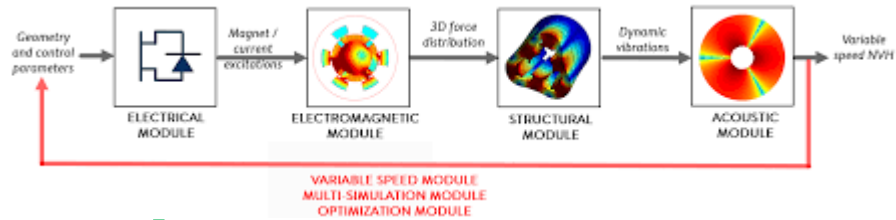
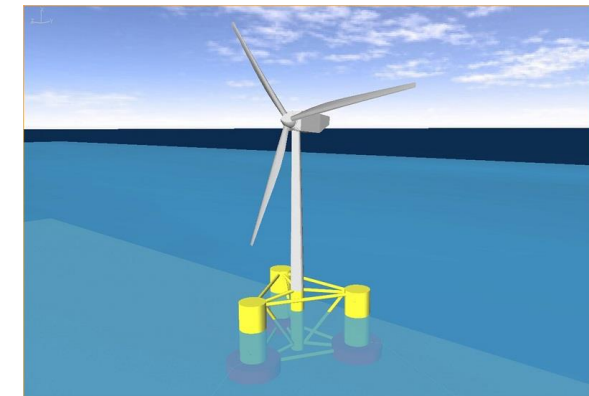
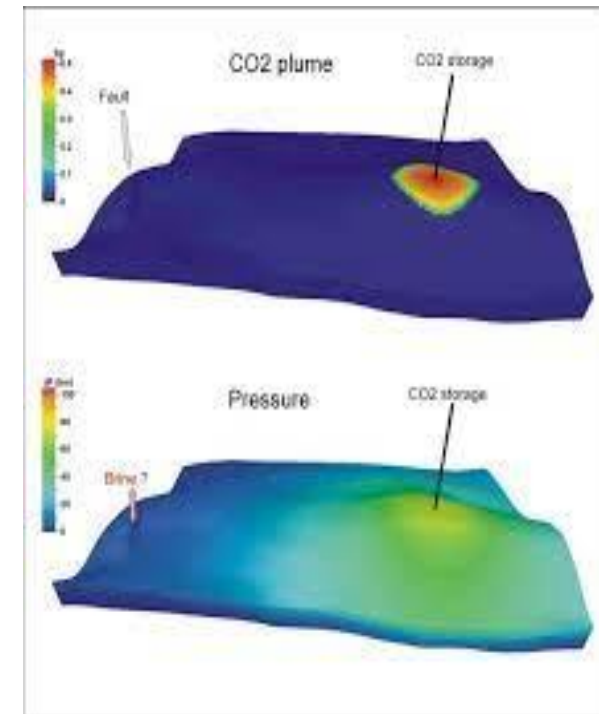
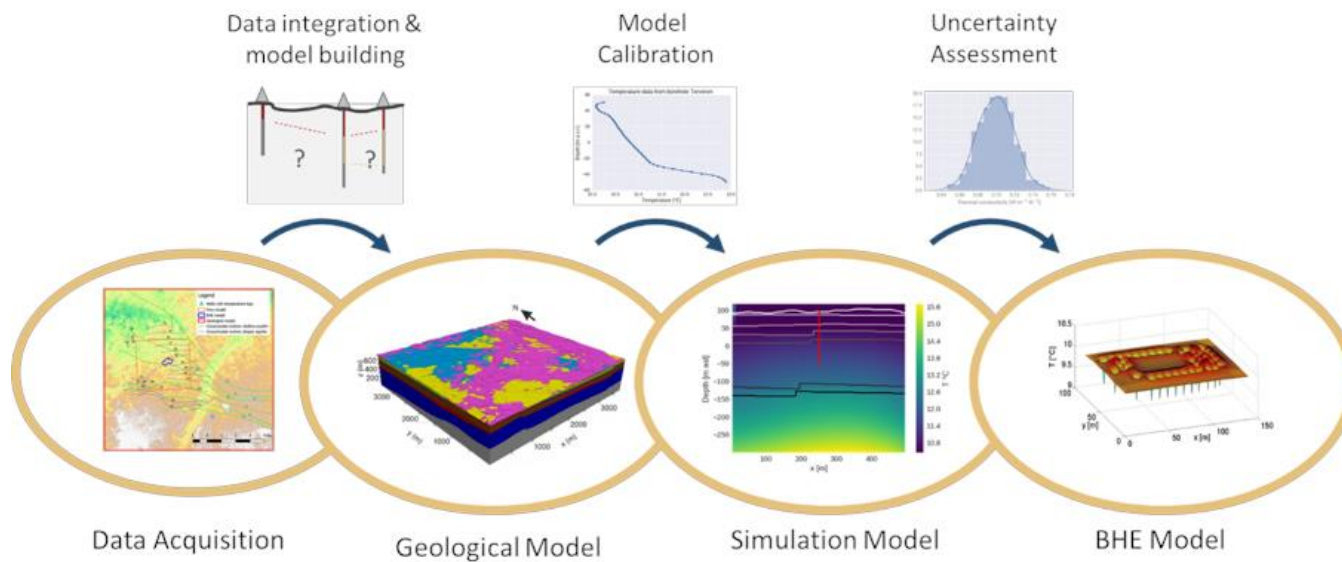


CAWF : Coupled Applications WorkFlow Framework

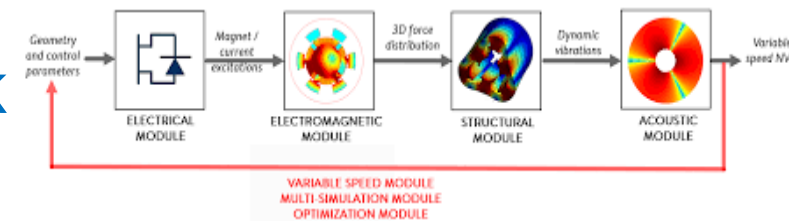


LES JOURNÉES ARCANÉ 2023

COUPLAGE D'APPLICATIONS ARCANÉ AVEC FRAMEWORK PRECICE



CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Sommaire

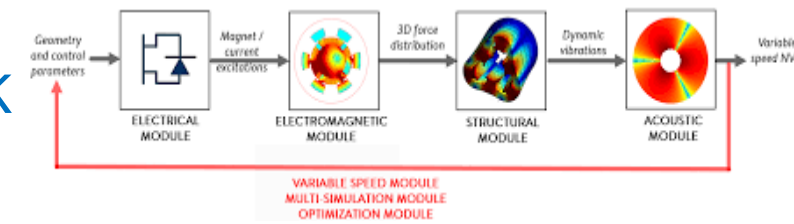
● Contexte

● Revue des outils pour le couplage de code

● Intégration de preCICE dans ArcGeoSim

● Quelques exemples d'applications

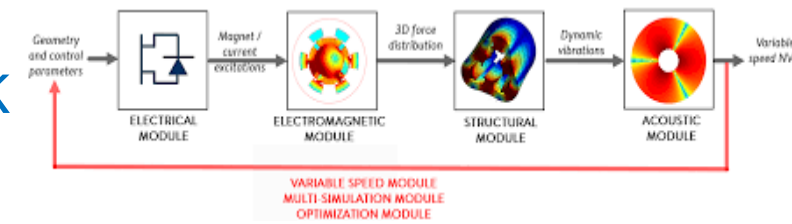
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Sommaire

● Contexte

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Cadre des travaux

● Projet de créativité Blanche CAWF

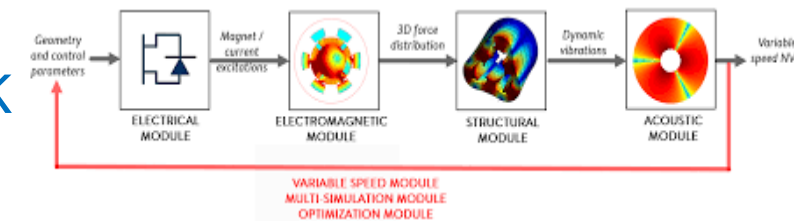
● Projet ArcGeoSim

- Collaboration IFPEN-CEA
- Collaboration IFPEN-ANDRA

● Equipes:

- IFPEN : Stéphane DE CHAISEMARTIN, Françoise WILLEN, Daniele COLOMBO
- ANDRA : Bernard VIALAY, Antoine PASTEAU

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Contexte

● La modélisation multi-physique pour une meilleure compréhension des phénomènes complexes:

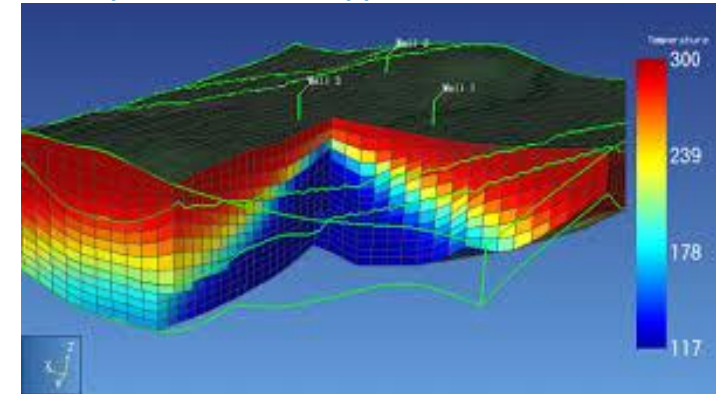
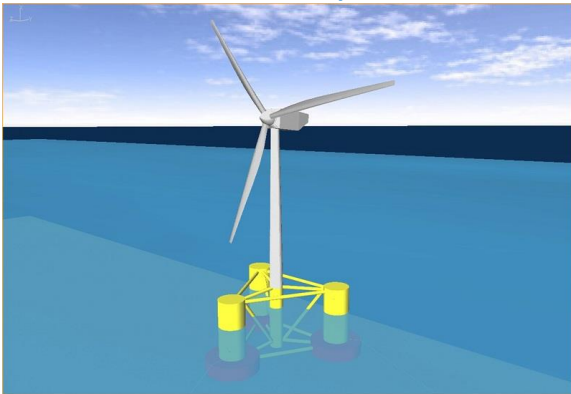
- Géothermie, Séquestration du CO2 : Ecoulement en milieux poreux, Transport réactif, Géomécanique, Pilotage des puits
- Réacteur chimique : Ecoulement, Conduction thermique, Chimie
- Eolienne flottante : Hydrodynamique, Interactions fluide-structure, Aérodynamique
- ...

● Verrous

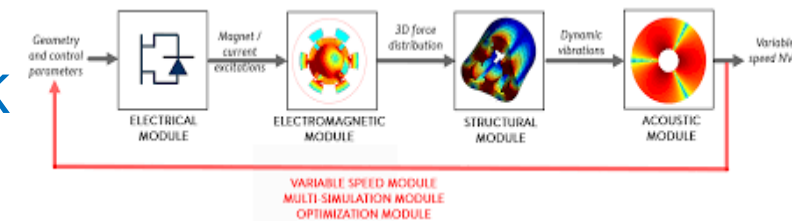
- Les différents modèles de simulation, des codes open-source ou pas :
 - sont des boîtes noires complexes
 - leur couplage est une affaire d'experts (impossibilité d'être expert sur tous les codes, indisponibilités de certains experts)
 - problèmes de portages (app disponibles sur un nombre OS limités, langages différents)
- Multitudes de formats non compatibles

● Constats

- La complexité de la mise en place des workflows est un frein à la mise en place de ce type de modélisation



CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

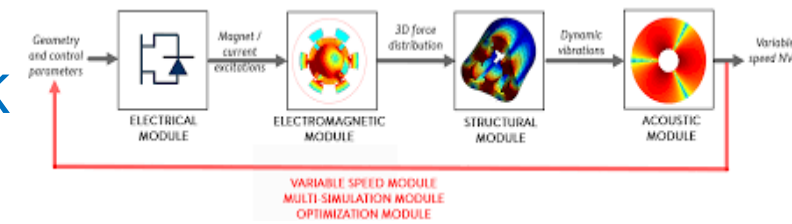


● Sommaire

● Contexte

● Revue des outils pour le couplage de code

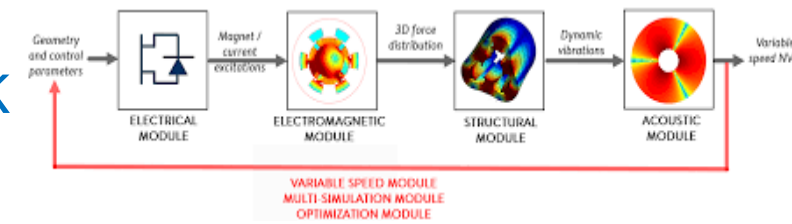
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Revue des frameworks de couplage :

- **ASCoDT** [1,2]: Advanced Scientific Computing Development Toolkit (Framework open-source)
 - intégré dans l'IDE Eclipse
 - Scientific Interface Definition Language (generation of C, C++, Java and Fortran technical code)
 - RMI and Socket based communication, Master-Slave architecture
- **ADVENTURE** [3]: ADVanced Engineering analysis Tool for Ultra large Real world (Framework open-source)
 - MPI based communication, [m,n] map client-server architecture
- **CWIPi** [4]: Coupling With Interpolation Parallel Interface (Framework open-source)
 - MPI based communication, coupleur statique centralisé, (C, C++ Fortran API)
 - Module d'interpolation entre maillages
- **EMPIRE** [6,7]: Enhanced Multi Physics Interface Research Engine
- **MpCCI** [8,9]: Mesh-based parallel Code Coupling Interface
 - Commercial code
 - Socket based communication, Parallel coupling Manage, C, Fortran API, code adapter
 - Module d'interpolation entre maillages
- **OASIS3-MCT** [15,16] (Framework open-source) orienté modélisation du climat
 - MPI based communication, Maillage non structuré 2D , module d'interpolation, bibliothèque de couplage
 - Support du format NetCDF

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Revue des frameworks de couplage :

● OpenPALM [5] (Framework open-source)

- Coupleur dynamique parallèle (couplage de code à niveau de parallélisme et de discrétisation en temps arbitraire)
- API C, C++ et fortran
- Module d'interpolation basé sur CWIPI (MPI based communication)

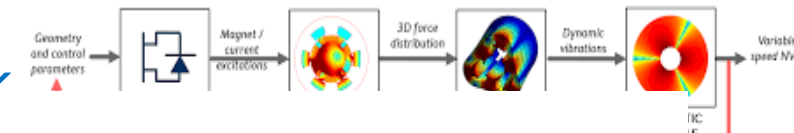
● MUSCLE [17,18] : Multiscale Coupling Library and Environment

● ONELAB [10] : Open Numerical Engineering LABoratory

● SALOME [11] : Simulation numérique par Architecture Logicielle en Open source et à Méthodologie d'Évolution

● preCISE [12,13,14] : Precise Code Interaction Coupling Environment (Framewok open-source)

- Coupleur dynamique parallèle
- MPI or Socket based communication, API C, C++ et fortran
- Module d'interpolation



● Revue des techno de couplage :

● Mapping des données

● Type de maillages

- 2D, 3D, Volumique, Surfaciques, formats

● Interpolations

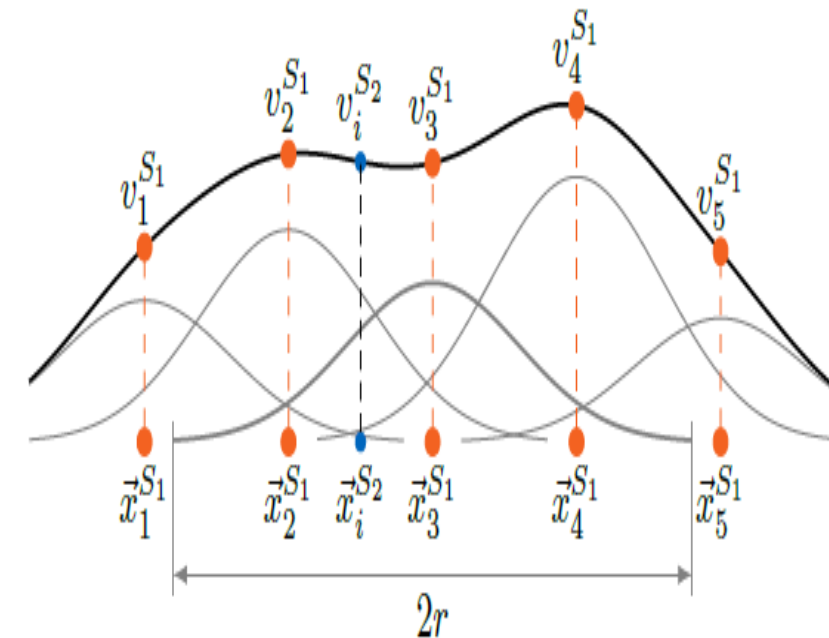
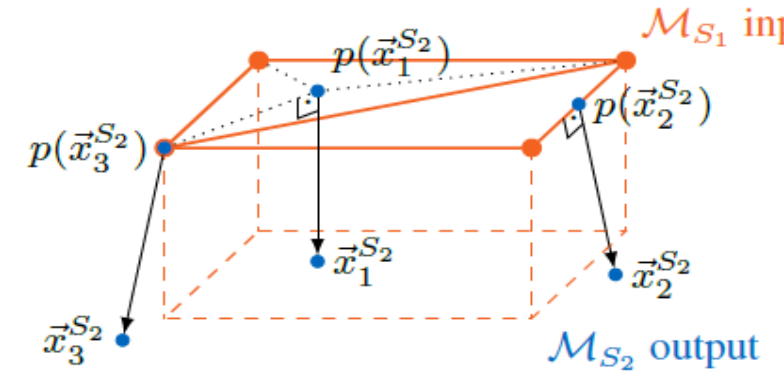
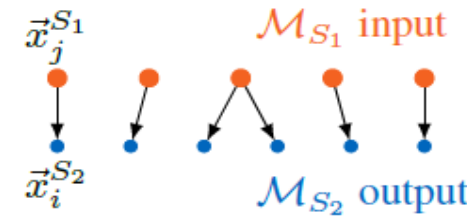
- Multi-maillage, conforme, semi-conforme, non conforme, matching/non matching

● Mapping methodes :

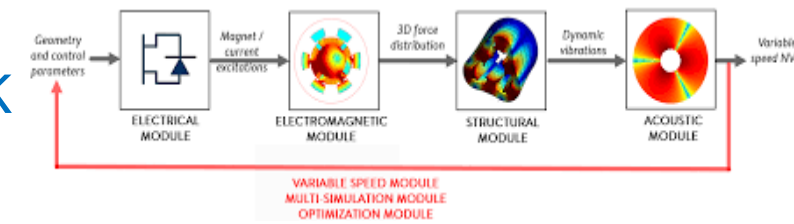
- Nearest-neighbour,
 - nécessite uniquement les nœuds (uid et coordonnées) des maillages
- Nearest-neighbour projection,
 - nécessite les nœuds (uid et coordonnées) et certaines connectivités des maillages
- Radial basis function (RBF)
 - Gaussian,
 - Global Thin Plate Spline, Compact Thin Plate Spline

● Consistent/Conservative

- Consistent : reproduit exactement un champ constant (variable intensive Pression, Température,...)
- Conservative : conserve la somme des champs (variable extensive : concentration, volume, force,...)



CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Revue des techno de couplage :

● Schéma de couplage, accélérateur numérique

● Communication : Uni-directionnel, bi-directionnel

● Schéma en temps :

● explicite/implicite

● Matching/non matching time stepping

● Matching : Les données sont échangées à chaque pas de temps

● Non matching : les données sont échnagées à la fin des fenêtre en temps

● Mutiplicatif/Additif, séquentiel/parallèle

● Multiplicatif : couplage séquentiel en général explicite

● Additif : permet un couplage parallèle implicite ou explicite

● Accélérateur du couplage implicite :

● Méthode itérative de type Point fixe,

● Accélération :

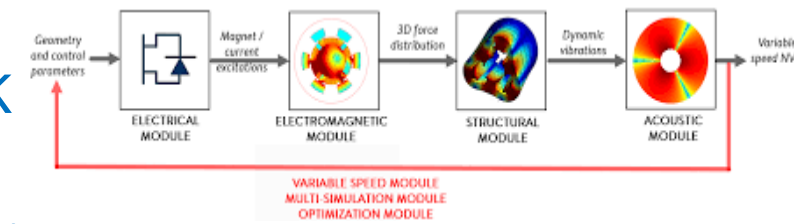
● Aiken under-relaxation (dépend uniquement des itérations précédentes)

● Schémas de type quasi-Newton

• Accélère la méthode avec une approximation de l'inverse de la jacobienne

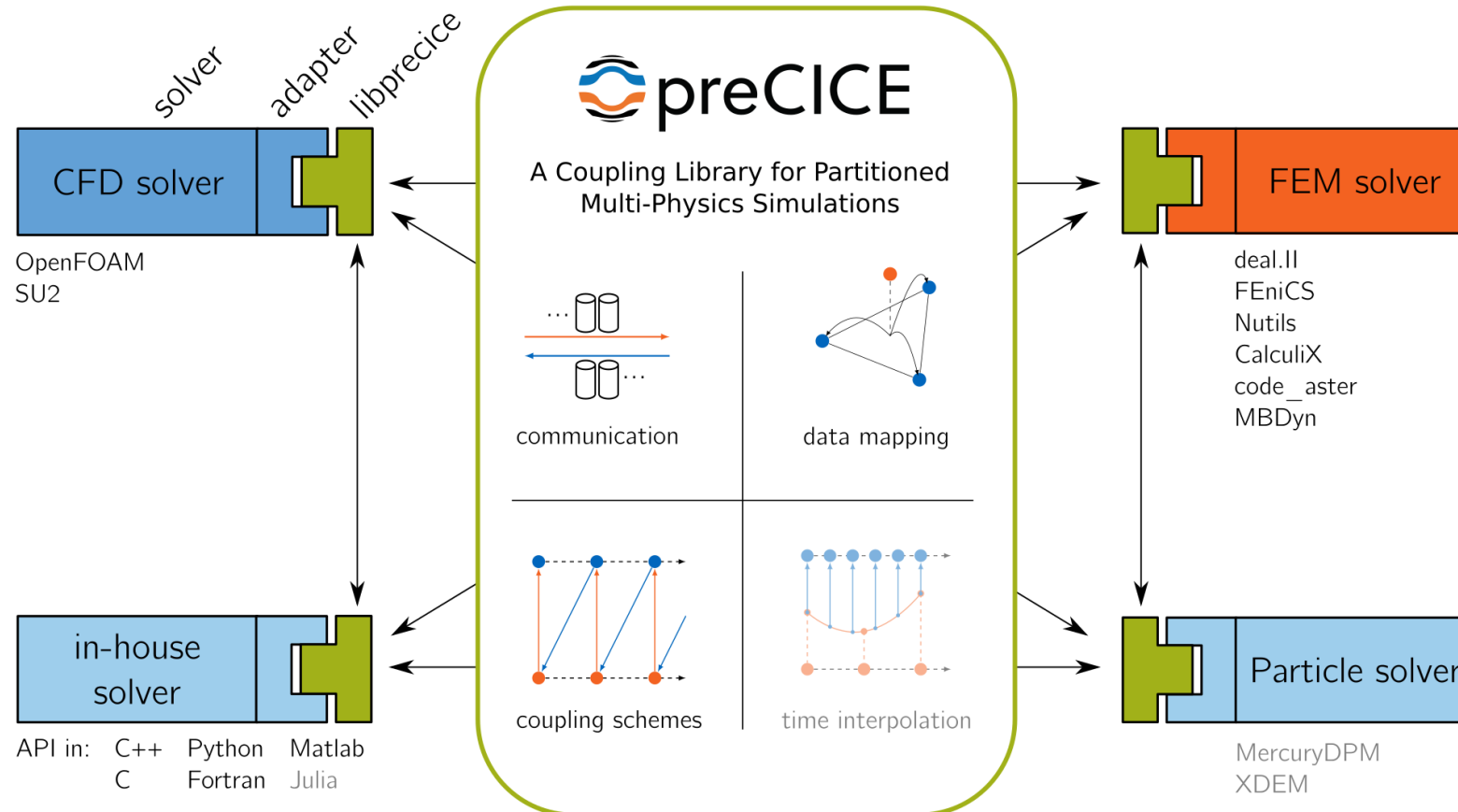
• Least square methods, Filtering technics pour évaluer l'inverse de la jacobienne

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

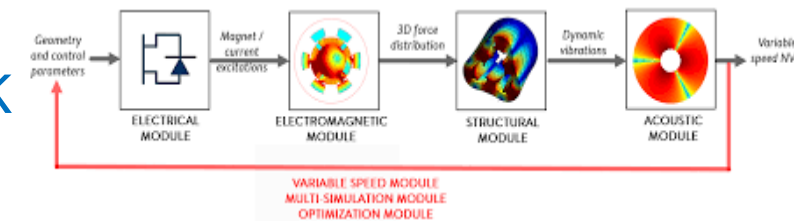


preCICE : (Stuttgart University and Technical University of Munich)

Principles

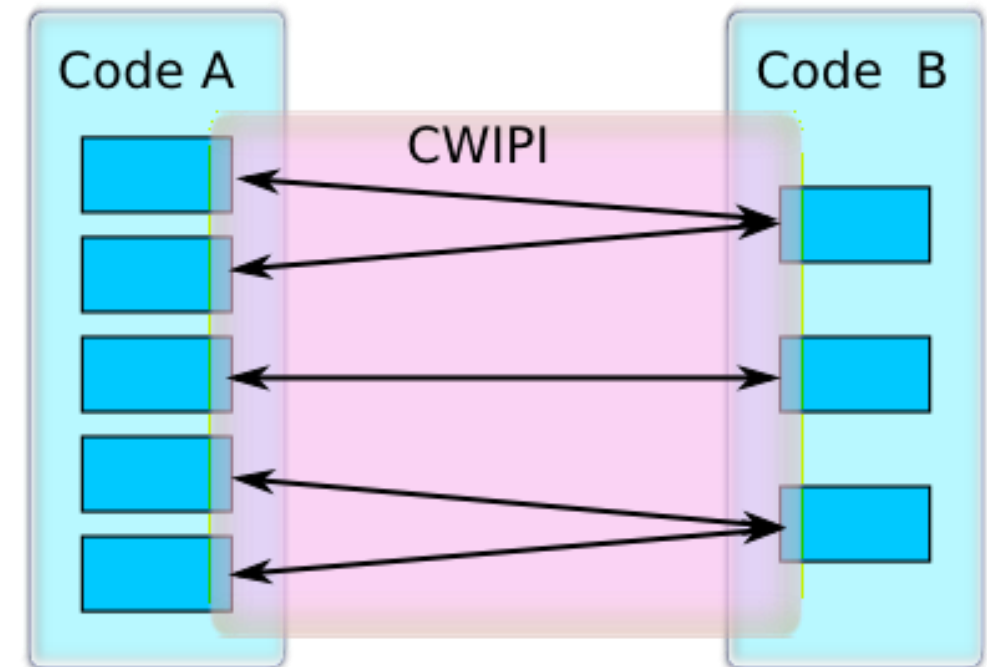
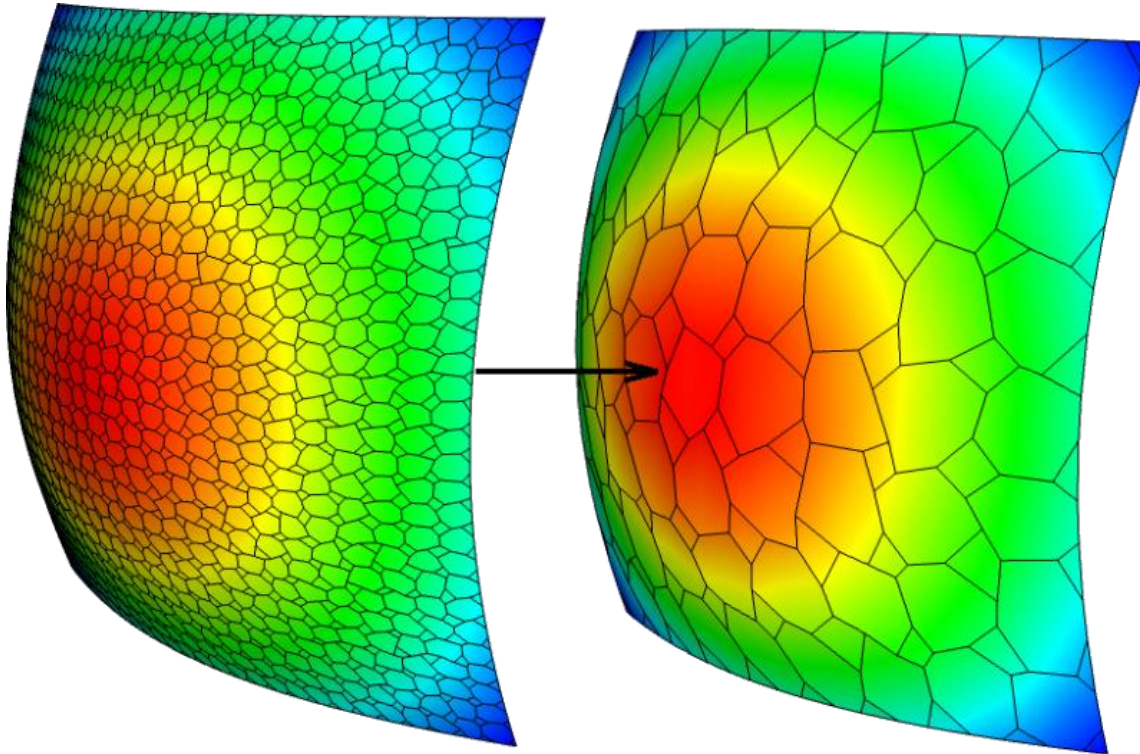


CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

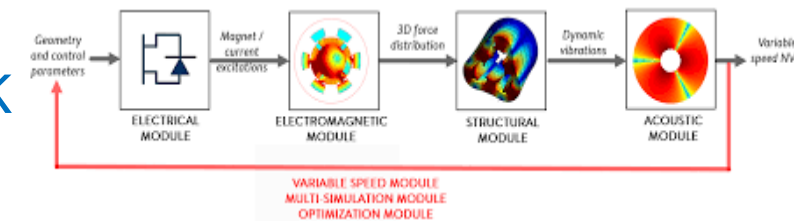


● **CWIPI** : (bibliothèque ONERA)

● Principes

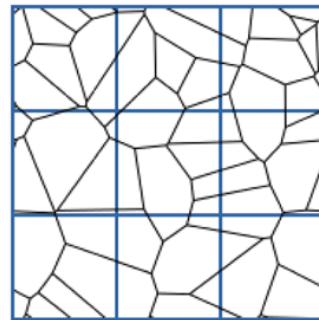


CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

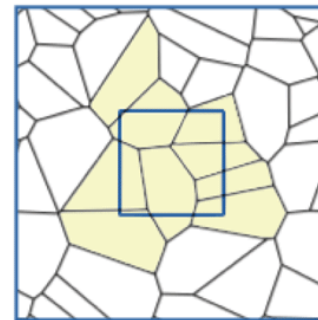


● PORTAGE : (Los Alamos National Laboratory)

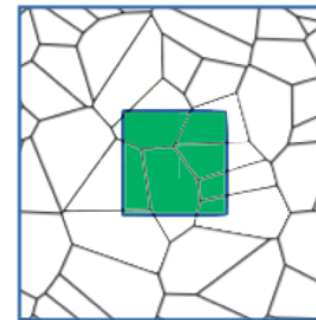
● Principes



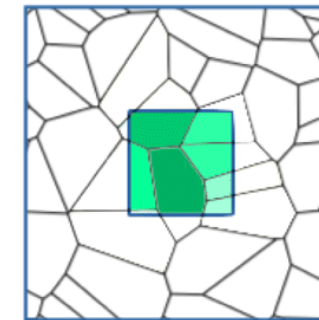
source: voronoi mesh
target: cartesian grid



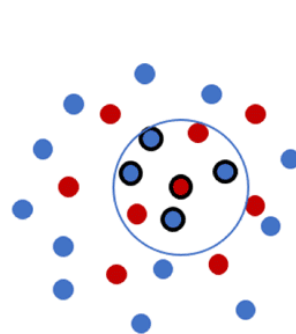
search for overlapping
source cells



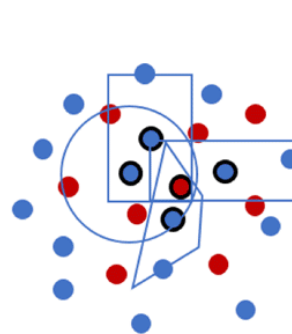
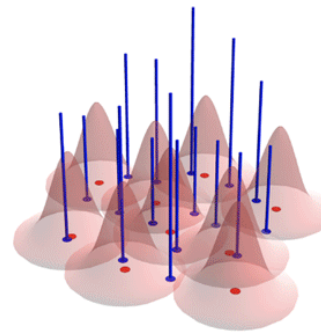
intersect cells,
compute weights



interpolate

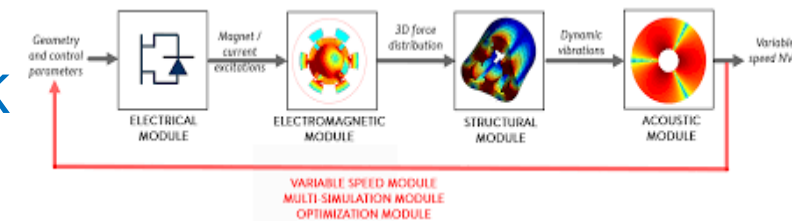


gather: shape function support
centered at target point (red)
it is evaluated at source points (blue).



scatter: shape functions supports
centered at sources points (blue)
they are evaluated at a target point (red).

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



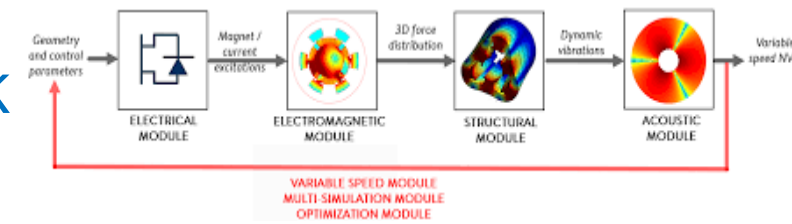
● Sommaire

● Contexte

● Revue des outils pour le couplage de code

● Intégration de preCICE dans ArcGeoSim

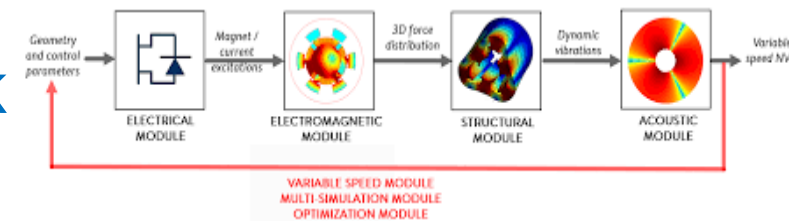
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Intégration de preCICE dans ArcGeoSim :

- Mise à disposition d'un service Arcane **CAWFMNG** pour le couplage avec d'autres codes:
 - En C++ ou Python ;
 - De type Arcane, OpenFOAM, Aster, ...
- Ce service met à disposition des fonctionnalités pour:
 - définir des zones de maillage de couplage
 - définir les variables arcane de couplage à échanger
 - paramétrer les algorithmes d'interpolation et les algorithmes numériques de couplages
 - gestion des maillages évolutifs
 - accéder aux fonctionnalités avancées disponibles dans **preCICE**
- Ce service est basé sur les mécanismes Arcane :
 - De retour en arrière multi-pas de temps
 - De gestion des sauvegardes et restaurations des variables Arcanes;
 - ...

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Sommaire

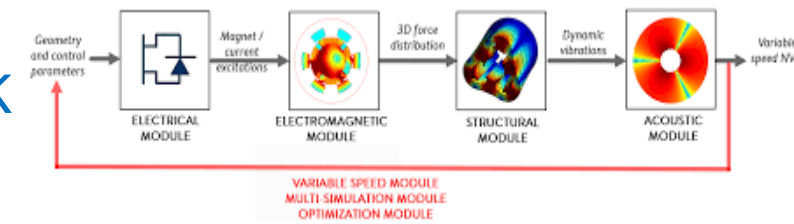
● Contexte

● Revue des outils pour le couplage de code

● Intégration de preCICE dans Arcane

● Quelques exemples d'application

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Exemples d'utilisation de preCICE avec des applications Arcane :

● Modèle de bassin :

● couplage A2 :

- Modèle de bassin ArcTem
- Modèle de géomécanique Aster

● Modèle de poro-élasticité :

● couplage de 2 modules Arcane :

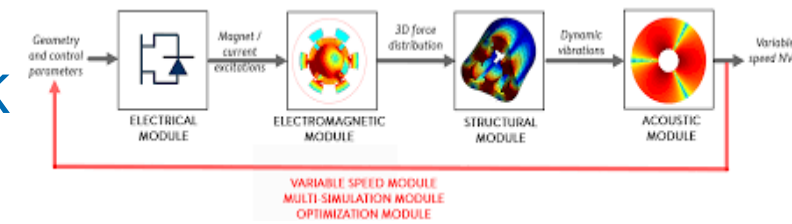
- **Module** d'Ecoulement **VF**
- **Module** d'Elasticité linéaire **VEM**

● Modèle pour la géothermie :

● couplage d'un modèle de réservoir avec un modèle de puits

- Application Arcane : **FraXim**
- Modèle de puits en python

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● A2 un code de couplage HydroMécanique:

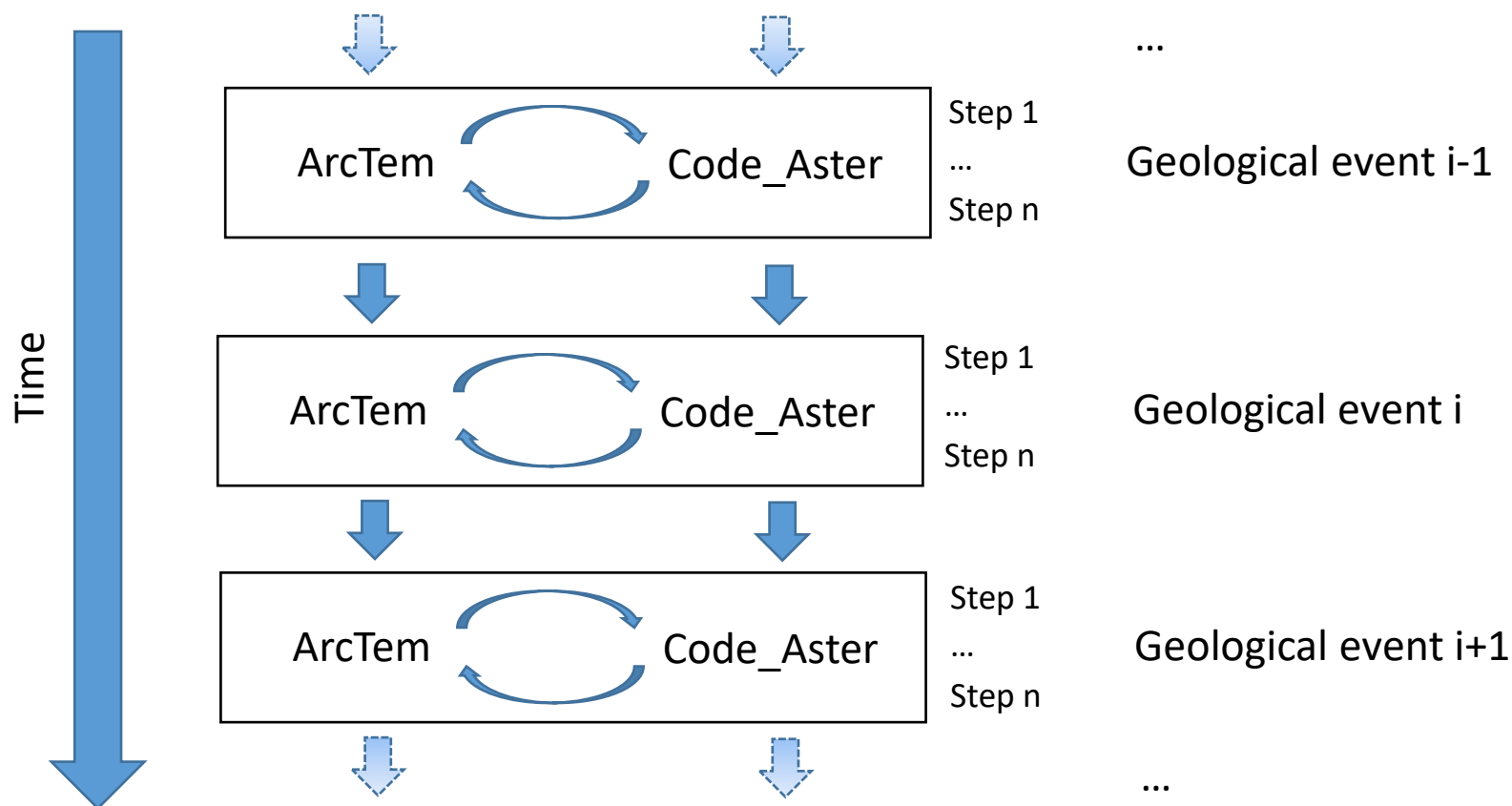
● ArcTem (IFPEN) – simulateur bassin

- Volumes finis
- Mécanique simplifiée 1D
- Elasticité linéaire

● Code_Aster (EDF R&D – convention de co-développement avec IFPEN) – code mécanique

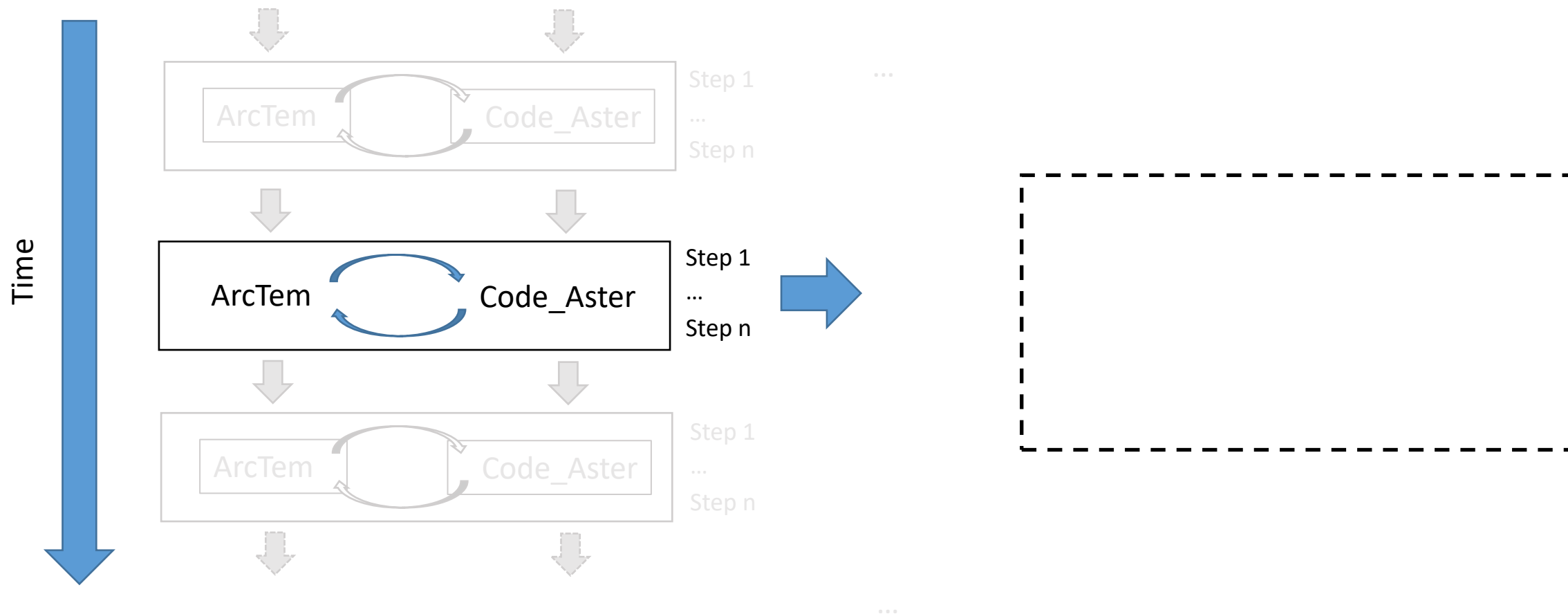
- Eléments finis
- Mécanique 3D
- Elasto-plasticité grandes transformations
- Fracturation et changement de perméabilité

- Le code prototype utilise un couplage faible itératif avec possibilité de démarrer la simulation avec un one-way



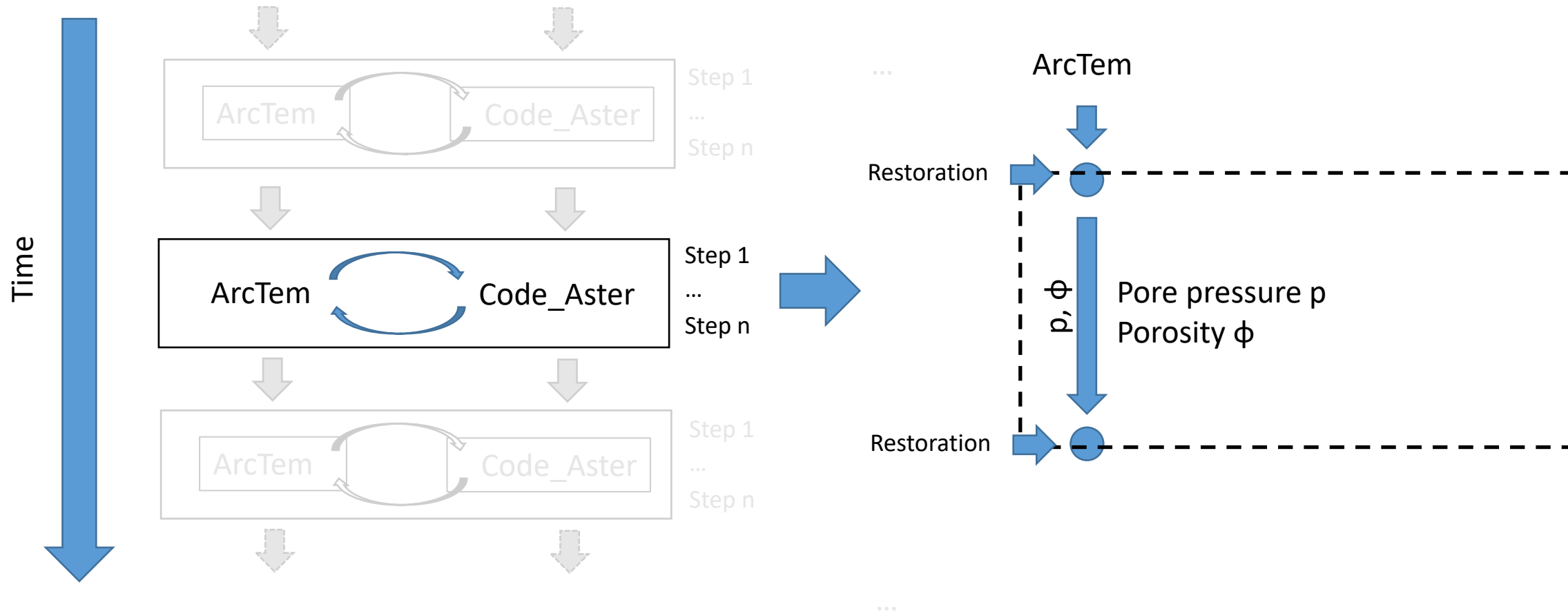
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

Hydrocarbures
responsables



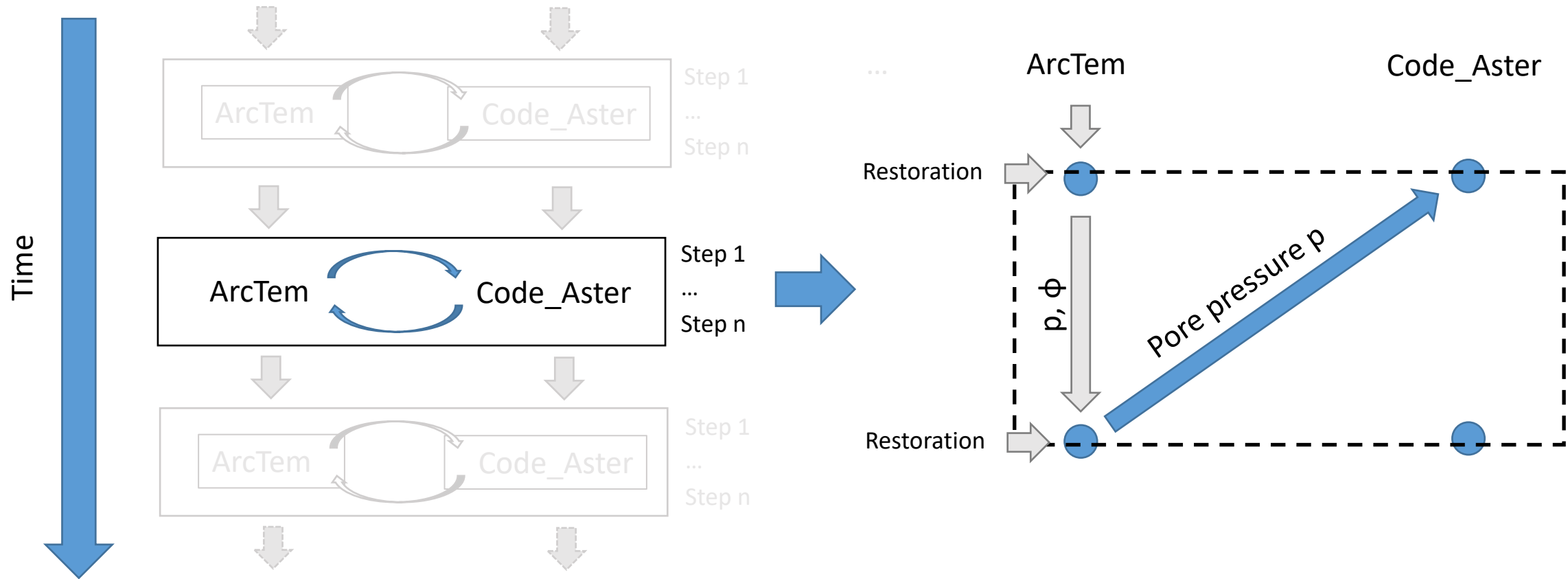
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

Hydrocarbures
responsables



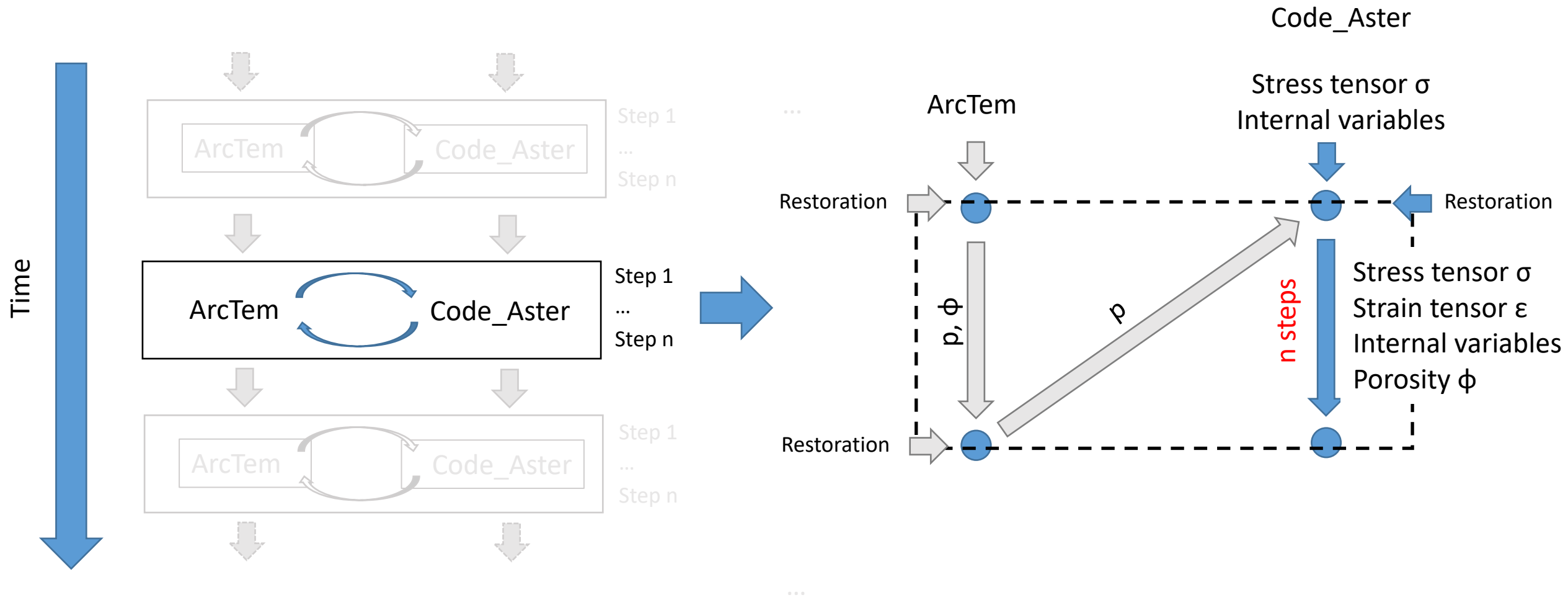
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

Hydrocarbures
responsables



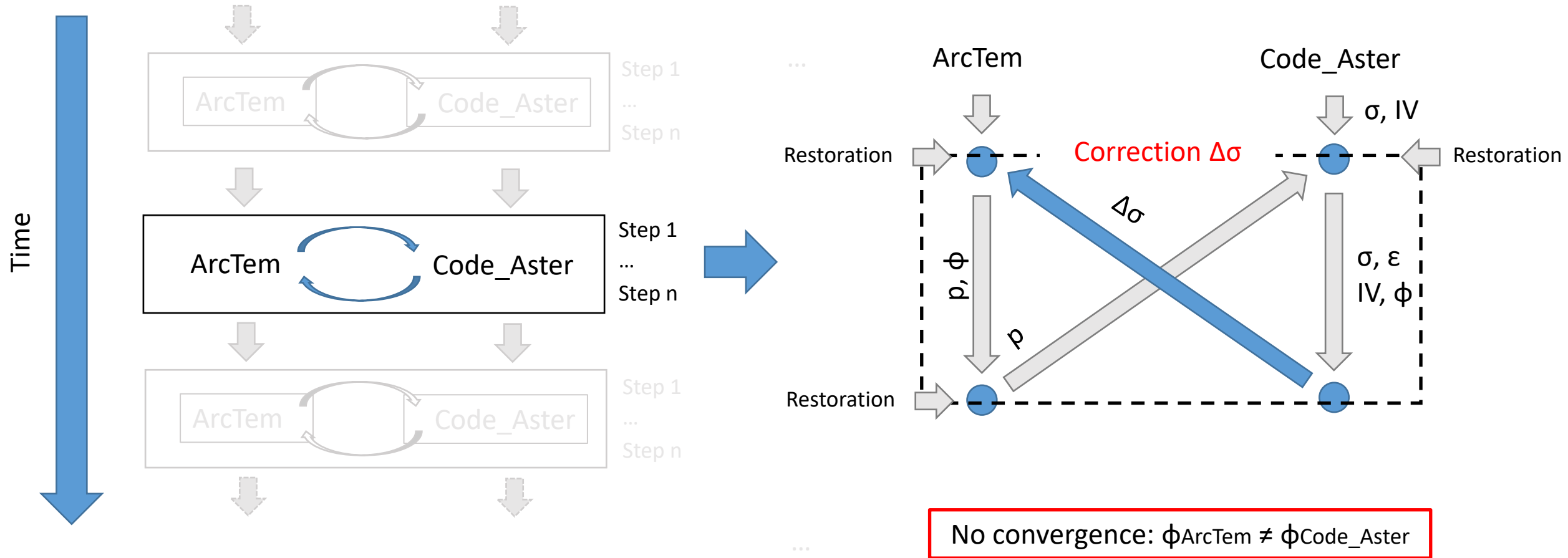
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

Hydrocarbures
responsables



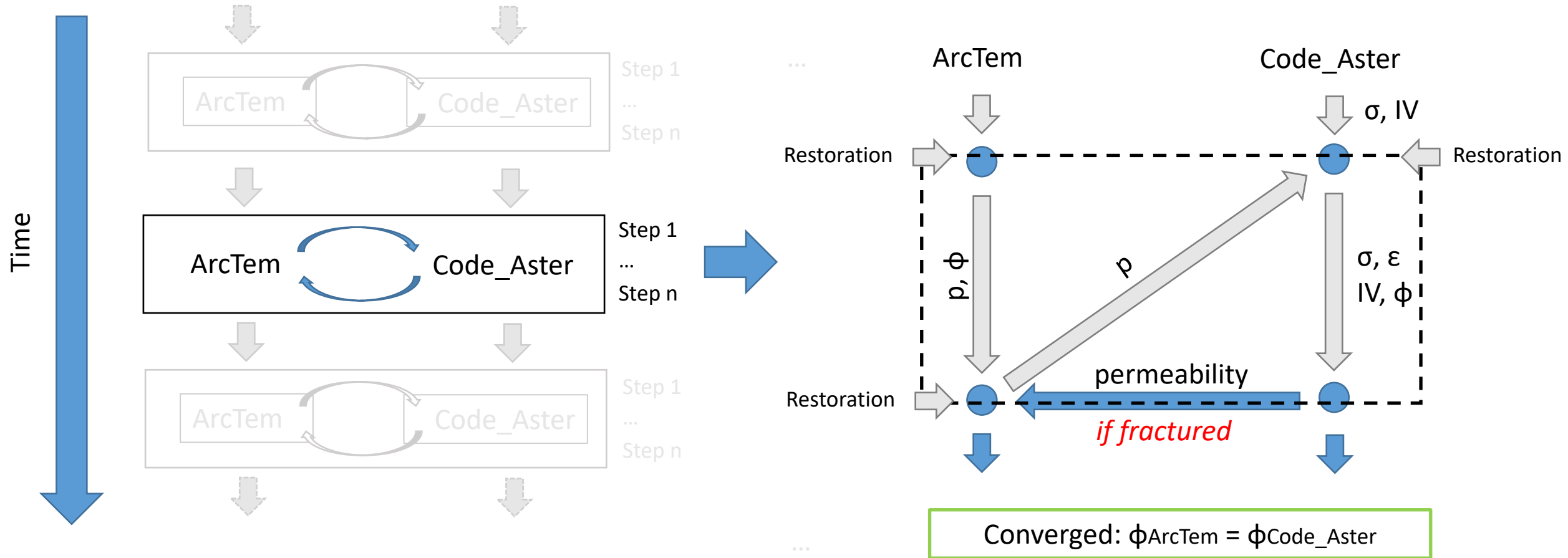
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

Hydrocarbures
responsables



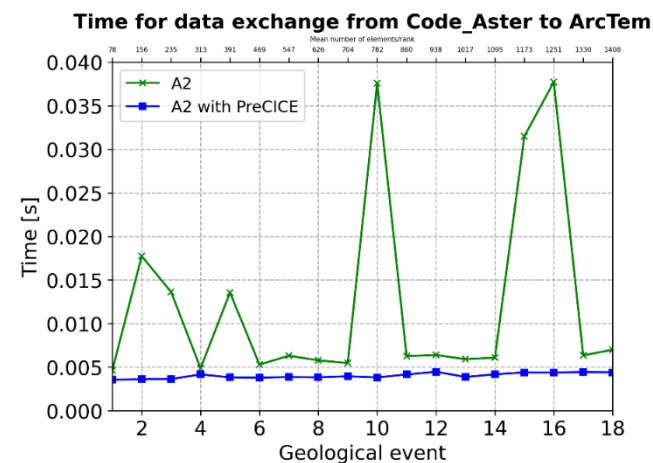
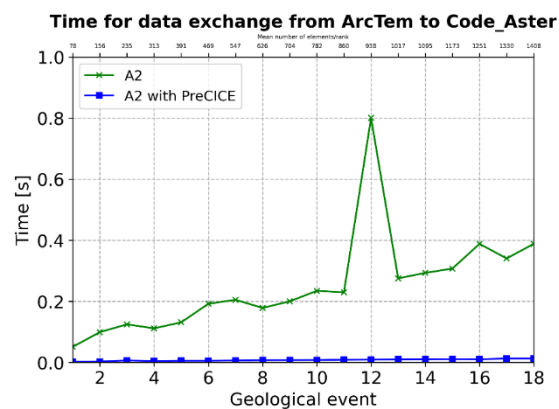
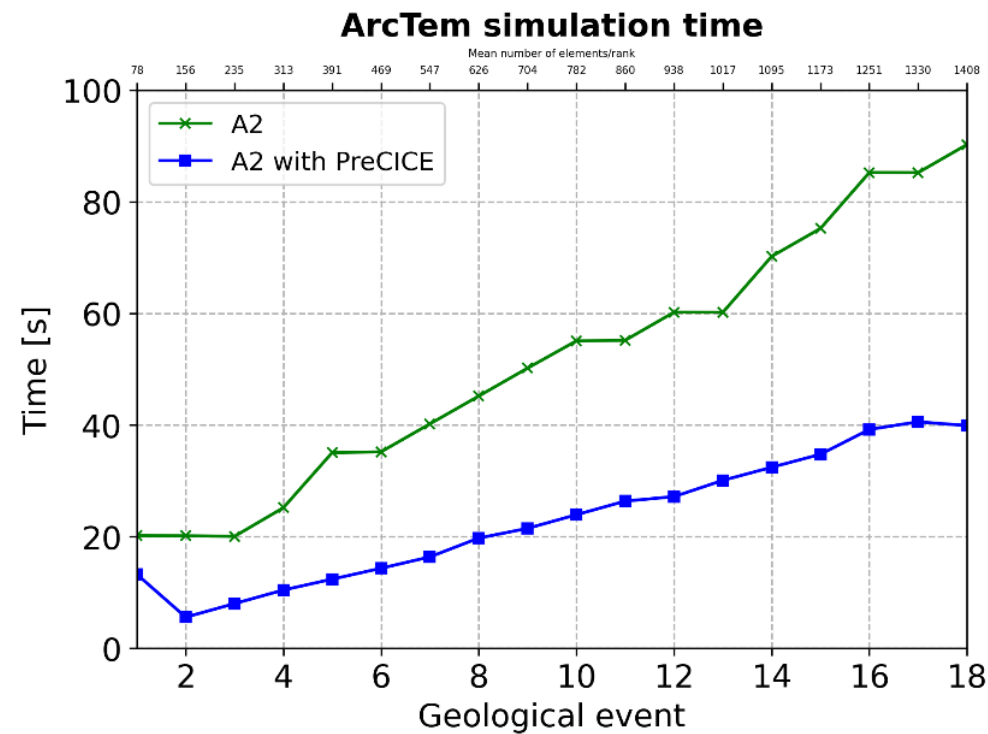
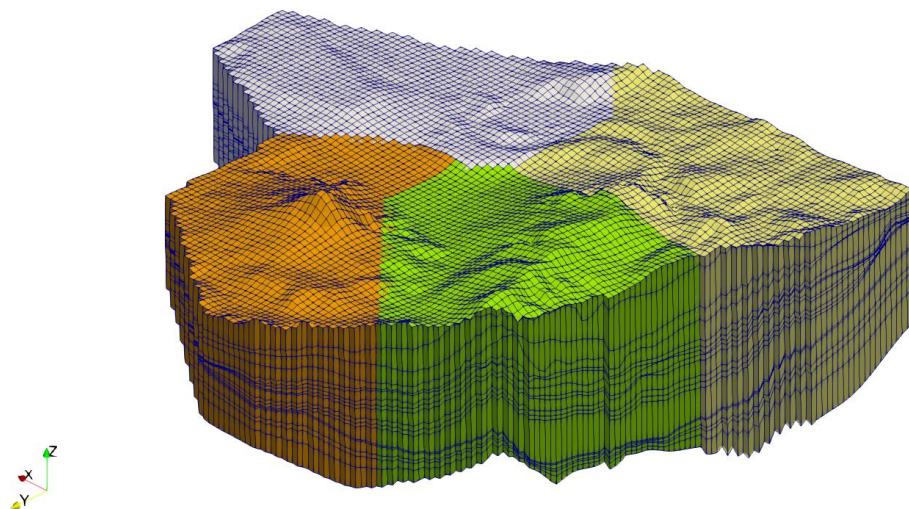
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

Hydrocarbures
responsables

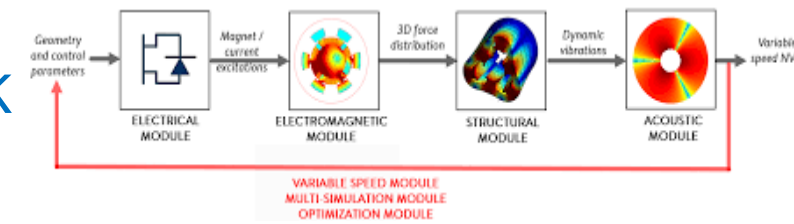


BASSIN DE NEUQUEN

Hydrocarbures
responsables



CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Exemples d'utilisation : Modèle de poro-élasticité

● Modèle d'élasticité linéaire de type VEM

Contrainte totale : $\sigma(u, p) = \sigma^e(u) - \alpha P Id$

Contrainte effective : $\sigma^e = C \epsilon(u)$ avec

$$\epsilon(u) = \frac{1}{2}(\nabla u + \nabla u^T)$$

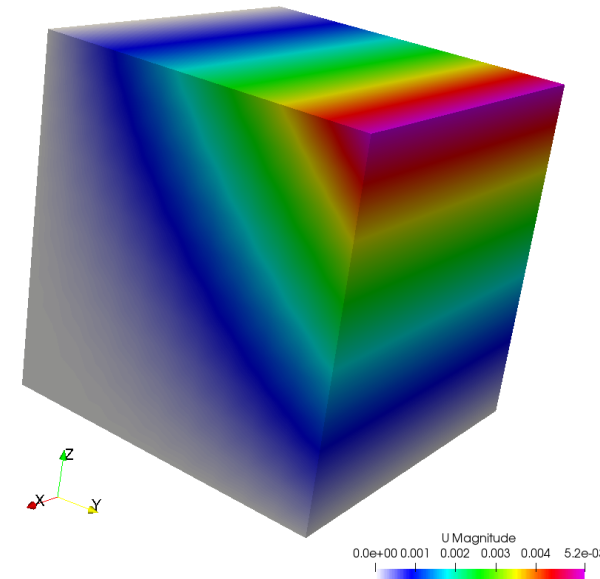
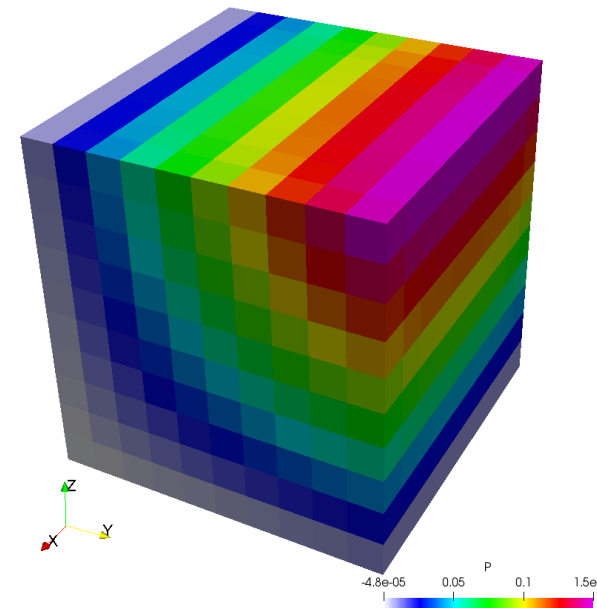
Equilibre mécanique : $-\text{div}(\sigma(u, p)) = f$

● Modèle d'écoulement de type FV

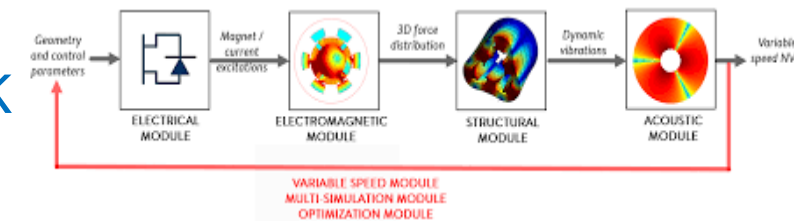
Conservation de la masse de fluide $c_0 P + \alpha \text{Div}(u)$

$$\partial_t(c_0 P + \alpha \text{div}(u)) + \text{div}(-\kappa(\nabla P - \rho g)) = q$$

avec c_0 la compressibilité et les conditions initiales et aux limites



CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Exemples d'utilisation : Modèle de poro-élasticité

● Résolution globale

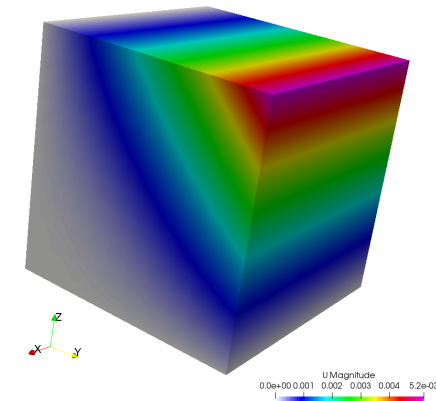
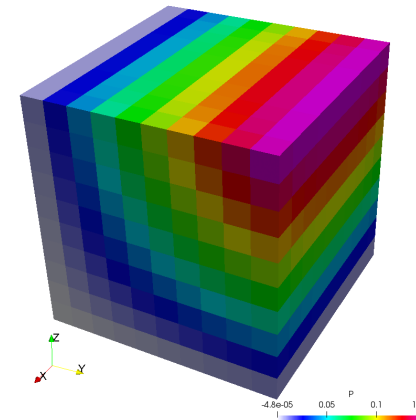
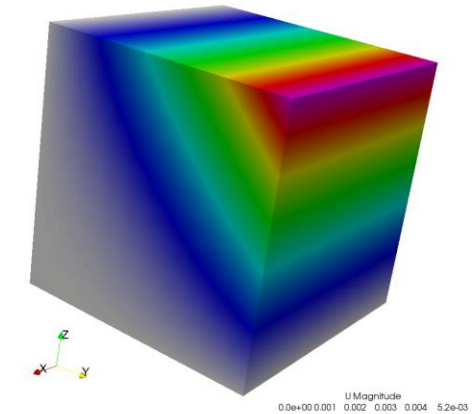
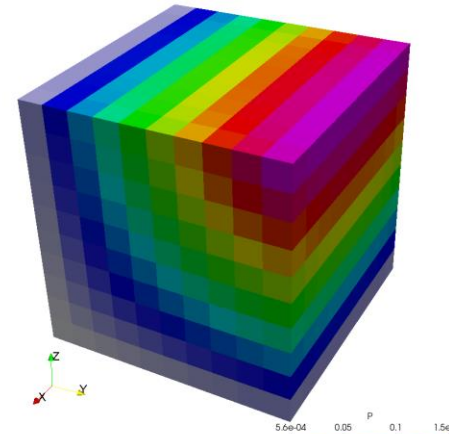
- Système linéaire global couplé
- Problème de point-selle
- Difficultés numériques

● Résolution découplée

- Méthode de splitting **Fixed-Stress Algo**

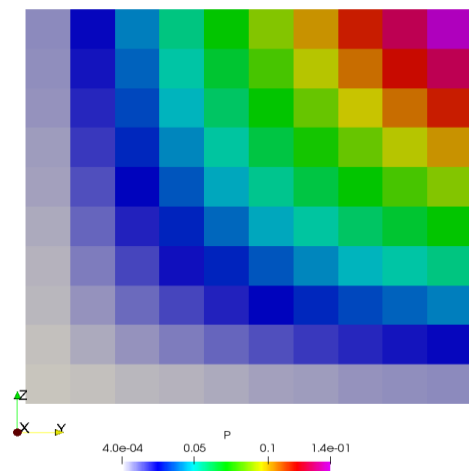
$$\sigma_v = \frac{1}{3} \text{tr}(\sigma) = \frac{1}{3} \text{tr}(\sigma_e - \alpha P) = K_{dr} \text{div } u - \alpha P$$

- 2 modules Arcane indépendants
- Algorithme de couplage itératif
- Echange des données:
 - Pression
 - Div(U)

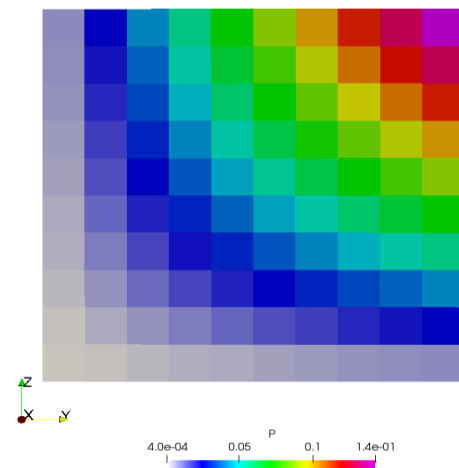


Comparaison 3D-2D preCICE

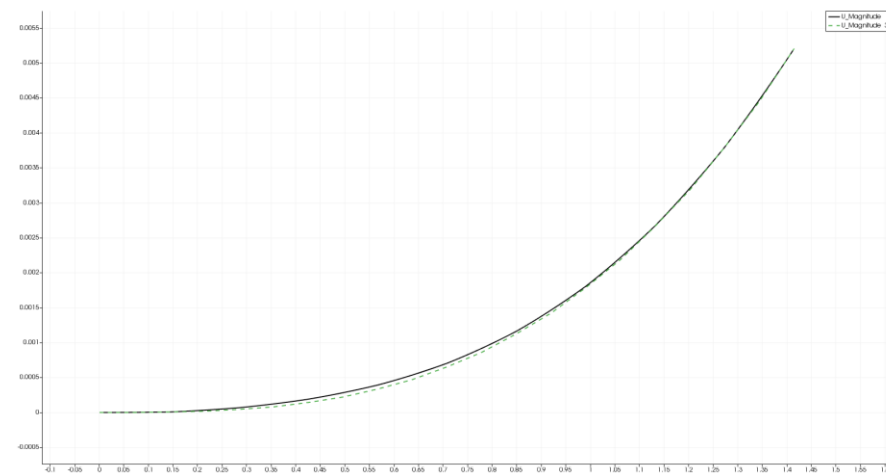
2D(O,y,z)



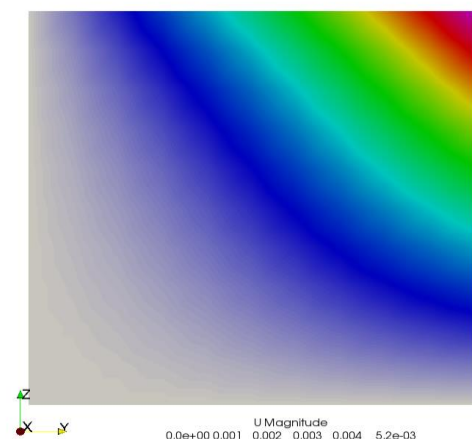
3D $n=(1,0,0)$ en $(0.5,0.5,0.5)$



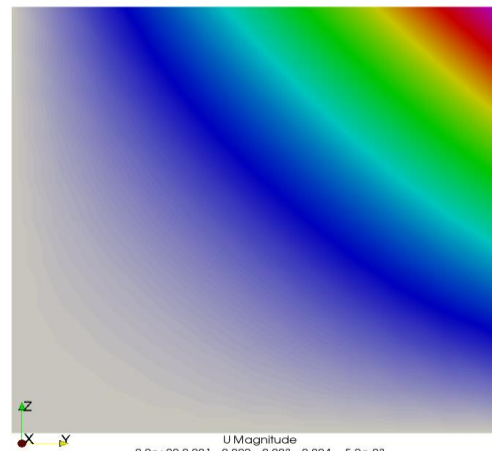
B



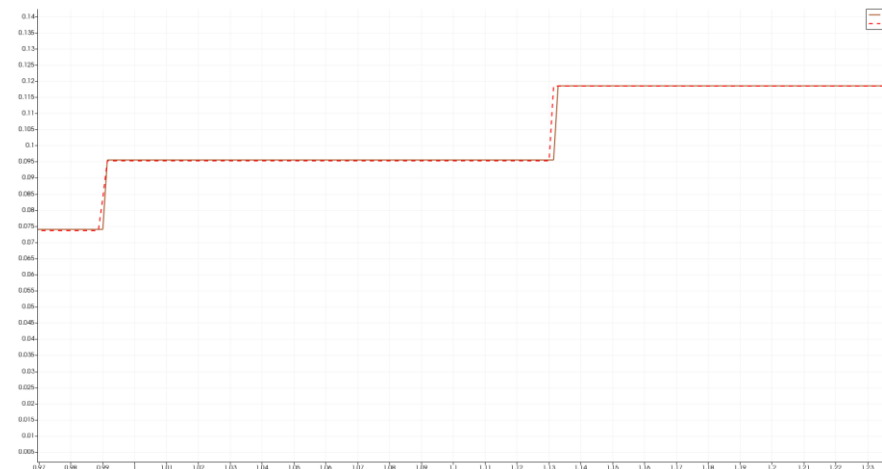
2D(O,y,z)



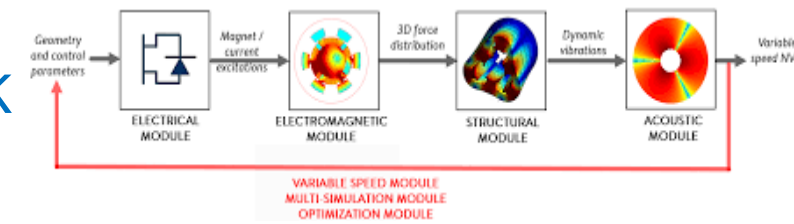
3D : origine $(0.5,0.5,0.5)$ $n=(1,0,0)$



A

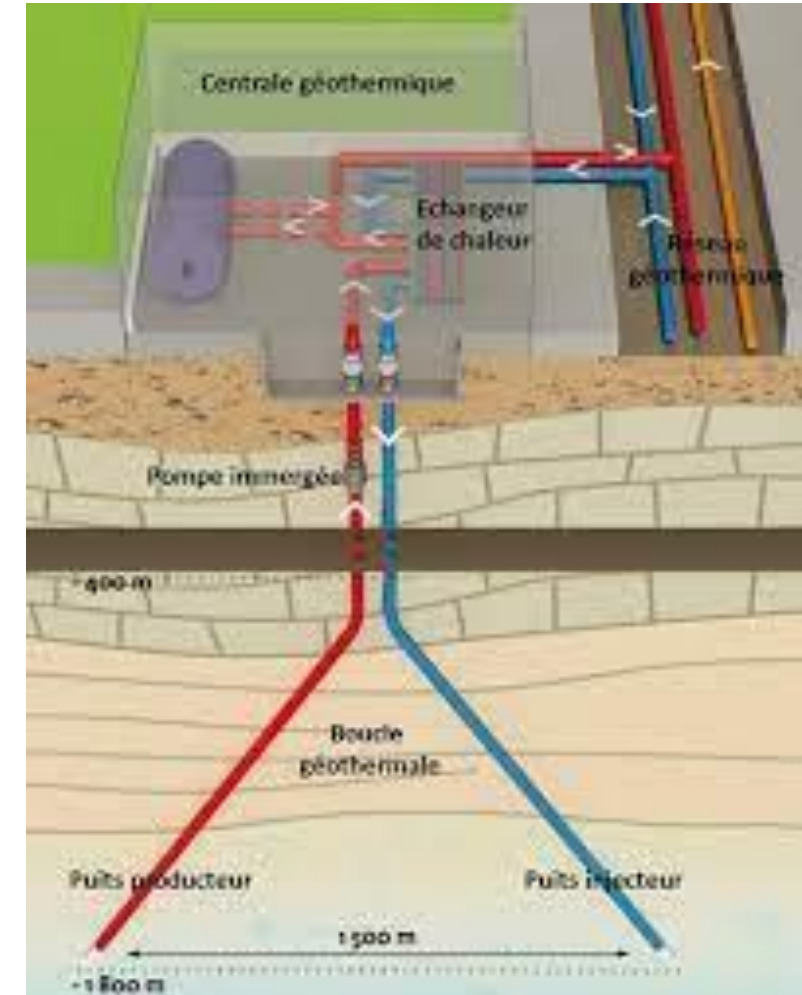


CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK

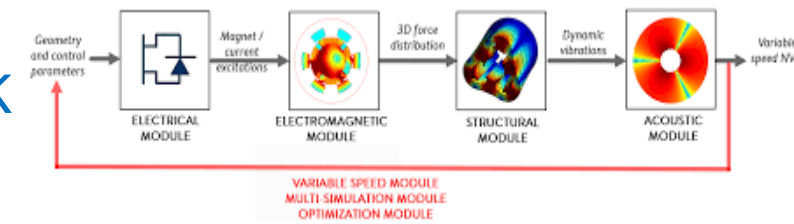


● Exemples d'utilisation : Géothermie

- **Modèle de réservoir basé sur Arcane : FraXim**
 - Calcul des champs de température
 - Calcul des flux de chaleurs
- **Modèle de puits avec installations de surface**
 - Champs de température le long du puits
 - Couplage avec les installations en surface



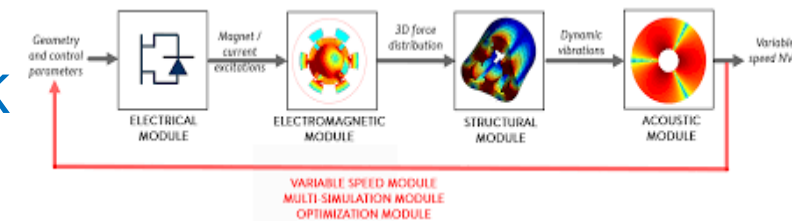
CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Bibliographie :

- [1] <http://www5.in.tum.de/ascodt>
- [2] A. Atanasov, H.-J. Bungartz, and T. Weinzierl. *A Toolkit for the Code Development in Advanced Computing*. Report, Technische Universität München (TUM), Munich, Germany, 2013.
- [3] <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/>
- [4] <http://sites.onera.fr/cwipi/>
- [5] F. Duchaine, S. Jauré, D. Poitou, E. Quémerais, G. Staffelbach, T. Morel, and L. Gicquel. “Analysis of High Performance Conjugate Heat Transfer with the OpenPALM Coupler”. *Computational Science & Discovery*, 2015.
- [6] <http://empire.st.bv.tum.de/>
- [7] T. Wang, S. Sicklinger, R. Wüchner, and K.-U. Bletzinger. “Concept and Realization of Coupling Software EMPIRE in Multiphysics Co-Simulation”. *Proceedings of the V International Conference on Computational Methods in Marine Engineering (Marine) 2013*, pp. 289–298, Hamburg, Germany, 2013.
<http://congress.cimne.com/marine2013/frontal/ProgSesion.asp?id=44>
- [8] <http://www.mpcci.de/>
- [9] *MpCCI 4.4.1-1 Documentation*. Documentation, Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing (SCAI), Sankt Augustin, Germany, 2015.

CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



Bibliographie :

- [10] C. Geuzaine, F. Henrotte, J.-F. Remacle, and R.V. Sabariego. “ONELAB: Bringing Open-Source Simulation Tools to Industry Design and Education”. Proceedings of the *Conference on the Computation of Electromagnetic Fields (COMPUMAG) 2015*, pp. 1–2, Montréal, Canada, 2015.
http://lirias.kuleuven.be/bitstream/123456789/479419/1/onelab_abstract_cmag2015.pdf
- [11] <http://www.salome-platform.org/>
- [12] <https://precice.org/>
- [13] Shukaev, A. K. (2015). A fully parallel process-to-process intercommunication technique for precice. Master's thesis, Institut für Informatik, Technische Universität München.
- [14] Chourdakis, G., Davis, K., Rodenberg, B., Schulte, M., Simonis, F., Uekermann, B., ... & Koseomur, O. Z. (2021). preCICE v2: A Sustainable and User-Friendly Coupling Library. arXiv preprint arXiv:2109.14470.
- [15] <http://verc.enes.org/oasis/>
- [16] A. Thévenin. *OASIS3-MCT & Open-PALM: 2 open source codes couplers*. Presentation, Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS), Toulouse, France, 2012.
- [17] <http://www.qoscosgrid.org/trac/muscle>
- [18] J. Borgdorff, M. Mamonski, B. Bosak, K. Kurowski, M. Ben Belgacem, B. Chopard, D. Groen, P.V. Coveney, and A.G. Hoekstra. “Distributed Multiscale Computing with MUSCLE 2, the Multiscale Coupling Library and Environment”. *Journal of Computational Science*, vol. 5, no. 5, pp. 719–731, Elsevier, 2014.

Innovater les énergies

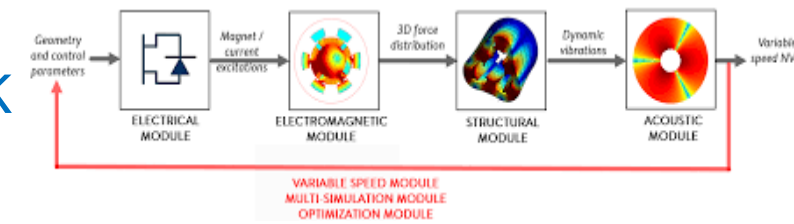
Retrouvez-nous sur :

 www.ifpenergiesnouvelles.fr

 @IFPENinnovation



CAWF : COUPLED APPLICATIONS WORKFLOW FRAMEWORK



● Solutions proposées :

● Inspirées du cloud computing

● Virtualisation et Containerisation :

- Solution aux problèmes de portage
- Application disponible à travers des container autonomes

● Orchestrateurs de containers:

- Scalabilité verticale et horizontal
- Gestions des ressources
- Tolérance aux pannes,...

● Serveurs de données

- Prise en charge des différents formats et
- Mise à disposition de convertisseur entre différentes représentations d'une même donnée

● Client léger

- Disponible à travers un navigateur web fonctionnant sur n'importe quel poste client

● Outils de Spécification des échanges de données

- Spécification d'interface avec un IDL
- Génération du code technique multi-langage (C++, python, java,...)

● Outils :

● buildah, podman, nomad

- RedHat, alternative à docker
- ROOTLESS et DAEMONLESS, solutions aux problèmes de sécurité que l'on reproche à Docker

● Django : pour une mise en place simple de la partie Webservice

● gRPC : Google Remote Call Precedure

- Spécification efficace et portable des échanges de données entre applications ou de type client-serveur

- $\frac{1}{\Delta t} \left(c_0(P^{l+1} - P^n) + \alpha (\operatorname{div} u^l - \operatorname{div} u^n) + \frac{\alpha^2}{K_{dr}} (P^{l+1} - P^l) \right) - \operatorname{div} (\kappa(\nabla P^{l+1} - \rho g)) = S$

Connaissant $(P^l, \operatorname{div} u^l) \rightarrow P^{l+1}$ on calcule la nouvelle valeur de P^{l+1} ;

- $-\operatorname{div} (2 \mu \epsilon(u^{l+1}) + \lambda \operatorname{div} u^{l+1} \operatorname{Id}) + \alpha \nabla P^{l+1} = f$

Connaissant P^{l+1} on calcule la nouvelle valeur de $\operatorname{div} u^{l+1}$, soit σ_v^{l+1} .

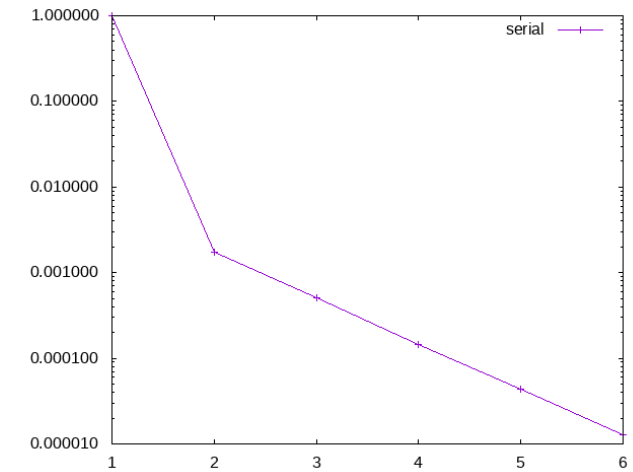
- Les variables échangées pendant le couplage sont P^{l+1} et $\alpha (\operatorname{div} u^l - \operatorname{div} u^n)$, $\frac{\alpha^2}{K_{dr}}$

avec le bulk modulus, $K_{dr} = \frac{2}{3} \mu + \lambda = \frac{E}{3(1-2\nu)}$ et α le coefficient de Biot.

Test1

Serial-implicit : 1 critère d'arrêt $\delta P = 1.e - 02$

Serial implicit	+ Acc cste=0,5
2 iter	2 iter



Parallel-implicit : 2 critères d'arrêt : $\delta P = 1.e - 02$ et $\delta div u = 1.e - 02$

Parallel-implicit	+ Acc Cste	Acc Aitken	Acc IQN-ILS
7 si 1 crit sinon 9	9 iter	12 iter	Div

