

# Simulation numérique directe de la combustion turbulente

Adrien Guilbaud

23 septembre 2016

Maître de stage  
Mme. Isabelle D'AST

Enseignant responsable  
M. Samuel THIBAUT

- 1 Introduction
  - Présentation du Cerfacs
  - Mécanique des fluides numérique
  - Simulation de la turbulence
- 2 Présentation du stage
  - NTMIX\_CHEMKIN
  - Objectifs
- 3 Parallélisation de NTMIX
  - Décomposition de domaine
  - Communications
- 4 Etude des performances
  - Scalabilité forte
- 5 Conclusion

- 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

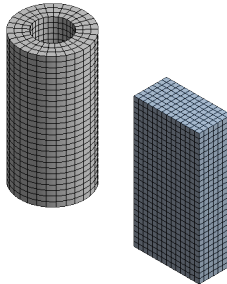
### Étude du comportement des fluides lorsqu'ils sont en mouvement

- 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

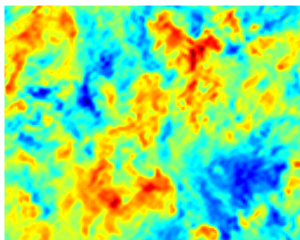
### Étude du comportement des fluides lorsqu'ils sont en mouvement

- 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

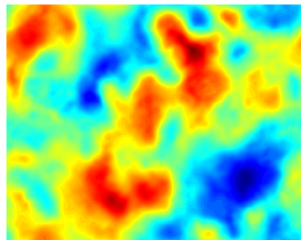


Écoulement turbulent  $\Rightarrow$  apparition de tourbillons instables

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



(a) DNS



(b) LES

- 1 Introduction
  - Présentation du Cerfacs
  - Mécanique des fluides numérique
  - Simulation de la turbulence
- 2 Présentation du stage
  - NTMIX\_CHEMKIN
  - Objectifs
- 3 Parallélisation de NTMIX
  - Décomposition de domaine
  - Communications
- 4 Etude des performances
  - Scalabilité forte
- 5 Conclusion

*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

- 1 Introduction
  - Présentation du Cerfacs
  - Mécanique des fluides numérique
  - Simulation de la turbulence
- 2 Présentation du stage
  - NTMIX\_CHEMKIN
  - Objectifs
- 3 **Parallélisation de NTMIX**
  - Décomposition de domaine
  - Communications
- 4 Etude des performances
  - Scalabilité forte
- 5 Conclusion

## Objectif

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

## Objectif

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

## Limitations matérielles

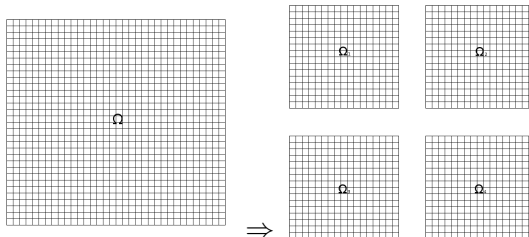
- Mémoire globale nécessaire :

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

- 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

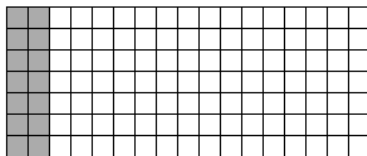
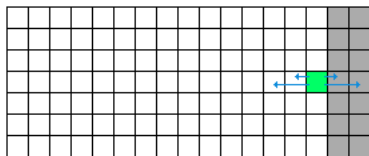
$$3 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-1} + 9 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_i + 3 \left( \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1} = \frac{1}{h} \left( \frac{1}{4} (\underline{u_{i+2}} - \underline{u_{i-2}}) + 7(\underline{u_{i+1}} - \underline{u_{i-1}}) \right)$$

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

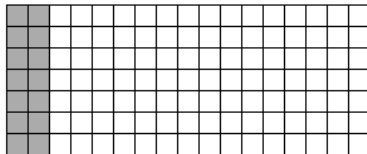
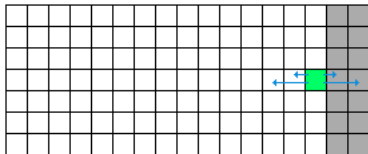
# Recouvrement de domaines



# Recouvrement de domaines



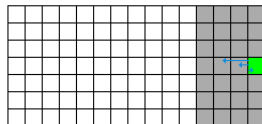
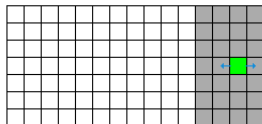
## Recouvrement de domaines



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

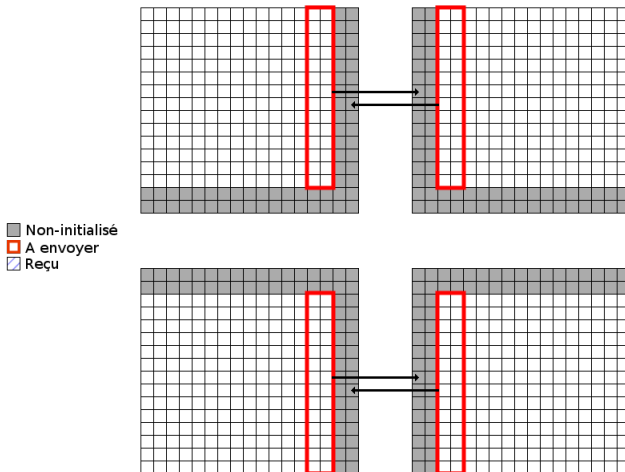
# Traitement des bordures internes

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



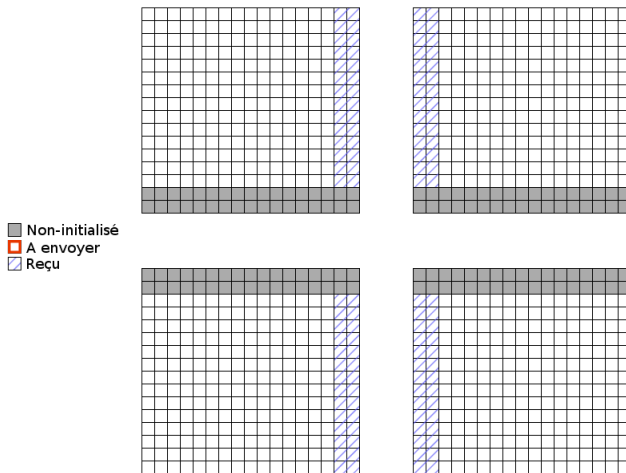
# Échange des points de recouvrement

## Communications sur $x$



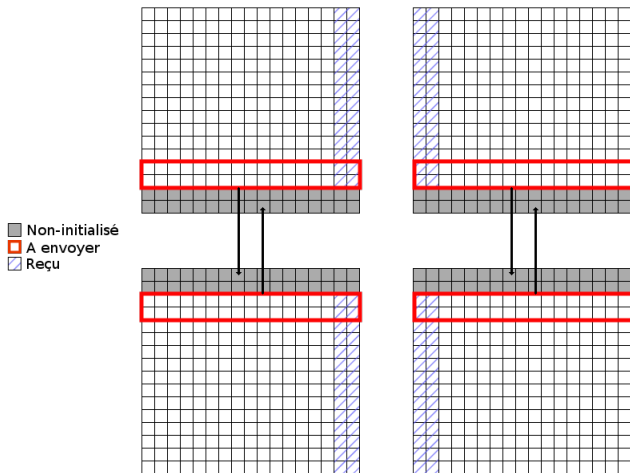
# Échange des points de recouvrement

## Synchronisation



# Échange des points de recouvrement

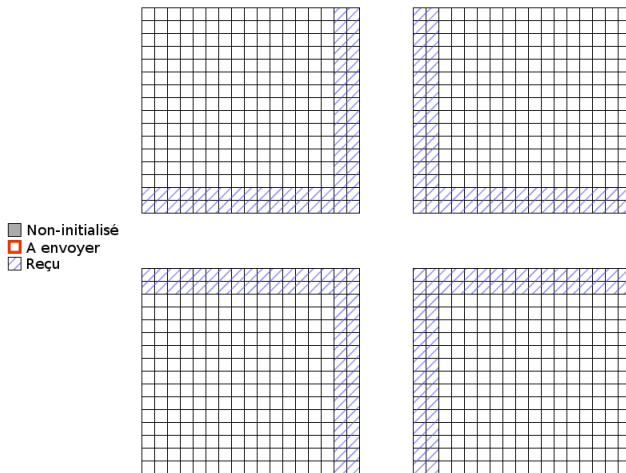
## Communications sur y





# 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

- 1 Introduction
  - Présentation du Cerfacs
  - Mécanique des fluides numérique
  - Simulation de la turbulence
- 2 Présentation du stage
  - NTMIX\_CHEMKIN
  - Objectifs
- 3 Parallélisation de NTMIX
  - Décomposition de domaine
  - Communications
- 4 Etude des performances
  - Scalabilité forte
- 5 Conclusion

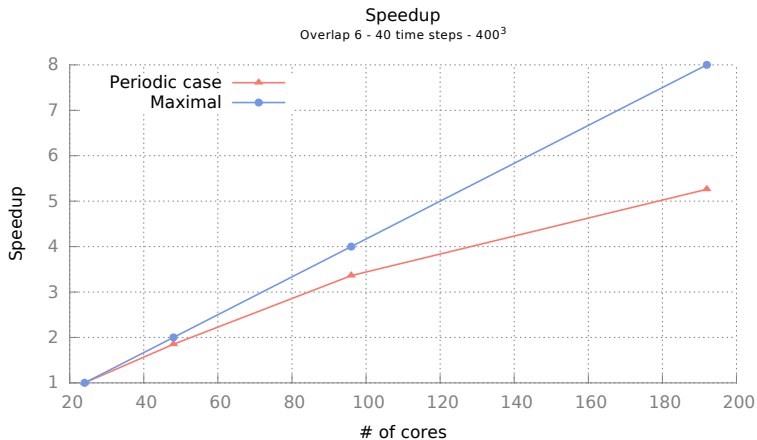
Scalabilité forte :

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

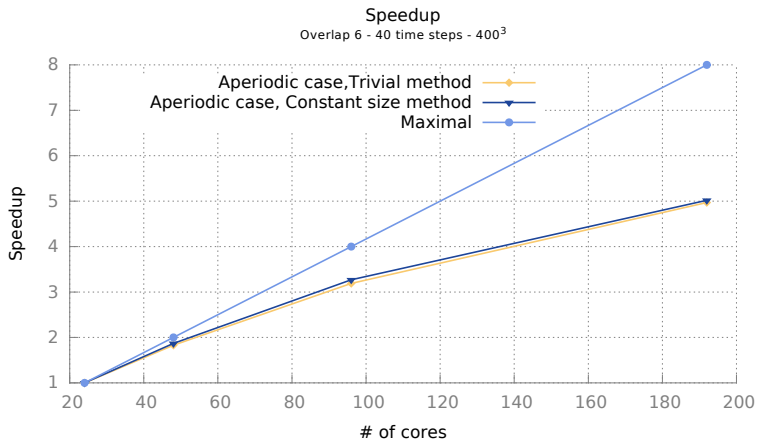
Speedup :

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

- Intel Haswell bi-socket, 12 coeurs 2.5GHz



- Intel Haswell bi-socket, 12 coeurs 2.5GHz



- 1 Introduction
  - Présentation du Cerfacs
  - Mécanique des fluides numérique
  - Simulation de la turbulence
- 2 Présentation du stage
  - NTMIX\_CHEMKIN
  - Objectifs
- 3 Parallélisation de NTMIX
  - Décomposition de domaine
  - Communications
- 4 Etude des performances
  - Scalabilité forte
- 5 Conclusion

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



Merci