

Simulation numérique directe de la combustion turbulente

Adrien Guilbaud

14 septembre 2016

Maître de stage
Mme. Isabelle D'AST

Enseignant responsable
M. Samuel THIBAUT

Introduction

Présentation du stage
Parallélisation de NTMIX
Etude des performances
Conclusion

Présentation du Cerfacs
Mécanique des fluides numérique
Simulation de la turbulence

- Centre de recherche en calcul scientifique
- Actionnaires : Airbus Group, Cnes, EDF, Météo France, Onera, Safran et Total
- Résolution de problèmes scientifiques par la résolution numérique liés :
 - au climat
 - à l'aéronautique
 - au spatial
 - à l'environnement
- Équipe CSG + équipe CFD

Mécanique des fluides

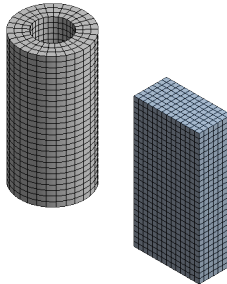
Étude du comportement des fluides lorsqu'ils sont en mouvement

- Résolution d'équations aux dérivées partielles
 - Fluides parfaits : Euler
 - Fluides newtoniens : Navier-Stokes (prix du millénaire)
- Mécanique des fluides numérique \Rightarrow discrétisation de l'espace

Mécanique des fluides

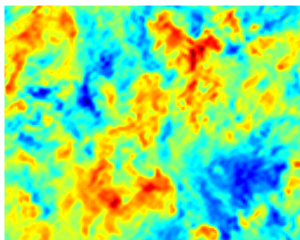
Étude du comportement des fluides lorsqu'ils sont en mouvement

- Résolution d'équations aux dérivées partielles
 - Fluides parfaits : Euler
 - Fluides newtoniens : Navier-Stokes (prix du millénaire)
- Mécanique des fluides numérique \Rightarrow discrétisation de l'espace

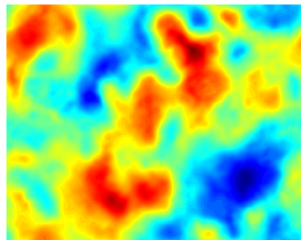


Écoulement turbulent \Rightarrow apparition de tourbillons instables

- *DNS* : Direct Numerical Simulation
- *LES* : Large Eddy Simulation



(a) DNS



(b) LES

NTMIX_CHEMKIN : solveur implicite d'écoulements réactifs

- bidimensionnel
- approche DNS
- résolution des équation de Navier-Stokes
- maillage structuré
- discrétisation temporelle (Runge-Kutta)

Utilité :

- Intérêt en recherche fondamentale
- Permet de développer des modèles de turbulence

Objectif

Développer une version 3D et parallèle de *NTMIX*

- Modernisation du code
- Développement de la version tridimensionnelle
- Parallélisation la version 3D
- Étude des performances

Objectif

Exécuter NTMIX sur de grands maillages ($\approx 10^9$ points)

Objectif

Exécuter NTMIX sur de grands maillages ($\approx 10^9$ points)

Limitations matérielles

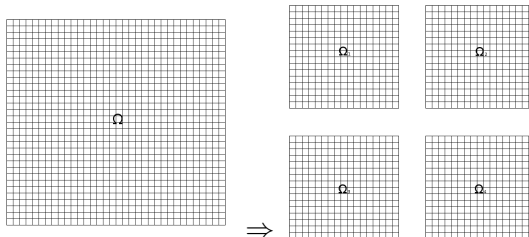
- Mémoire globale nécessaire :

$$10^9 pts \times (5 + 300) \times 8o \approx 2.2 \text{ To}$$

- Temps de calcul :

$$10^9 pts \times (4 \times 10^{-6})s/p \times 10000it \approx 463 \text{ jours}$$

- Décomposition du domaine
 - Division de la mémoire
 - Division de la charge de calcul
- MPI (*Message Passing Interface*)
- Topologie cartésienne



Problème

Des points manquent d'informations pour le calcul des dérivées

Problème

Des points manquent d'informations pour le calcul des dérivées

$$3\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-1} + 9\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + 3\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1} = \frac{1}{h} \left(\frac{1}{4}(u_{i+2} - u_{i-2}) + 7(u_{i+1} - u_{i-1}) \right)$$

...	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}	u_{i+3}	...
...	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-3}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-2}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-1}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_i$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+1}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+2}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+3}$...

Problème

Des points manquent d'informations pour le calcul des dérivées

$$3\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i-1} + 9\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_i + 3\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1} = \frac{1}{h} \left(\frac{1}{4}(\underline{u_{i+2}} - \underline{u_{i-2}}) + 7(\underline{u_{i+1}} - \underline{u_{i-1}}) \right)$$

...	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}	u_{i+3}	...
...	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-3}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-2}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-1}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_i$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+1}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+2}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+3}$...

Problème

Des points manquent d'informations pour le calcul des dérivées

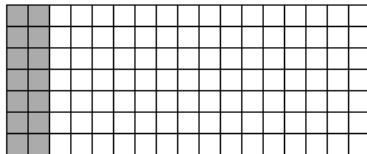
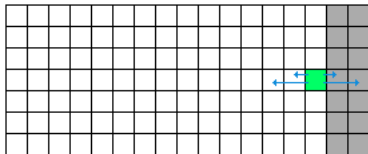
$$3 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-1} + 9 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + 3 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1} = \frac{1}{h} \left(\frac{1}{4} (\underline{u_{i+2}} - \underline{u_{i-2}}) + 7(\underline{u_{i+1}} - \underline{u_{i-1}}) \right)$$

...	u_{i-3}	u_{i-2}	u_{i-1}	u_i	u_{i+1}	u_{i+2}	u_{i+3}	...
...	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-3}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-2}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i-1}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_i$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+1}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+2}$	$\frac{\partial u}{\partial x}_{i+3}$...

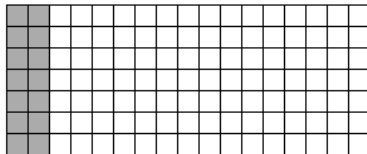
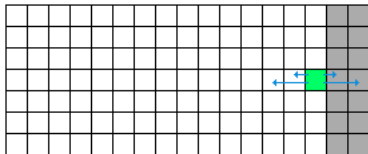
Recouvrement de domaines



Recouvrement de domaines



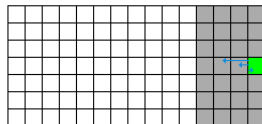
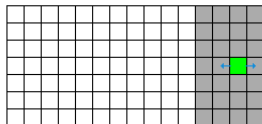
Recouvrement de domaines



- La taille du recouvrement dépend de l'ordre du schéma
- *NTMIX* \Rightarrow schéma d'ordre élevé

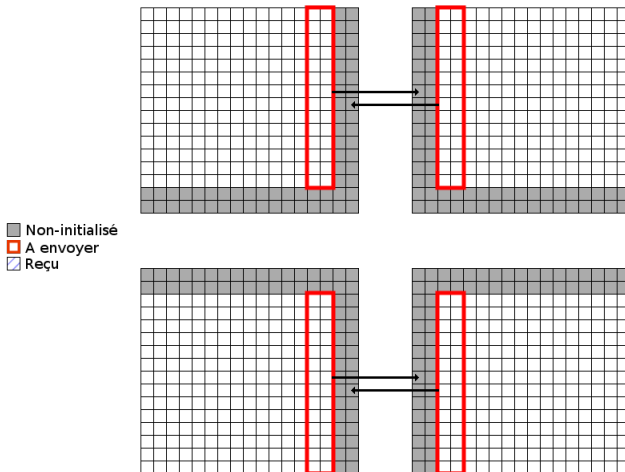
Traitement des bordures internes

- Traitement des bordures des sous-domaines ?
- Utilisation d'un schéma décentré
- Réduction de l'influence des bordures internes



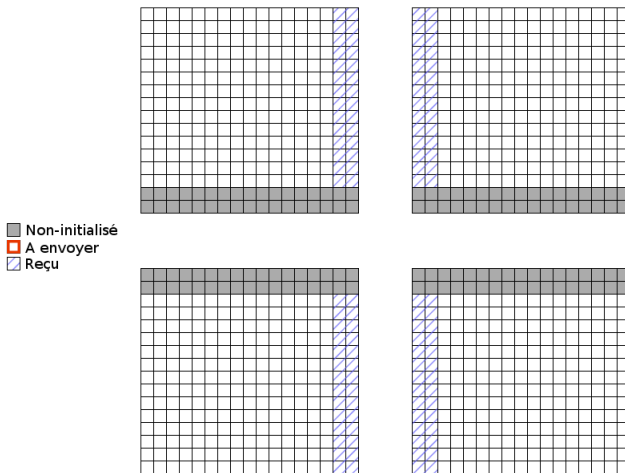
Échange des points de recouvrement

Communications sur x



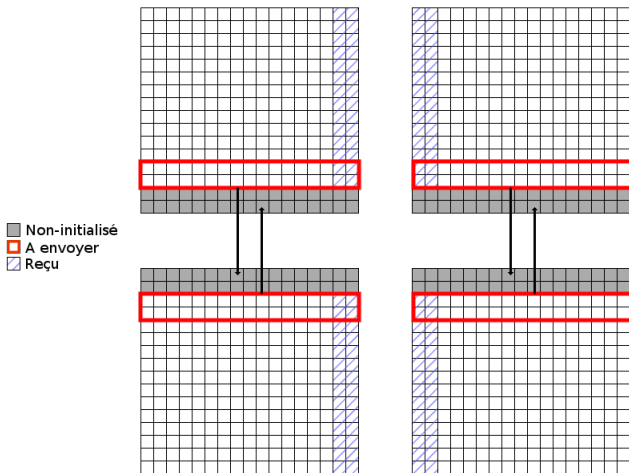
Échange des points de recouvrement

Synchronisation



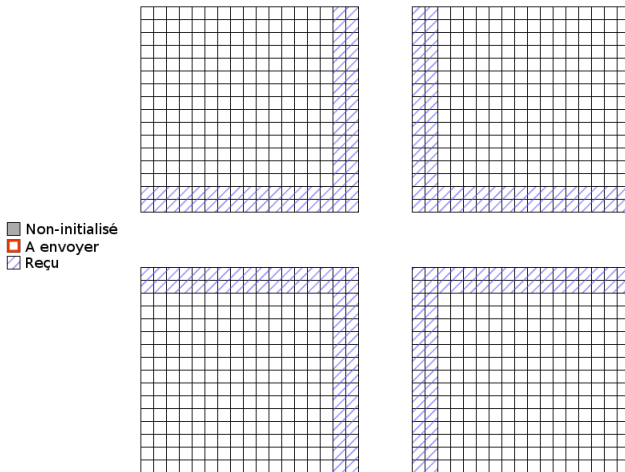
Échange des points de recouvrement

Communications sur y



Échange des points de recouvrement

État après les communications



Bilan

- Schémas moins précis sur les frontières
- 1 communication des points de recouvrement/itération de Runge-Kutta
- Couplage faible
- Duplication du calcul des points de recouvrement

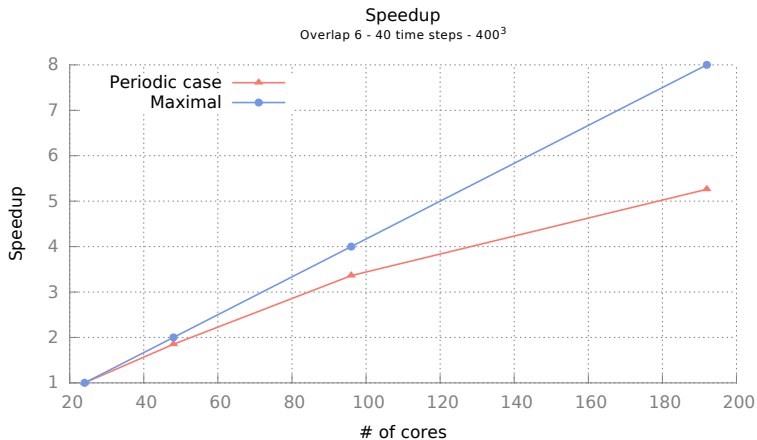
Scalabilité forte :

- domaine global de 400^3
- augmentation progressive du nombre de nœuds

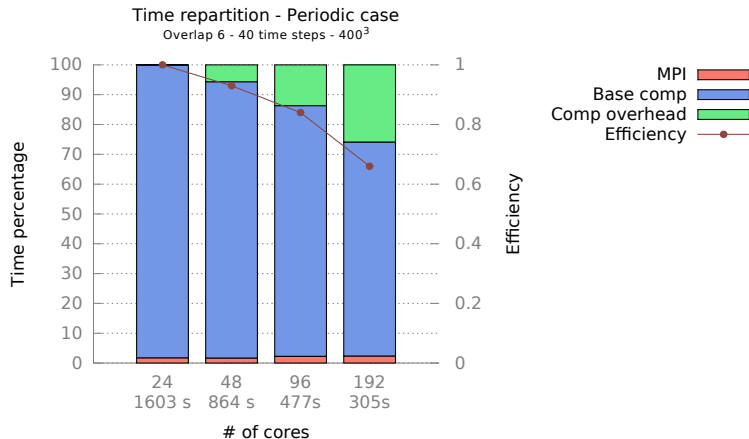
Speedup :

$$S = \frac{t_1}{t_n}$$

- Intel Haswell bi-socket, 12 coeurs 2.5GHz



- Intel Haswell bi-socket, 12 coeurs 2.5GHz



- Version tridimensionnelle de *NTMIX*
- Version parallèle
- Améliorations encore possibles
 - Version hybride OpenMP + MPI

Merci