

# Intégration du solveur Shenfun en tant que backend CPU spectral dans un solveur fluide

## Contexte scientifique

---

Ce stage propose de travailler sur l'intégration d'un solveur spectral dans une bibliothèque résolvant des équations aux dérivées partielles par utilisation de méthodes numériques appelées méthodes Vortex. Parmi les nombreuses méthodes numériques utilisées pour la simulation d'écoulements incompressibles, les méthodes basées sur une approche particulière (ou lagrangienne) occupent une place importante de part leur description intuitive et naturelle de l'écoulement ainsi que par leur faible diffusion numérique et leur stabilité. Elles consistent à discrétiser les quantités physiques du problème sur des particules numériques qui transportent ces quantités dans le domaine physique en fonction de la dynamique de l'écoulement.

Plus particulièrement, les méthodes Vortex dites semi-lagrangiennes ou avec remaillage ou particle-mesh, ont été exploitées avec succès pour la simulation de nombreux problèmes réels en mécanique des fluides, aux retombées industrielles. Parmi les domaines d'application concernés on peut citer le contrôle aérodynamique d'écoulement, la simulation d'écoulements en milieux poreux, l'interaction fluide-structure, la simulation d'écoulements diphasiques, le transport de scalaire passif, l'optimisation et l'apprentissage par renforcement. Dans le cadre de ce stage, les simulations numériques seront donc basées sur une approche Vortex semi-lagrangienne et seront effectuées à partir d'un code de calcul de recherche existant, nommé HySoP (Hybrid Simulations using Particles), dédié à la résolution des équations de Navier-Stokes en 2D et 3D à l'aide d'une méthode Vortex avec remaillage ("particle-mesh"). Elle permet des simulations parallèles sur processeurs classiques (multi-CPU) ou sur architecture hybride CPU-GPU (exemple en Figure (a)).

## Objectifs du stage

---

Shenfun est un solveur spectral basé sur la méthode de Galerkin qui peut traiter jusqu'à deux directions non périodiques. Les bases spectrales  $nD$  sont des produits tensoriels de base spectrale 1D de type Fourier, Legendre, Chebyshev, Laguerre, Hermite ou Jacobi.

La librairie est écrite en python3, les filtres  $F(\omega)$  utilisent numpy ou numba. Le support massivement parallèle est réalisé par la bibliothèque mpi4-fftw.

L'objectif de stage est d'explorer la possibilité d'ajouter un support CPU spectral pour les conditions non-homogènes dans HySoP.

- ▶ Méthodes numériques : FFT, polynômes, calcul matriciel.
- ▶ Bibliothèques utilisées : python3, numpy, numba, mpi, fftw

De nombreux exemples documentés sont présents sur le dépôt github : <https://github.com/spectralDNS/Shenfun>

## Plan de stage

1. Manipuler la bibliothèque Shenfun, implémenter un solveur de Poisson avec des conditions aux bords périodiques, puis homogènes, puis non homogènes.
2. Vérifier à l'aide de solutions analytiques que les solutions calculées et analytiques sont similaires (Méthode des solutions Manufacturées)
3. Composer des cas tests reproductibles.
4. Renouveler la démarche en utilisant les capacités parallèle de la bibliothèque Shenfun
5. Comprendre le fonctionnement de Shenfun :
  - ▶ A quel moment est allouée la mémoire pour les grilles? Est-il possible de passer une grille pré allouée?
  - ▶ Comment est gérée l'heuristique de découpe des grilles en MPI.
  - ▶ Peut-on fournir une topologie MPI mise en place en dehors de Shenfun ?
6. Essayer d'interagir avec Shenfun en allouant les grilles et un communicateur MPI indépendamment de Shenfun.
7. Analyser les performances de Shenfun en local et sur cluster.
8. Étendre l'implémentation à d'autres filtres spectraux présents dans HySoP (PoissonCurl, Diffusion et SolenoidalProjection).
9. Tenter une implémentation dans HySoP.

## Compétences recherchées

Les candidat·e·s devront être issu·e·s d'une formation mathématiques appliquées et/ou informatique. Des connaissances en mécanique des fluides (pour les applications) sont un plus. On attendra des candidat·e·s des compétences en programmation, notamment en calcul parallèle, ainsi qu'une connaissance des méthodes et schémas numériques pour la mécanique des fluides. Une expérience dans l'utilisation de logiciels de gestion de versions (git, github, ...) est nécessaire.

Un bon niveau d'anglais (écrit et oral) sera requis.

## Informations pratiques et contacts

---

**Lieu** : laboratoire LJK, Grenoble

**Encadrement** : Christophe Picard (Maître de Conférences)

**Financement** : Gratification de stage (environ 600/mois)

**Durée** : 5 mois à compter de mi-février

**Contact** : christophe.picard@univ-grenoble-alpes.fr

**Candidature** : CV et lettre de motivation au format PDF envoyés par courriel.