pixel^{k}/Voxel^{k}) < threshold \ value \end{cases}$$



O Exemple et validation

• Application avec une image construite



(a) \widehat{u} (b) $u_{\varepsilon}^{0}(S, \varepsilon, \tau = 0) = u_{h}$ (c) S_{h}



[Silva, Zhao et al (2014)] [Zhao , Silva et al (CMAME, 2016)]



O Exemple et validation

• Application avec une image construite

Mesh adaptation, N = 10000

 $\frac{u_{\varepsilon}^{\tau}}{\varepsilon}$ with $\varepsilon = 0.01$





O Problematique

- Et si on travaillait sur l'image?
 - Mathematical morphology tools (Morph-M) have been interfaced to accelerate distancing





•

Segmentation par redistanciation

image 1 700

mesh

O Problematique

- Et si on travaillait sur l'image?
 - Mathematical morphology tools (Morph-M) have been interfaced to accelerate distancing _

Avant: 150 itérations, 680 seconds Après: 15 itérations, 93 seconds











O Exemples en 2D et 3D





O N phases





O N phases



 $u_{\varepsilon}^{\ \tau}(\varepsilon=0.02)$

N=400000, 233.9 mins Iso-zero surface of ${u_{\varepsilon}}^{ au}$

Surface mesh

[Silva, Zhao et al (2014)] [Zhao , Silva et al (CMAME, 2016)]





Les écoulements



•

Méthodes immergées

O Les équations de Navier-Stokes en multiphasique

Equations de Navier-Stokes incompressible

$$\rho \frac{dv}{dt} - \nabla \cdot (2\eta \varepsilon(v) + S) + \nabla p = \rho g + F$$

$$\nabla \cdot v = 0$$

- Lois de mélange régularisées $\xi = \xi_{\epsilon} = \xi_{\omega}H_{\epsilon} + \xi_{\Omega\setminus\omega}(1-H_{\epsilon})$
- Résolution numérique : en //
 - Méthodes éléments finis stabilisés
 - Newton pour la linéarisation
 - Librairie PETSc (Krylov + multigrille) > résolution massivement parallèle
 - Conditions limites par pénalisation + Lagrangian augmenté (calcul de la force)

Les écoulements



Flow inlet





Scalabilité

O Méthode multigrille //

- Parallélisation de la résolution
 - préconditionneur de type multigrille PCMG
 - optimisation du calcul des opérateurs de restriction/interpolation

WeakSpeed-Up: Résolution des équations de Stokes sur maillage adapté, exécution de 1 à 262 144 cœurs pour une convergence relative à 1e-9, cas final à 100 milliards de degrés de libertés en 3D (21 milliards en 2D)



Image: 1200x1200x1791 voxels (3SR) Maillage: 400 millions de nœuds sur 4096 coeurs Génération/adaptation: 5h Ecoulement (calcul multiphasique): 10 min pour 1.6 millards de degrés de liberté







Les écoulements dans les composites



Comparaison avec des solutions de réference

• Echelle microscopique: Perméabilité fonction du type d'arrangement, régularité, conditions aux limites, taille du VER...



Ecoulement microscopique



Comparaison avec des solutions de réference



Echelle mesoscopique: Perméabilité fonction du type d'architecture, dans le plan et transverse, nesting...





O Arrangement irrégulier 3D: éléments finis

- Arrangement 3D irrégulier obtenu par imagerie 3D [Orgéas et al, 3SR]
- Caractéristiques renfort: R=0.1mm, L=10mm, F=0.83
- Images acquises par microtomographie-X, taille du voxel = 10x10x10 μm³
- Image reconstruite, segmenté et binarisé, correspondante à



900x900x100 et 900x900x220

Distance signée $\widehat{u_d}$ dans l'image

• Calcul d'écoulement sur le volume

Résultats 3D: perméabilité « intrinsèque » O Arrangement irrégulier 3D: éléments finis 0.01 -0.01 Redistanced $u_{\varepsilon}^{\tau}(\varepsilon = 0.01)$ Adapted volume mesh, N = 400000Iso-zero surface of u_{ε}^{τ} Surface mesh of the Iso-zero surface of u_{ε}^{τ}

6 cores for 25 iterations, 213.8 minutes



O Arrangement irrégulier 3D: éléments finis

- Génération du maillage éléments finis: interpolation + adaptation, comme précédemment (sur 96 cœurs, en //)
- Taille du maillage sur le gros volume: ~5 millions de nœuds (par rapport à 178.2 millions de voxels, sur le 900x900x220 s)



Maillage adapté

Norme de la métrique calculée pour l'adaptation

[Digonnet , Silva et al (soumis à IJHPCA 2015)]



O Arrangement irrégulier 3D: éléments finis

- Génération du maillage éléments finis: interpolation + adaptation, comme précédemment (sur **96 cœurs**)
- Taille du maillage sur le gros volume: ~5 millions de nœuds (par rapport à 178.2 millions de voxels, sur le 900x900x220)



Maillage adapté

Isovaleur 0 de la distance calculée sur le maillage



- O Arrangement irrégulier 3D: éléments finis
- Calcul de l'écoulement
- Valeurs de perméabilité ~10^{e-9} à 10^{e-10}



Norme de la vitesse

Pression

[Digonnet , Silva et al (soumis à IJHPCA 2015)]



•

Remerciements

- A Laurent Orgeas, Pierre Dumont, Sabine Rolland du Roscoat & Pierre Latil (3SR INP Grenoble)
- A Etienne Decenciere et Dominique Jeulin (CMM-MINES ParisTech)
- Au GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif) et à PRACE pour avoir permis l'accès à Curie, Occigen et JuQUEEN, dans les projets Real2HPC et BubNoz
- A l'Institut MINES Telecom pour le soutien au projet phare « De l'image au maillage »