

Simulation numérique de convection

avec le logiciel ASPECT

Marine Lasbleis
2021 – M1STU Nantes

Avant de commencer

Prise en main d'ASPECT

Description du modèle

Description de la dynamique

Lois d'échelles

Profils moyens

Projets

Avant de commencer

Commandes usuelles dans un terminal

Lancement d'une simulation

Notebooks jupyter

Prise en main d'ASPECT

Description du modèle

Description de la dynamique

Lois d'échelles

Profils moyens

Projets

Merci de vous connecter sur votre session (Linux!)

Liste des fichiers à télécharger sur Madoc :

- Ces slides
- Notebook jupyter (Python)
- Les fichiers de paramètres (.prm)

Créer un dossier spécifique pour y mettre les documents (et y mettre les documents) :

```
mkdir ./Documents/M1_int_plan/
```

À récupérer sur l'ordinateur :

```
cp /usr/local/opt/aspect/bin/aspect ./Documents/M1_int_plan/
```

ouvrir un terminal sous Ubuntu : Ctrl+Alt+T

- **pwd** – gives absolute path
- **ls** – lists files in the folder
- **cd <folder_name>** – move to <folder_name>
try also : **cd**, **cd ..** and **cd ~**
- **mkdir & rmdir** – make new directory, or remove one.
- **rm** – remove file (-r to remove also directories)
- **man & -help** – to get help about a command
- **cp & mv** – to copy or move files (-r for directories)
- **locate** – to locate a file with his name

Quelques commandes supplémentaires utiles :

- **grep word files** – to see if files contain the word **word**.
- Text editors : use the one you are the most familiar with. Default should be easy (example : gedit). Other options are nano, vim, emacs.
- Use the autocomplete function : start typing and use TAB to complete the word.
- Ctrl+C to stop a command that is running in the current terminal (Ctrl+z if not working). **top** to check what is running on your computer.
- **sudo** allows you to use a command as if you are super-user (requires admin right and the password) Default is not to log as admin!
- **apt-get** will install most programs needed.

Avant de commencer le cours, on va lancer une simulation :

- télécharger le fichier .prm de votre groupe (le mettre dans un dossier dans Documents)
- ouvrir un terminal

```
cd ./Documents/M1_int_plan/  
./aspect fichier_XX.prm
```
- Laisser tourner en tâche de fond (ne touchez plus au terminal)

Notebooks jupyter

Pour le traitement des données, on va utiliser deux systèmes :

- Paraview (visualisation globale)
- Python (via des notebooks) pour les statistiques

Pour ouvrir les notebooks jupyter :

- ouvrir un terminal, se placer dans le dossier adéquat

```
cd ./Documents/M1_int_plan/
jupyter notebook
```
- jupyter notebook
- cliquer sur le notebook
- pour activer une cellule : Shift+Entrée

Chez vous : installer python avec anaconda

<https://www.anaconda.com/distribution/>

Pour installer pandas et pyyaml :

```
pip3 install pandas pyyaml
```


Avant de commencer

Prise en main d'ASPECT

Le logiciel ASPECT

Installation

Lancer une simulation

Description du modèle

Description de la dynamique

Lois d'échelles

Profils moyens

Projets

Advanced Solver for Problems in Earth's ConvecTion

Lien vers le manuel :

<https://geodynamics.org/cig/software/aspect/aspect-manual.pdf>

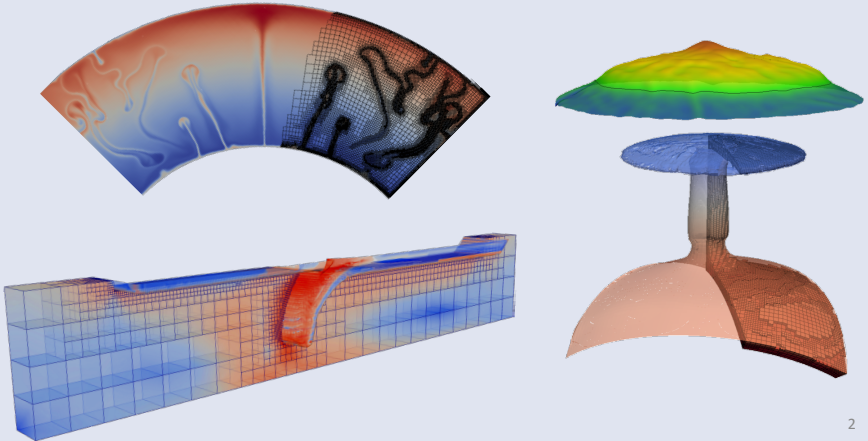
Permet de simuler des problèmes de convection dans des set-up géophysiques

- Géométries :
 - 2D ou 3D
 - boîte, anneau sphérique, sphère
- Physique :
 - convection simple (approximation de Boussinesq)
 - compressibilité
 - fusion et/ou cristallization
 - convection bi-phasique
 - topographie

What is Aspect?

ASPECT

- Advanced Solver for Problems in Earth's ConvecTion -



- ❖ **Modern numerical methods:**
adaptive mesh refinement, linear and nonlinear solvers,
higher-order discretizations, stabilization schemes
- ❖ **Usability and extensibility:**
manual: 450+ pages, ~40 cookbooks/examples
plugin architecture
- ❖ **Parallel scalability**
- ❖ **Building on others' work:**
tested foundation, smaller codebase, automatic
improvements
- ❖ **Community:**
GPL, developed in the open
Encourage contributions, be welcoming

Credits

Website and manual:

aspect.geodynamics.org

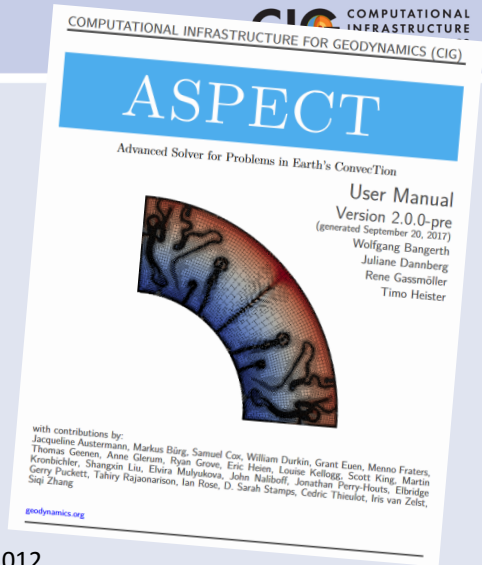
Maintainers:

Wolfgang Bangerth,
Juliane Dannberg,
Timo Heister, Rene Gassmüller

Contributors: many more (~45)

Publications: (~30)

- Kronbichler, Heister, Bangerth:
“High Accuracy Mantle Convection
Simulation through Modern
Numerical Methods”.
Geophysical Journal International, 2012.
- Heister, Dannberg, Gassmoeller, Bangerth: “High Accuracy Mantle Convection
Simulation through Modern Numerical Methods. II: Realistic Models and
Problems”. *Geophysical Journal International*, 2017.



Lien vers le manuel :

<https://geodynamics.org/cig/software/aspect/aspect-manual.pdf>

En se plaçant dans le dossier avec le fichier **fichier-parametres.prm** :

Avec un seul coeur :

```
./aspect fichier-parameters.prm
```

Avec plusieurs coeurs (utile si grille fine)

```
mpirun -np 2 ./aspect fichier-parameters.prm
```

Avant de commencer

Prise en main d'ASPECT

Description du modèle

- Modèle physique

- Équations de la dynamique

- Fichier de paramètres

- Fichiers de sortie

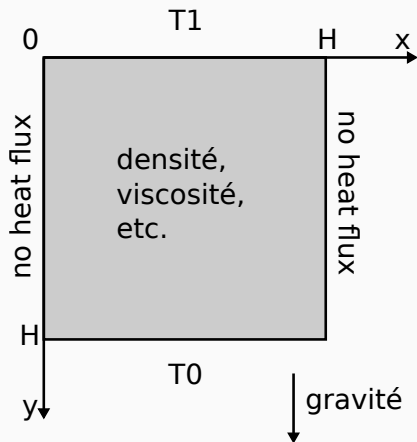
Description de la dynamique

Lois d'échelles

Profils moyens

Projets

- **Géométrie**
boite 2D (infinie en z)
- **Propriétés physiques**
matériel simple (tout constant, sauf densité qui varie avec les variations de température)
- **Conditions aux limites**
variation de température entre haut et bas
free-slip partout.
- **Forces extérieures**
gravité constante, orientée vers le bas



- **Géométrie**
boîte 2D (infinie en z)
- **Propriétés physiques**
matériel simple (tout constant, sauf densité qui varie avec les variations de température)
- **Conditions aux limites**
variation de température entre haut et bas
free-slip partout.
- **Forces extérieures**
gravité constante, orientée vers le bas

Mots clefs : équations de conservation (de la quantité de matière, du moment, de l'énergie); pas d'inertie; rhéologie newtonienne à viscosité constante; incompressible; approximation de Boussinesq; Température potentielle Θ ; vitesse \mathbf{v} ;

En dimensionné :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ -\rho_0 \alpha \Theta g \mathbf{e}_z - \nabla P + \eta \nabla^2 \mathbf{v} &= \mathbf{0}, \\ \frac{\partial \Theta}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \Theta &= \kappa \nabla^2 \Theta \quad (+H)\end{aligned}$$

En adimensionné :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ Ra \Theta - \nabla P + \nabla^2 \mathbf{v} &= \mathbf{0}, \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T &= \nabla^2 T \quad (+H)\end{aligned}$$

ASPECT résout numériquement les équations dans un volume donné en utilisant des méthodes d'éléments finis. On discrétise l'espace et le temps. Cela implique de définir une grille (un mesh). ASPECT permet de redéfinir la grille au cours du temps (**mesh refinement**), ce qui permet dans certains cas d'optimiser le temps de calcul.

ASPECT utilise les **grandeurs dimensionnées** en input, mais le type de dynamique dont on s'occupe ici est contrôlé par un seul nombre sans dimension : le nombre de Rayleigh.

En faisant varier la gravité, on fait varier le nombre de Rayleigh (et uniquement ce nombre là).

On peut donc regarder les résultats et voir les différences en fonction du nombre Rayleigh.

voir **fichier.prm**

Dans le dossier **output** :

- **log.txt**
toutes les sorties (qui défilent sur le terminal)
- **Fichiers parametres**
parameters.prm (pour réutiliser)
parameters.tex (pour avoir un pdf avec pdflatex)
- **statistics**
Fichier avec 1 ligne par pas de temps résolu, avec les statistiques globales de la simulation.
- **Fichiers de visualisation**
solution.pvd / solution.visit : contient toutes les infos pour ouvrir d'un coup tous les fichiers de sortie.
dossier solution : contient tous les fichiers de sortie.

Avant de commencer

Prise en main d'ASPECT

Description du modèle

Description de la dynamique

Visualisation avec Paraview

Absence de convection

Bas nombre de Rayleigh

Haut nombre de Rayleigh

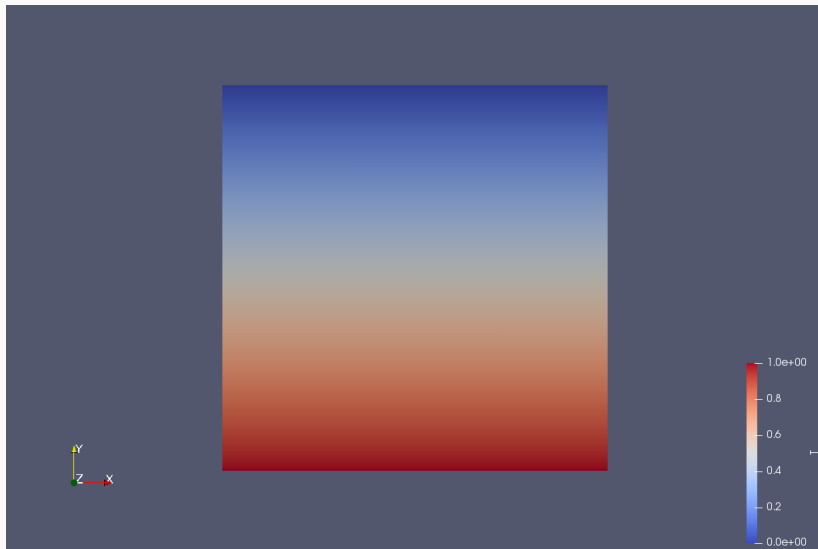
Lois d'échelles

Profils moyens

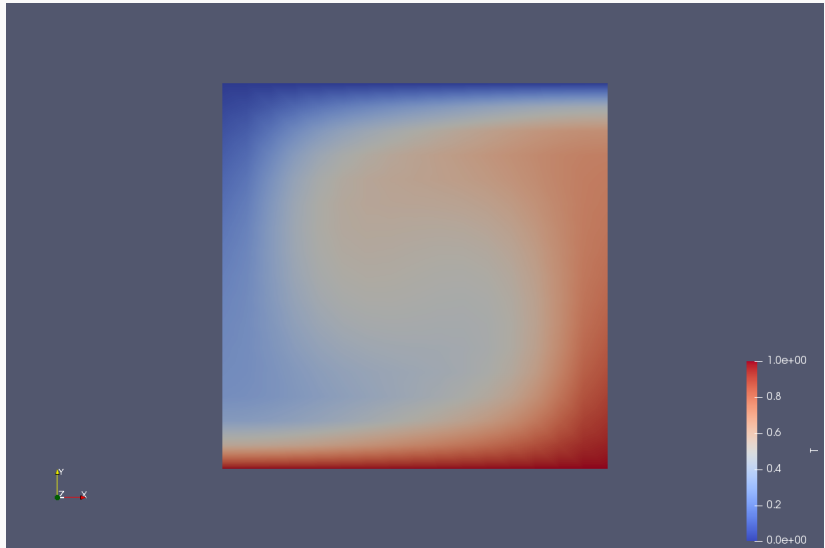
Projets

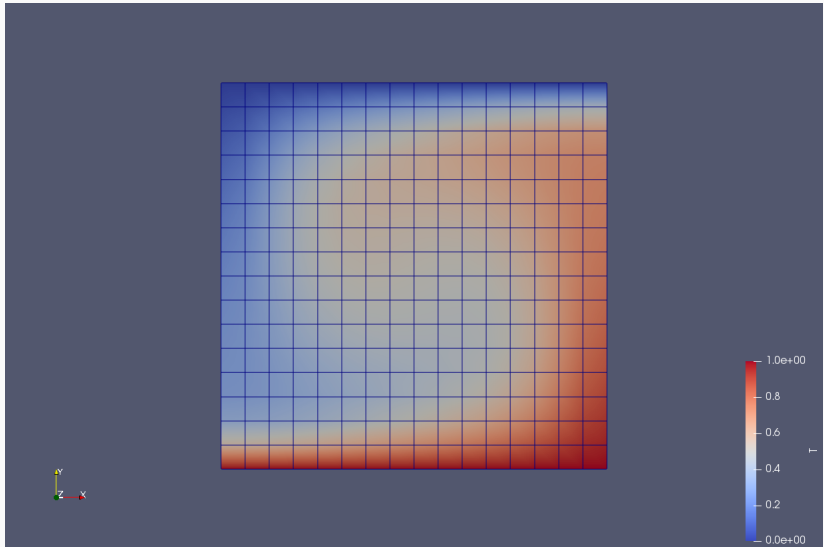
- Ouvrir le logiciel paraview
- File > Open > sélectionner le fichier solution.pvd
- Cliquer sur "Apply"
- Choisir le champs à visualiser

Absence de convection



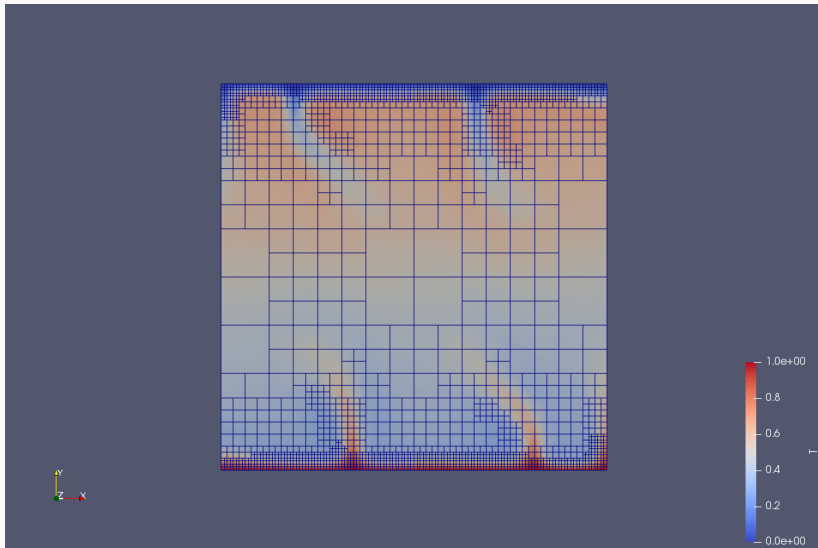
Attention : la vitesse est nulle, le pas de temps est infini (ou presque)...







Attention : la dynamique est à petite échelle, il faut donc faire attention à la grille.



Attention : la dynamique est à petite échelle, il faut donc faire attention à la grille.

Avant de commencer

Prise en main d'ASPECT

Description du modèle

Description de la dynamique

Lois d'échelles

Extraire les évolutions temporelles

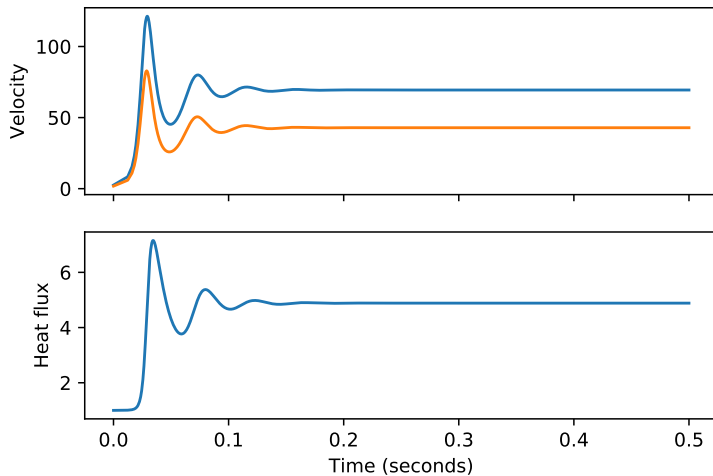
Lois d'échelles

Profils moyens

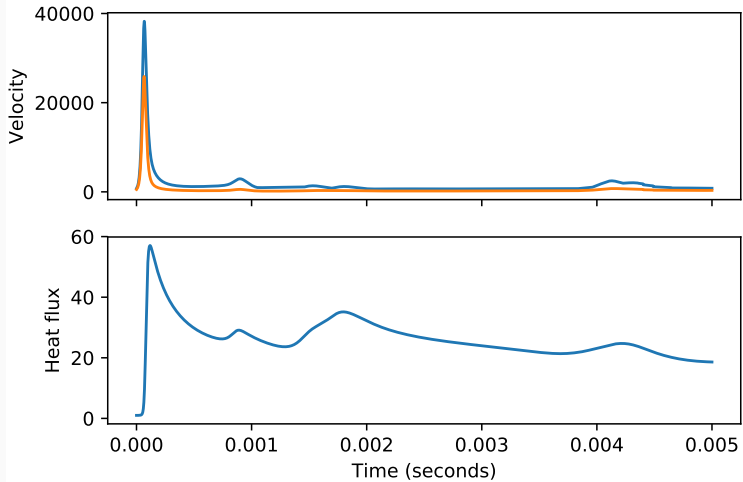
Projets

voir notebook jupyter

- ouvrir un terminal
- jupyter notebook



Évolutions temporelles – $Ra=3 \cdot 10^6$



Lois Nusselt-Rayleigh :

Faire une figure avec $\log(\text{Flux chaleur haut})$ en fonction de $\log(Ra)$

Avant de commencer

Prise en main d'ASPECT

Description du modèle

Description de la dynamique

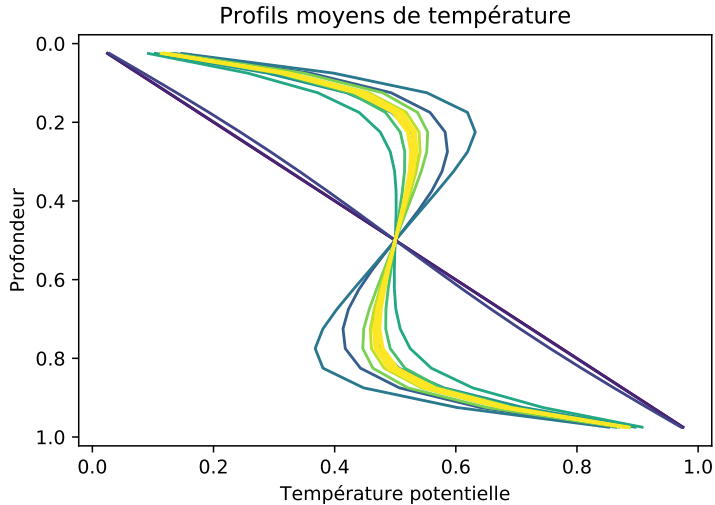
Lois d'échelles

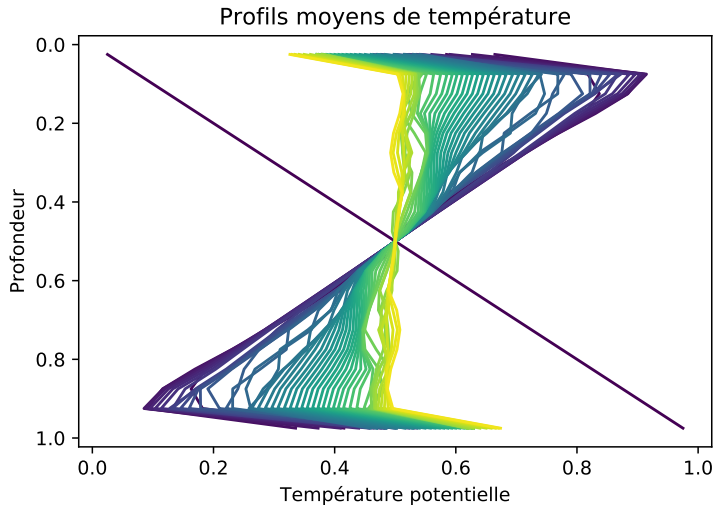
Profils moyens

Extraire et visualiser les profils moyens

Projets

cf notebook Python





Avant de commencer

Prise en main d'ASPECT

Description du modèle

Description de la dynamique

Lois d'échelles

Profils moyens

Projets

- Structure d'un projet

- Notes sur le temps de calcul

- Description physique et numérique du problème
- Description des dynamiques obtenues
 - Décrire les différents types de dynamique obtenus (en mettant des exemples)
 - Regarder la convergence pour chacun des cas et montrer un exemple convergé/non convergé.
 - Étudier les couches limites à partir des profils moyens
 - possibilité de faire des vidéos avec paraview (mettre en ligne et lien dans projet)
 - attention sur l'effet du maillage (plus ou moins fin) pour la convergence
- Lois Nu-Ra en fonction des paramètres
 - tracer le flux de chaleur en surface en fonction du Rayleigh
 - Remplir le document partagé :
<https://uncloud.univ-nantes.fr/index.php/s/5xZdFaqBg6wE8KT>
- Discussion

Compter ~ 10 pages avec figures.

- Écrire des fichiers de sortie coûte cher en temps de calcul (mais est très utile pour le déboguage!)
- Avoir une grille plus fine coûte cher en temps de calcul (mais une grille trop large ne permet pas de bien résoudre la physique!)
- Utiliser plusieurs cœurs permet de réduire le temps de calcul (à condition que le temps passé à communiquer entre les cœurs ne soit pas trop grand! Ne pas utiliser pour des problèmes trop petits, ou avec trop de mesh refinement)