

YALES2

Les défis du passage au calcul massivement parallèle et aux machines pétaflopiques : cas de la résolution des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach

Séminaire de l'IDRIS – 27/01/2011

V. Moureau

CNRS-CORIA, UMR 6614, Rouen

■ Plan

▶ Introduction

- Présentation du CORIA
- Contexte
- Présentation de YALES2
- Quelques applications de YALES2
- Une autre application : DNS du brûleur PRECCINSTA

▶ Les défis du passage au calcul massivement parallèle

- Génération et gestion des maillages de grande taille
- Résolution des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach
- Schémas volumes finis du 4^{ème} ordre

▶ Conclusions & perspectives

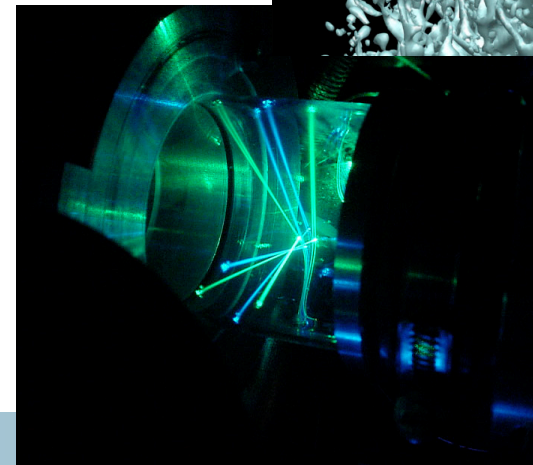
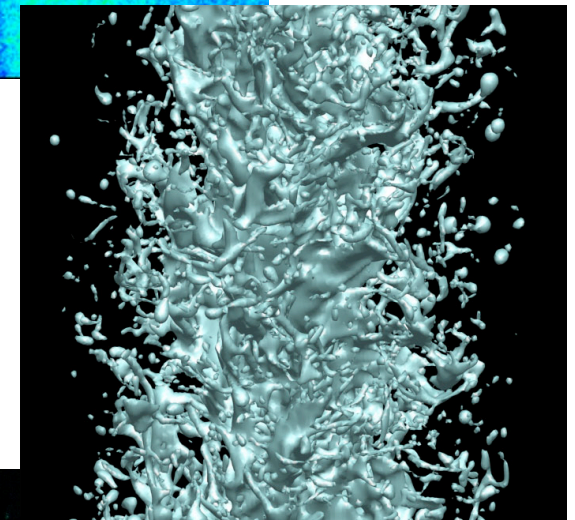
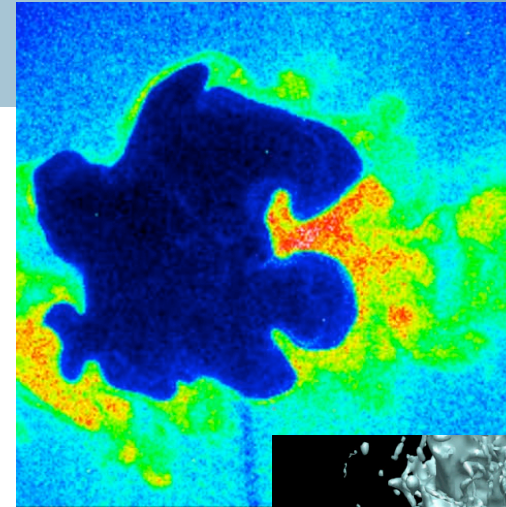


Présentation du CORIA

<http://www.coria.fr>

■ Overview

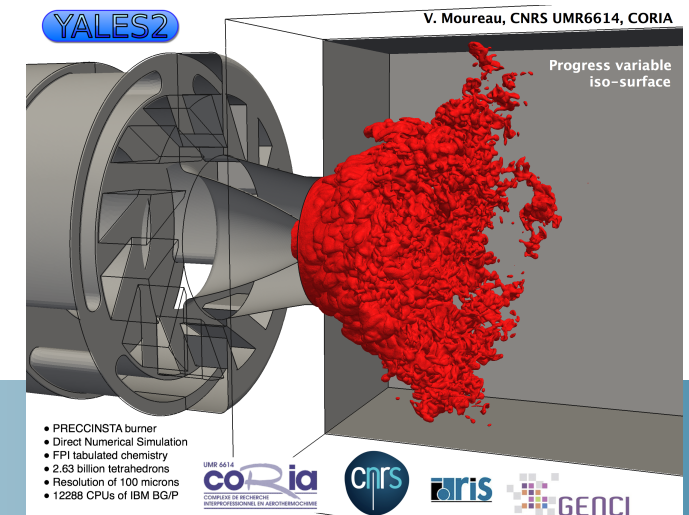
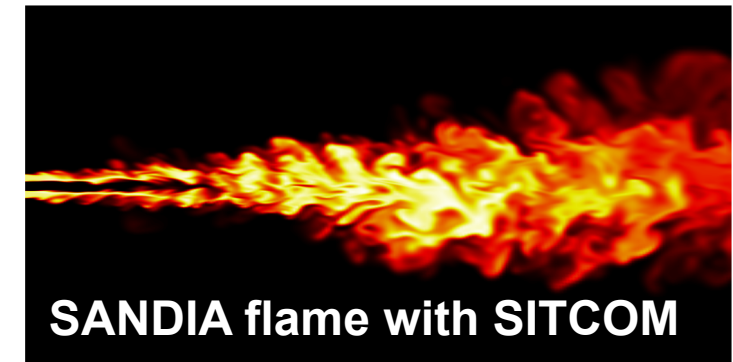
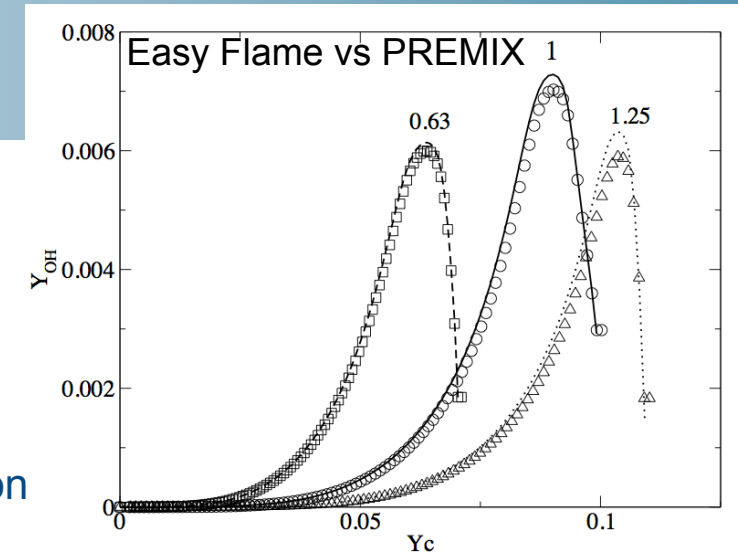
- ▶ Located in Rouen (1h from Paris)
- ▶ Key figures
 - 180 employees
 - 56 senior researchers
- ▶ 3 departments
 - Reactive flows
 - Turbulence, atomization and sprays
 - Optics and lasers
- ▶ Combustion modeling team
 - In the reactive flows department
 - 6 researchers
 - Prof Luc Vervisch
 - Dr Pascale Domingo
 - Dr Vincent Moureau
 - Dr Guillaume Ribert
 - Dr Ghislain Lartigue
 - Prof Yves D'Angelo



Combustion modeling team

▶ 3 main activities with 3 codes

- **Easy flame – L. Vervisch, P. Domingo, G. Ribert**
 - Chemistry table generation
 - Development of new strategies for chemistry tabulation like the Multi-dimensional Flamelet Manifolds method
- **SITCOM – P. Domingo, G. Lartigue**
 - Structured code for massively parallel LES and DNS
 - Used for model development
- **YALES2 – V. Moureau, G. Lartigue, D. Taieb**
 - Unstructured code for massively parallel LES and DNS
 - Used for model development and engineering

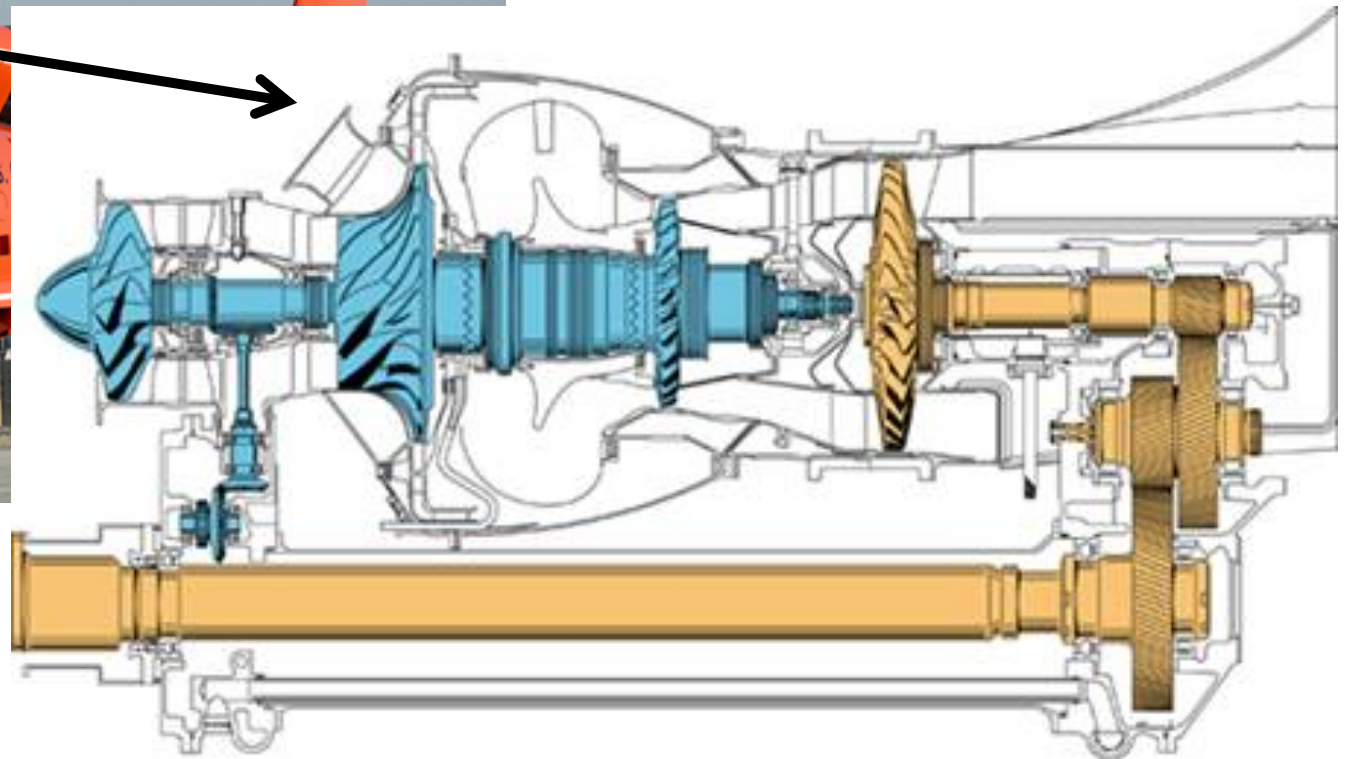




Contexte

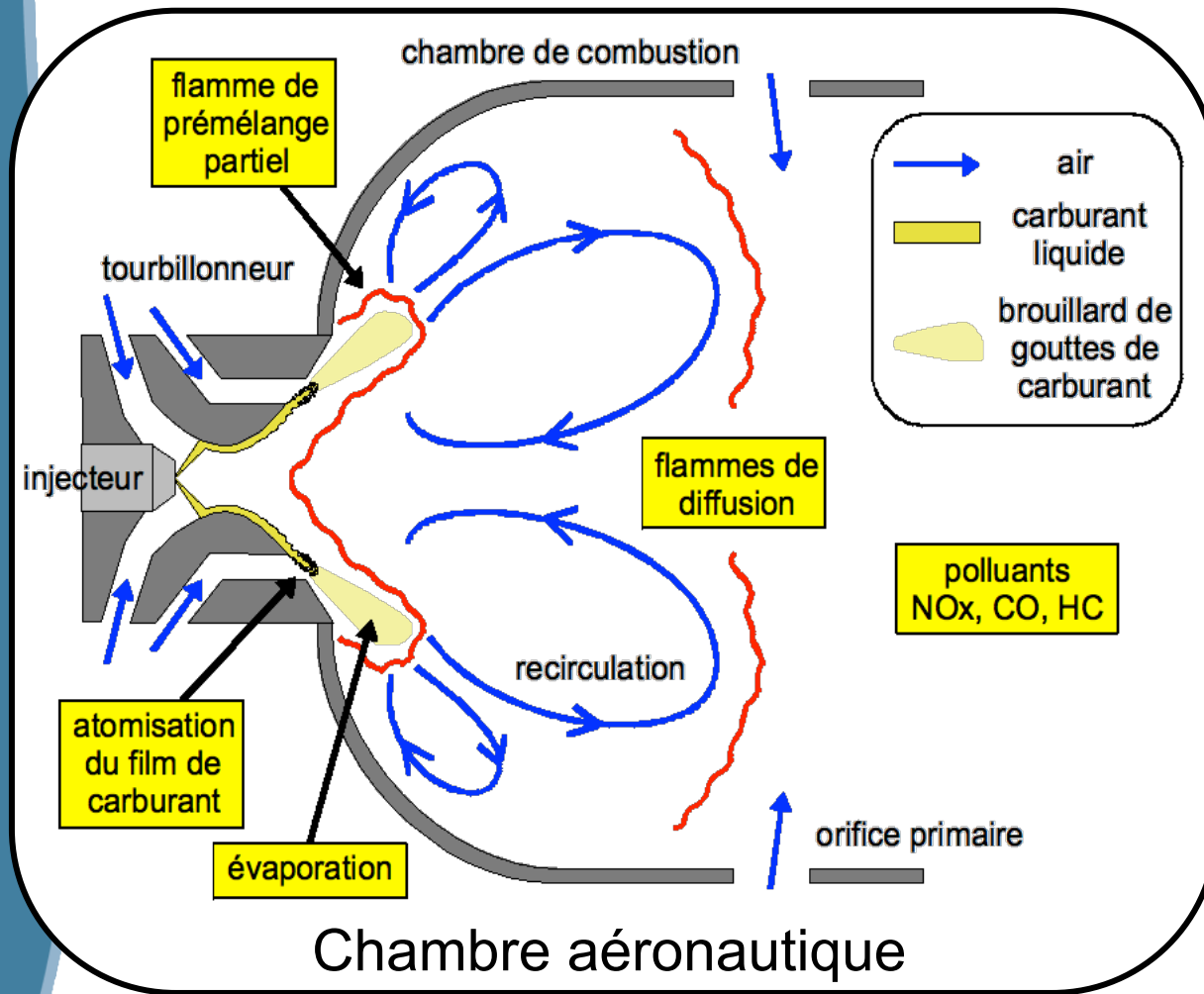
■ La modélisation de la combustion

- ▶ La combustion intervient dans de nombreuses applications :
 - Aéronautique, automobile, fours, ...



■ La modélisation de la combustion

▶ De nombreux phénomènes et nombreuses échelles caractéristiques

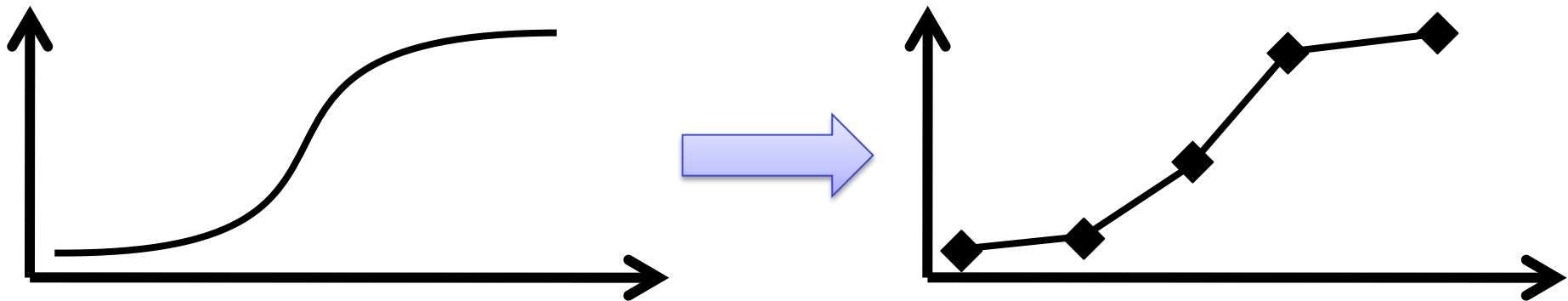


	Turbulence	10 mm 0.01mm
	Atomisation	0.1 mm
	Transport du spray	10 μ m
	Evaporation	10 μ m
	Combustion	0.1 mm

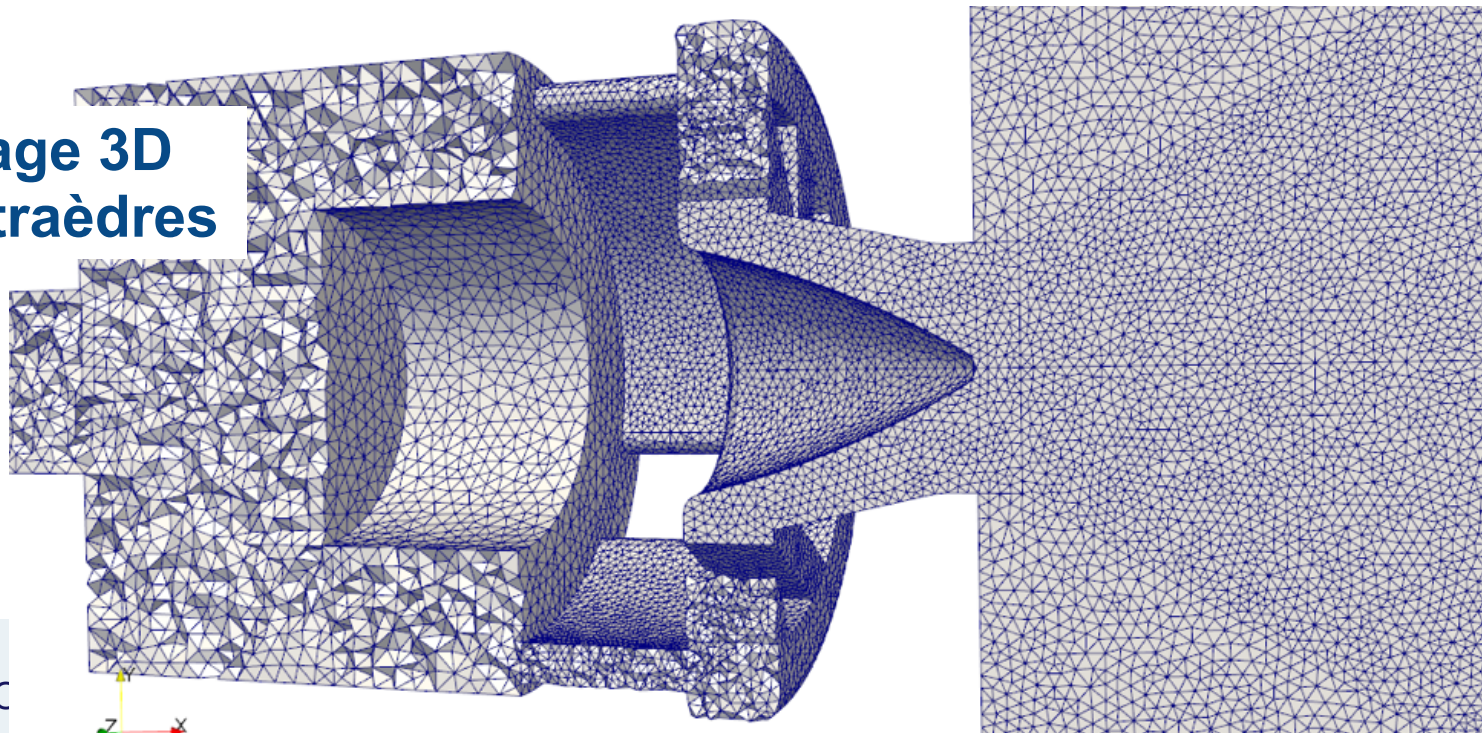
3 à 4 ordres de grandeur

■ La discrétisation

- ▶ Principe : décrire le monde continu sous forme discontinue pour utiliser la puissance des ordinateurs

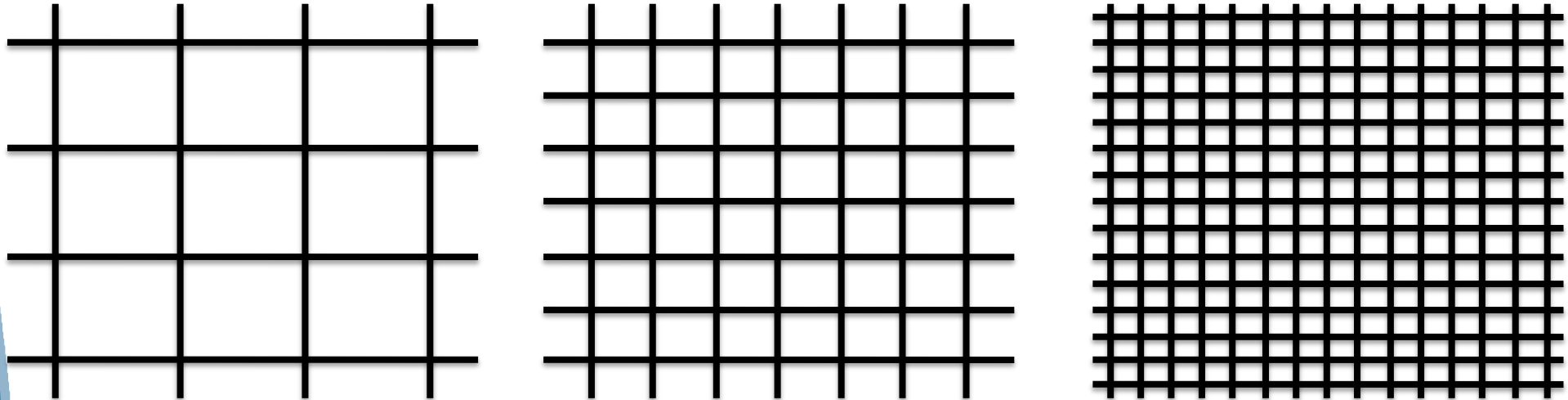


Maillage 3D
de tétraèdres



■ Estimation du coût d'un calcul

▶ Le coût est lié la résolution



▶ Si N est le nombre de cellules dans une direction, le coût évolue comme N^4 en 3D (à cause de la dimension temporelle)

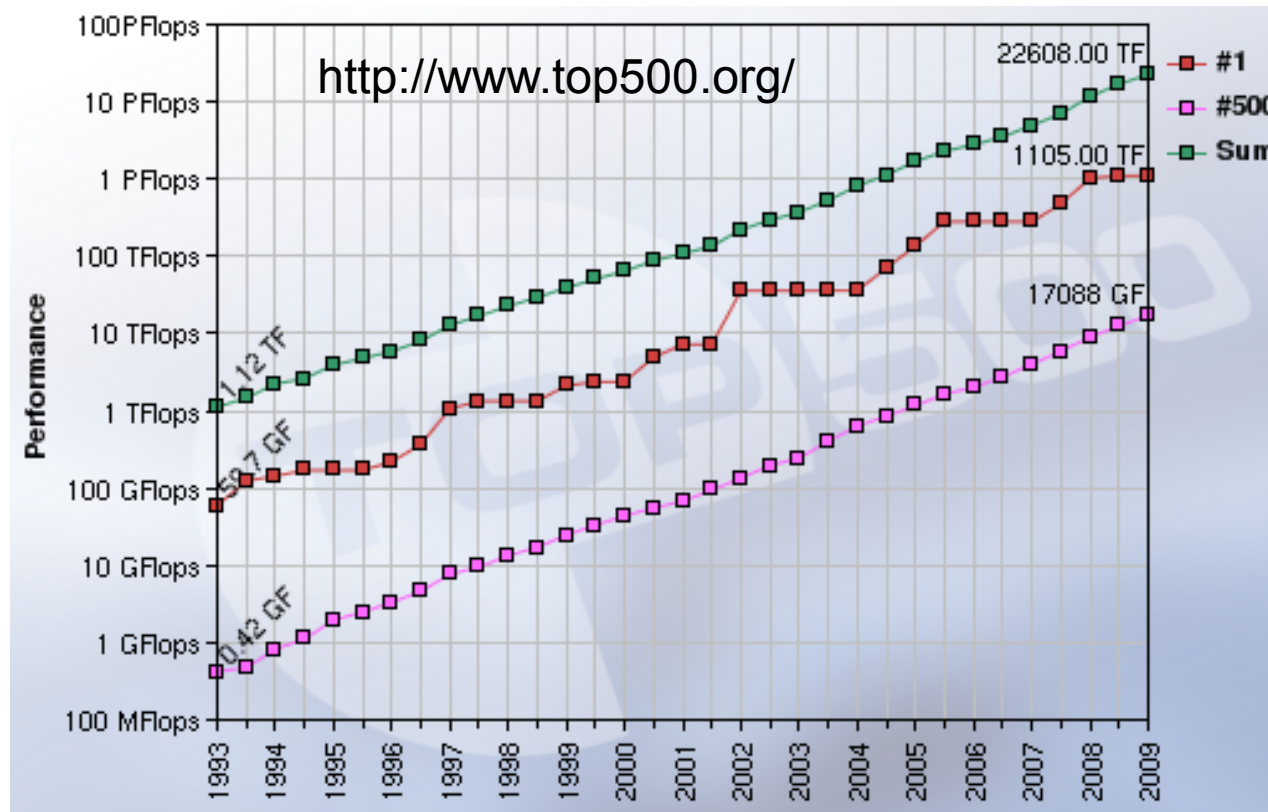
▶ La résolution dépend du problème à résoudre :

- Taille chambre de combustion = 10 cm
- Echelles de la turbulence = 1 mm
- Epaisseur de flamme (taux de réaction) = 0.1 mm

$$\begin{aligned} &\longrightarrow N = 100, N^3=10^6 \\ &\longrightarrow N = 1000, N^3=10^9 \end{aligned}$$

■ Un avenir prometteur : la loi de Moore

- ▶ Les ordinateurs de bureau et les super-ordinateurs doublent de puissance tous les 18 mois



- ▶ Seule contrainte : utiliser un grand nombre de processeurs en même temps (**> 10 000**) ...

■ Les défis du super-calcul en CFD

- ▶ **Générer, manipuler, post-traiter des maillages et des solutions de plusieurs dizaines de milliards de cellules**
- ▶ **Résoudre les équations de Navier-Stokes sur plus de 10 000 processeurs**
- ▶ **Traiter les géométries complexes avec des méthodes numériques précises**



Présentation de YALES2

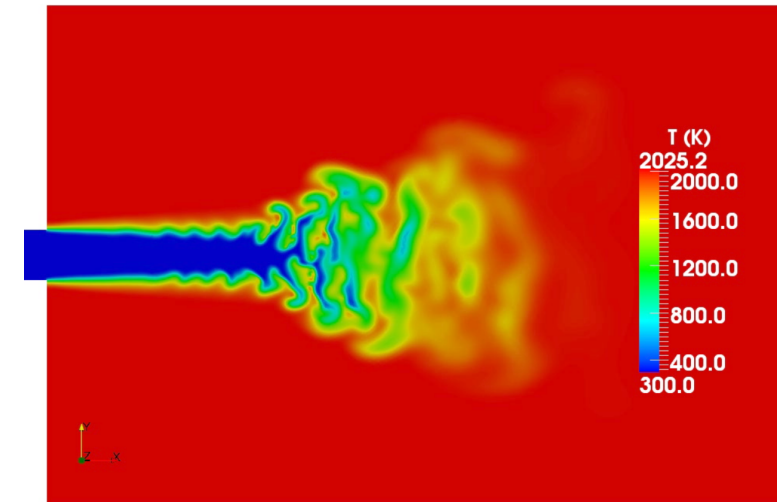
■ YALES2 : objectifs

- ▶ **YALES2 est un code orienté-objet développé depuis fin 2006**
- ▶ **Le 1er objectif est d'apporter un gain significatif sur le temps de retour des calculs CFD instationnaires en améliorant :**
 - la mise en données pour des maillages de grande taille (> milliard cellules)
 - le temps de calcul sur un grand nombre de processeurs (>10000)
- ▶ **Le 2^{ème} objectif est d'apporter des modélisations nouvelles pour**
 - la combustion turbulente
 - l'atomisation du carburant
 - la description des sprays
 - la prédiction des polluants, ...

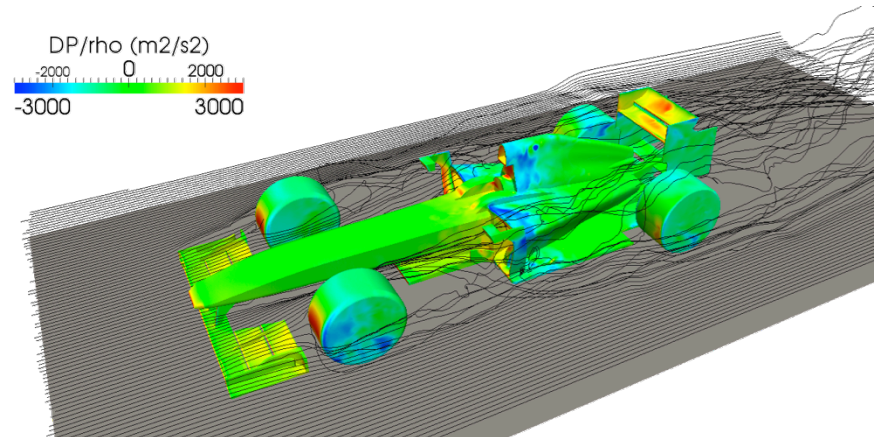
■ YALES2 : solveurs

- ▶ **Scalar solver (SCS)**
- ▶ **Level set solver (LSS)**
- ▶ **Lagrangian solver (LGS)**
- ▶ **Incompressible solver (ICS)**
- ▶ **Variable density solver (VDS)**
 - For low Mach combustion
- ▶ **Spray solver (SPS)**
 - For primary atomization
- ▶ **Magneto-Hydrodynamic solver (MHD)**
- ▶ **Mesh movement solver (MMS)**
 - + local mesh refinement
- ▶ **Radiative HT solver (RDS)**
- ▶ **Heat transfer solver (HTS)**
- ▶ **Linear acoustics solver (ACS)**

2D Bunsen flame with FPI



DP/rho (m²/s²)



2010 Formula 1 – 36M tets
V. Moureau, D. Taieb, G. Ribert

■ YALES2 : utilisateurs et développeurs

▶ Laboratoire CORIA – Rouen

- Vincent Moureau (dév. principal)
- Ghislain Lartigue (développeur)
- David Taieb (développeur)
- Pascale Domingo (combustion)
- Luc Vervisch (combustion)
- Guillaume Ribert (supercritique)
- Nicolas Enjalbert (diphasique)
- Mathias Malandain (numérique)
- François Péquery (polluants)
- Danh Nguyen (rayonnement)
- Nicolas Maheu (transferts therm.)
- Jonathan Vahé (micro-mélange)
- Catherine Gruselle (moteur)
- Suresh Nambully (comb. stratifiée)
- Marianne Sjostrand (mésocomb.)
- Xavier Petit (supercritique)

▶ Laboratoire I3M – Montpellier

- Simon Mendez (bioméca)
- Franck Nicoud (bioméca)

▶ Laboratoire LEGI – Grenoble

- Guillaume Balarac (mélange)

▶ Université Libre de Bruxelles

- Stijn Vantiegheem (MHD)
- Bernard Knaepen (MHD)

▶ EM2C – Centrale Paris

- Denis Veynante (combustion)

▶ CERFACS - Toulouse

- Matthias Kraushaar
- Gabriel Staffelbach
- Olivier Vermorel
- Jean-Christophe Jouhaud

▶ Sherbrook University – Canada

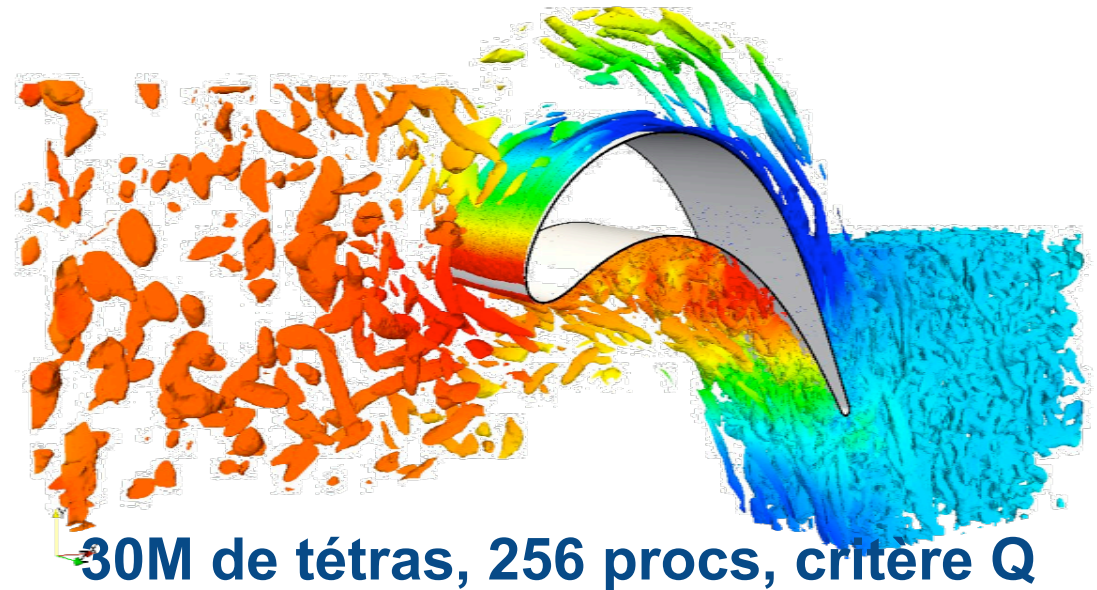
- Stéphane Moreau (aéro-acoustique)
- Marlène Sanjosé (aéro-acoustique)



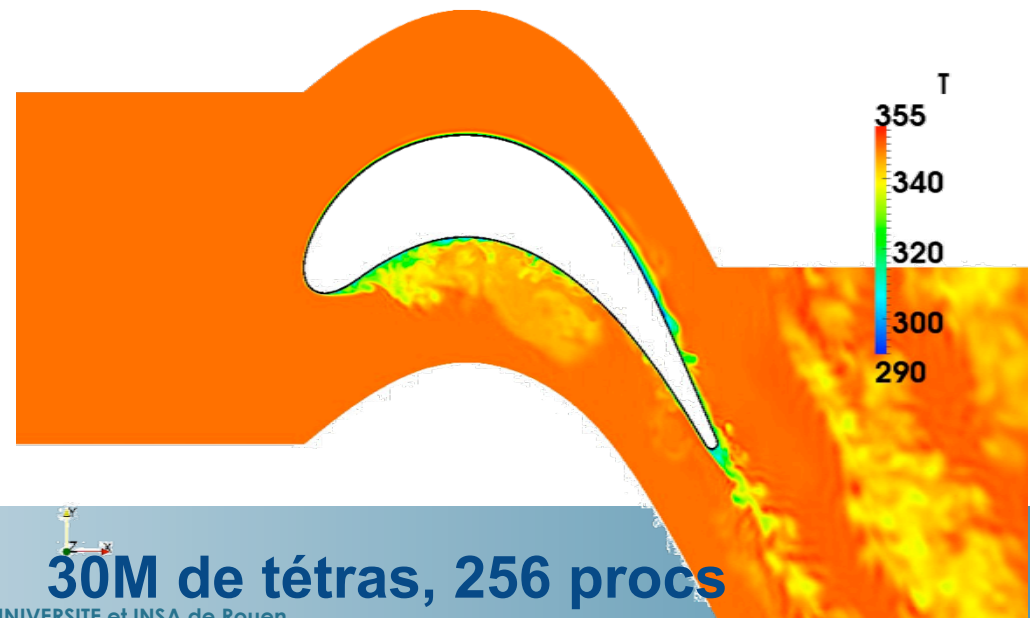
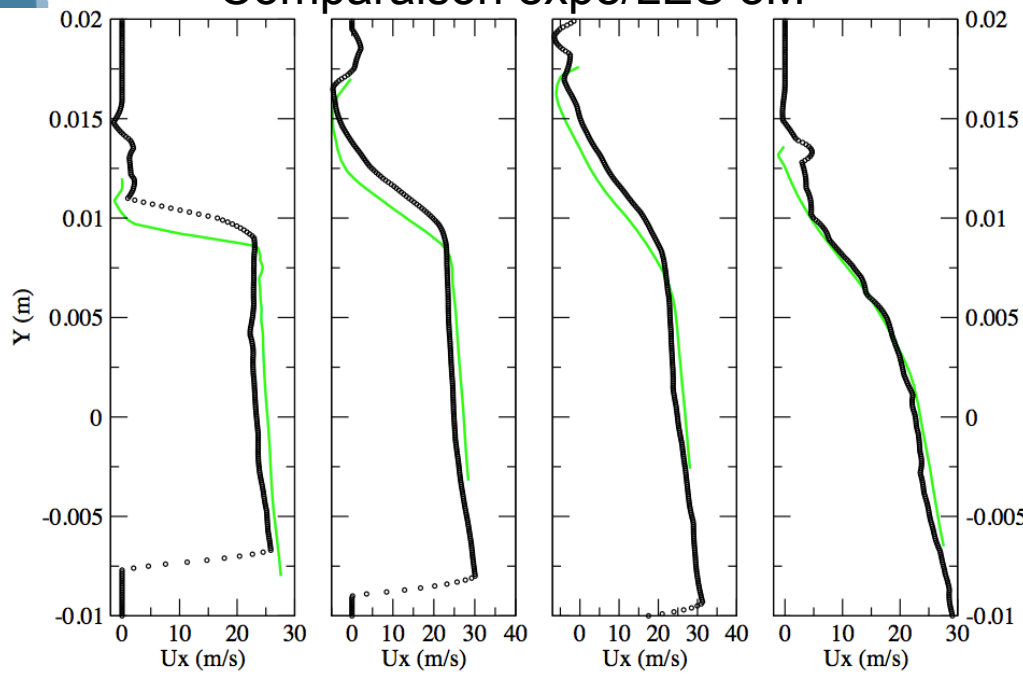
Quelques applications de YALES2

■ Calculs de thermique de paroi (N. Maheu, STRASS)

- ▶ Calculs LES de thermique
- ▶ 8, 30 et 240 millions de tétras
- ▶ Avec injection de turbulence
- ▶ Calcul de 8M de tétras convergé en 48h sur 4 procs d'une station de travail



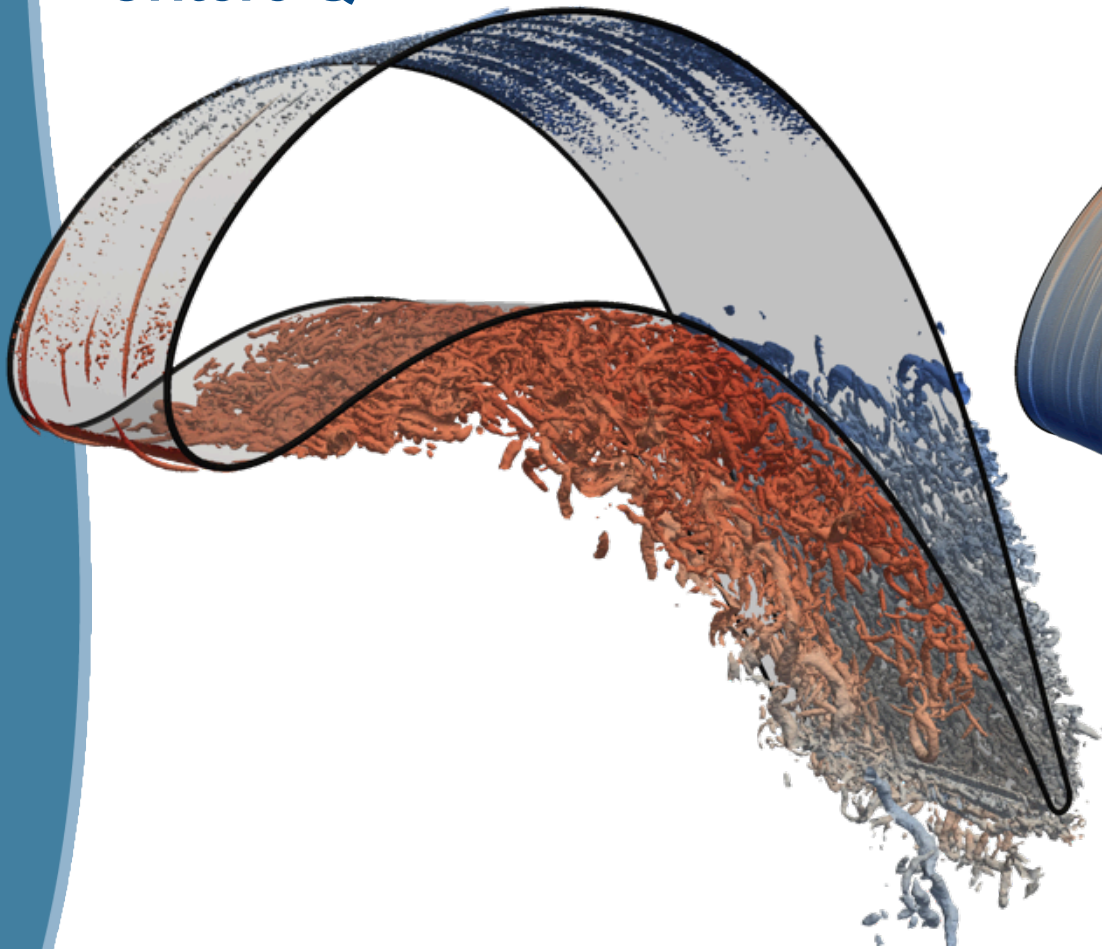
Comparaison expé/LES 8M



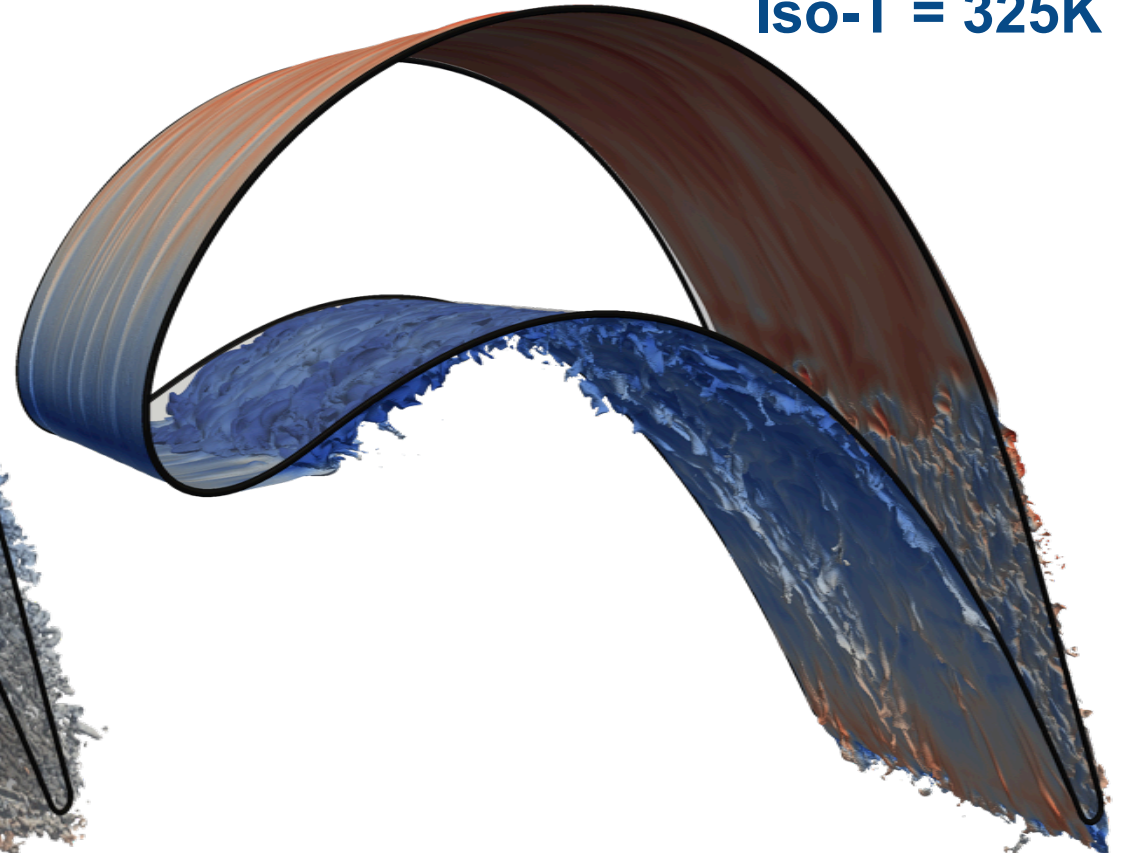
■ Calculs de thermique de paroi (N. Maheu, STRASS)

240M de tétras, 1024 procs

Critère Q

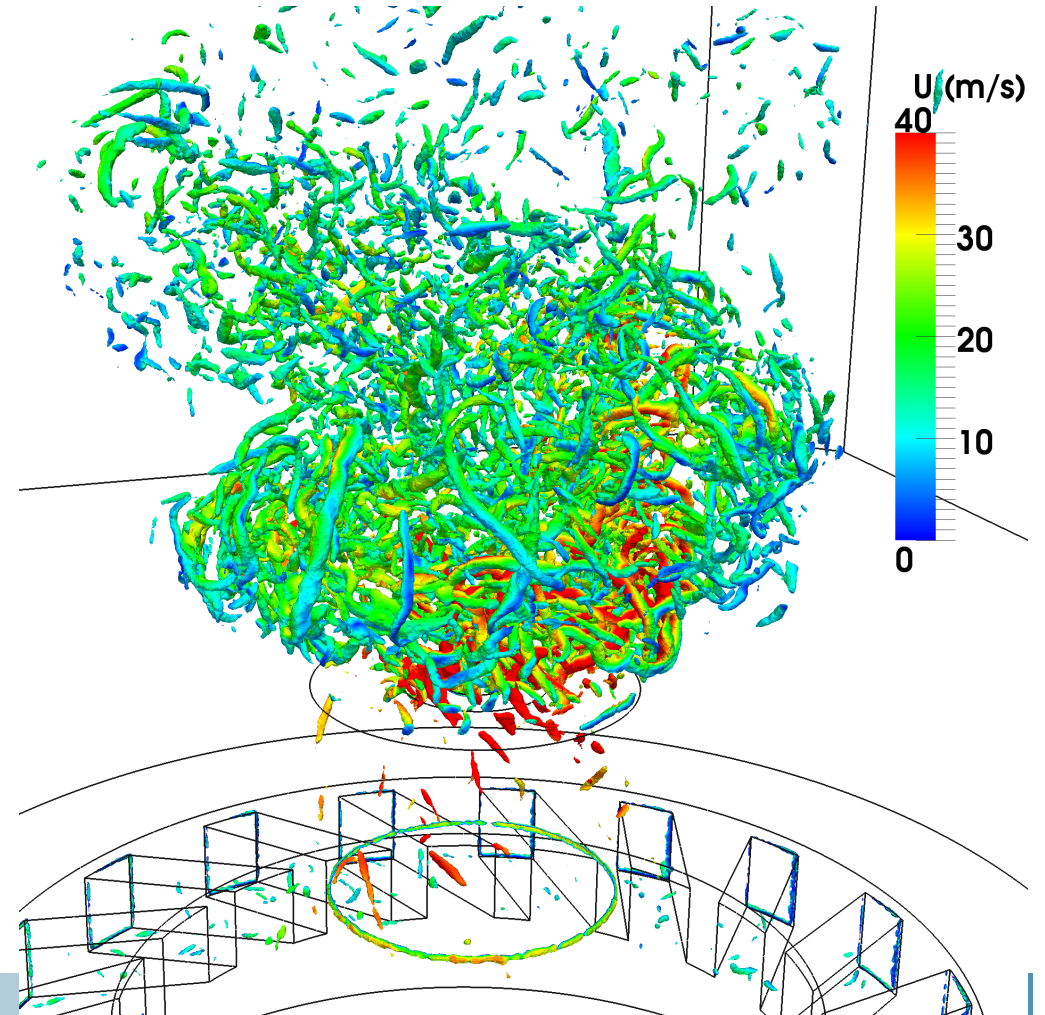
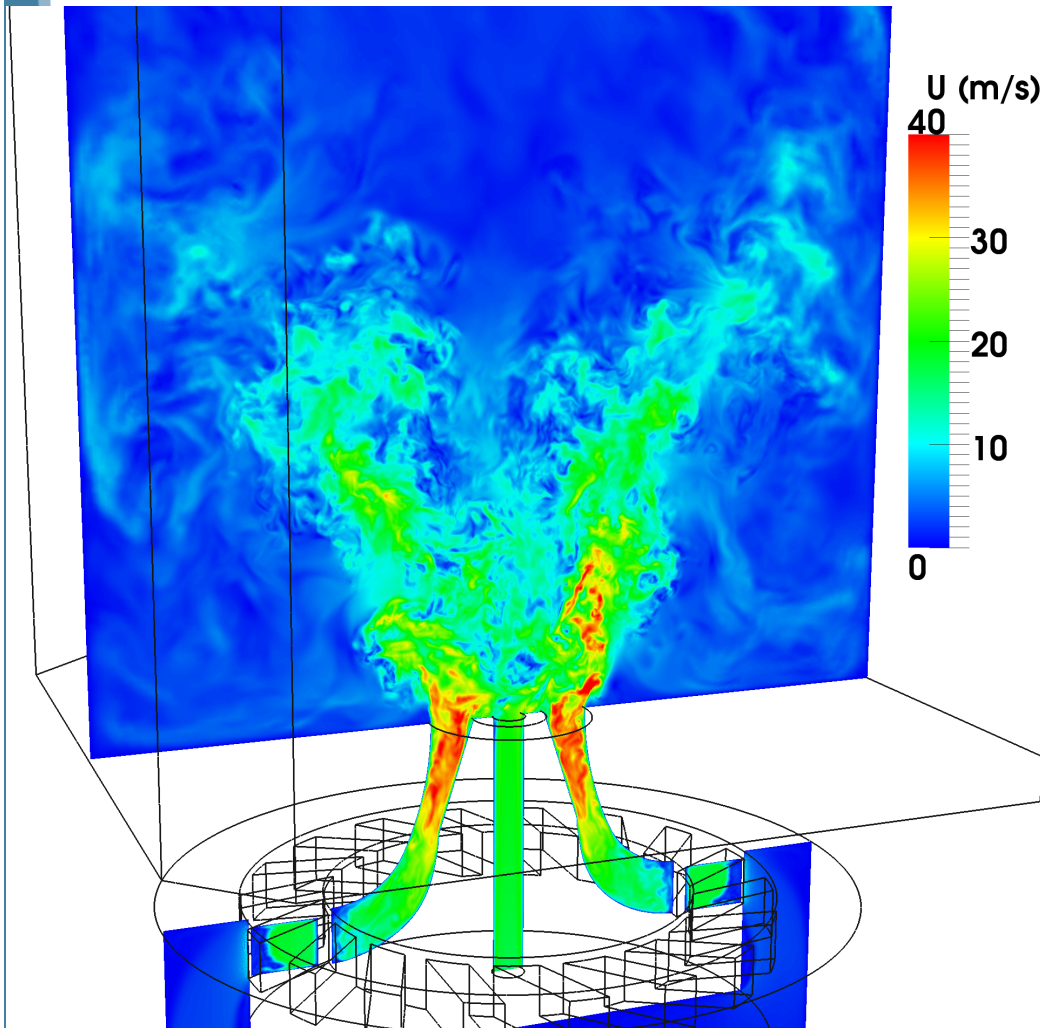


Iso-T = 325K



■ Calculs d'allumage (projet KIAI)

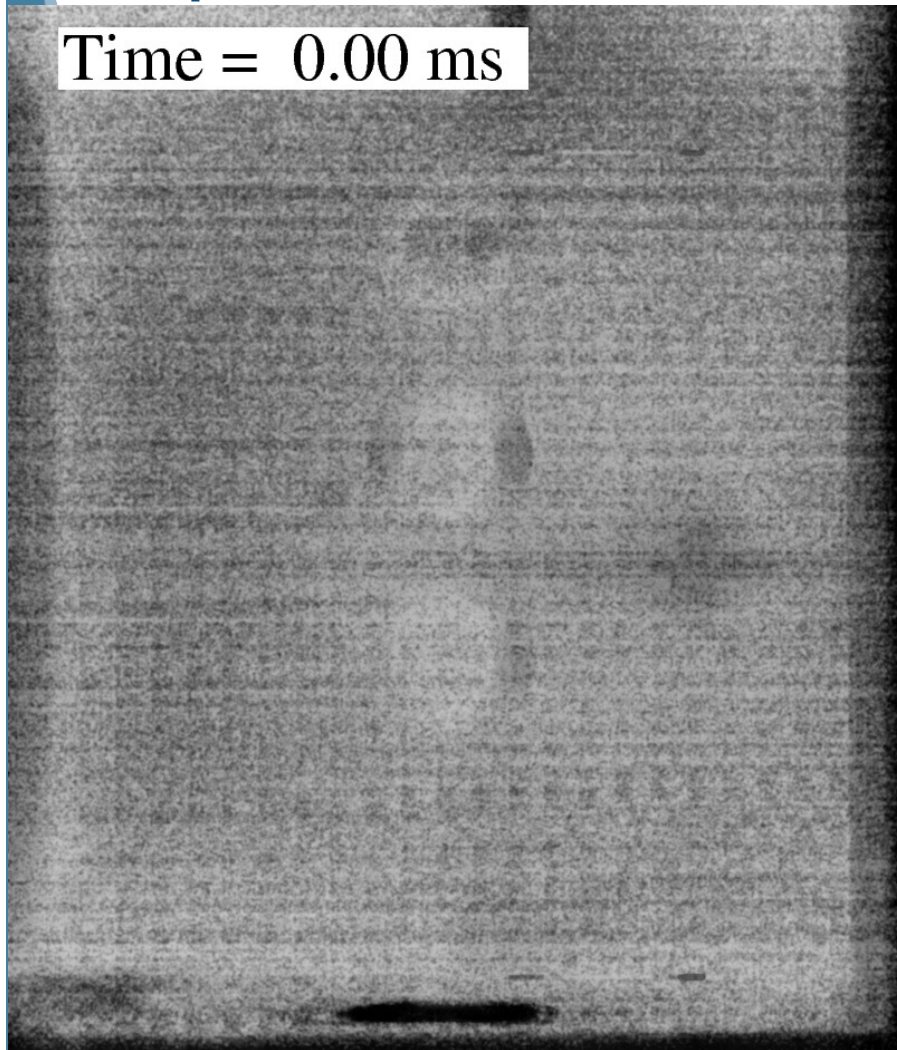
- ▶ Injecteur à swirl de type aéronautique
- ▶ 2 maillages : 48M et 382M de tétras (300 et 150 microns)



■ Calculs d'allumage (projet KIAI)

- ▶ Cas prémélangé, air/méthane, $\phi = 0.75$
- ▶ Maillage 48M, 20h sur 512 procs IBM Blue Gene/P (IDRIS)

Expérience, Frenillot et al

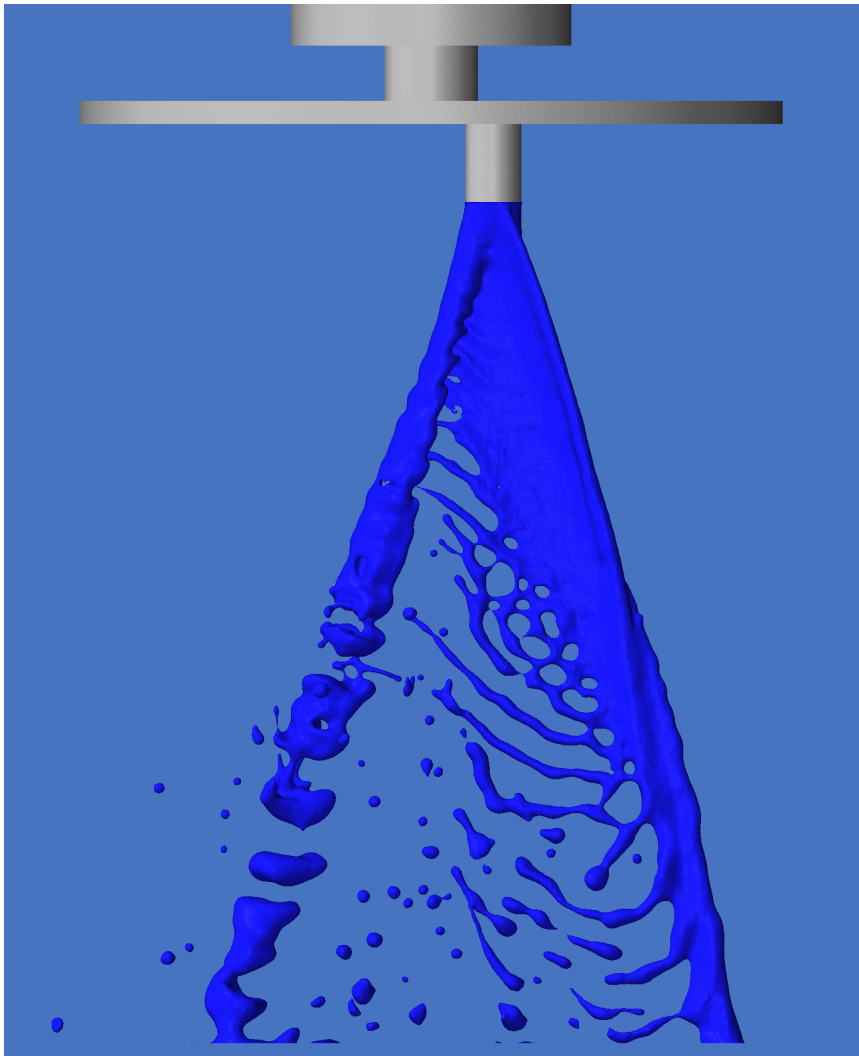


Calcul LES YALES2

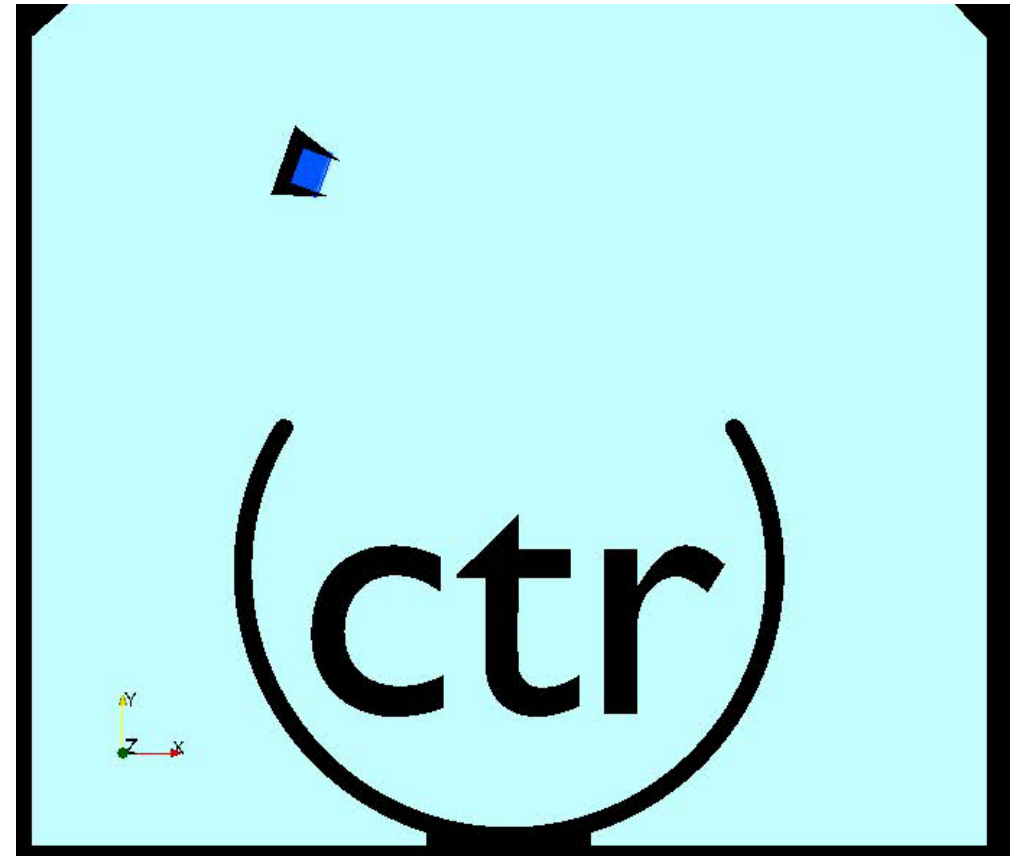


■ Calculs d'écoulements diphasiques

Jet triple disque, 205M de tétraèdres



GFM avec 2 vitesses



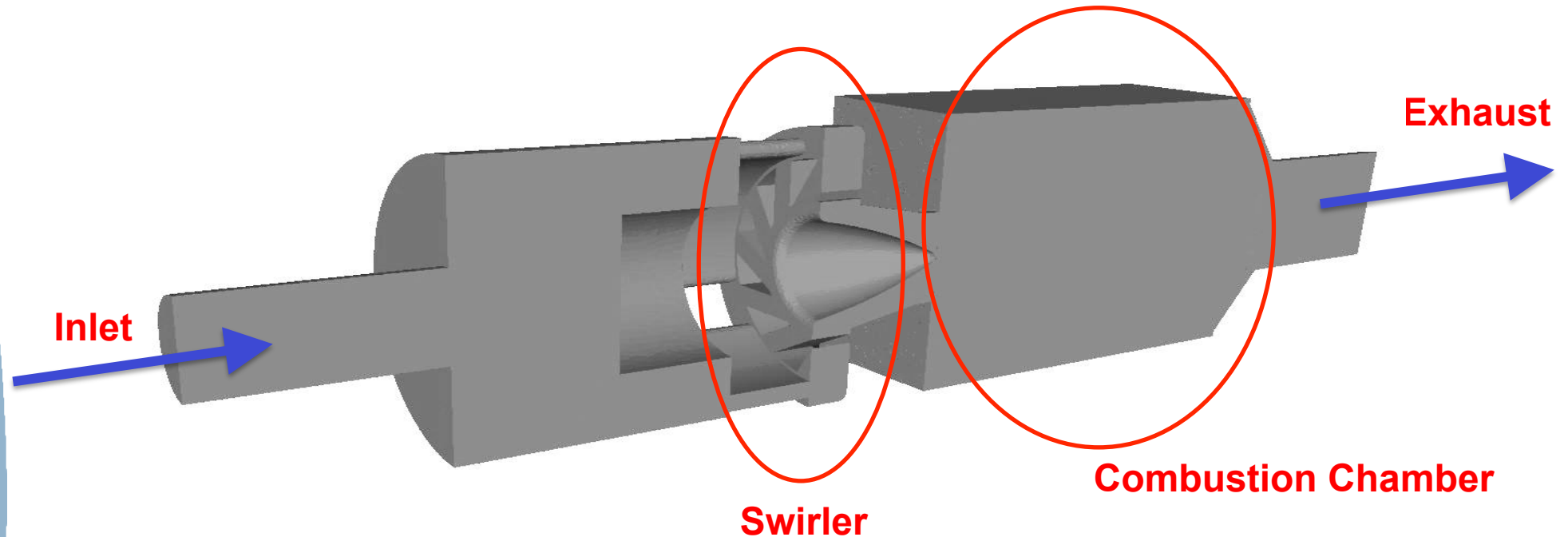


Une autre application : DNS du brûleur PRECCINSTA

Collaboration avec P. Domingo et L. Vervisch, CORIA

■ The Preccinsta burner

- ▶ Chamber dimensions: 110mm x 86mm x 86mm
- ▶ Air/methane mixture at $\phi=0.83$, $Re = 45000$

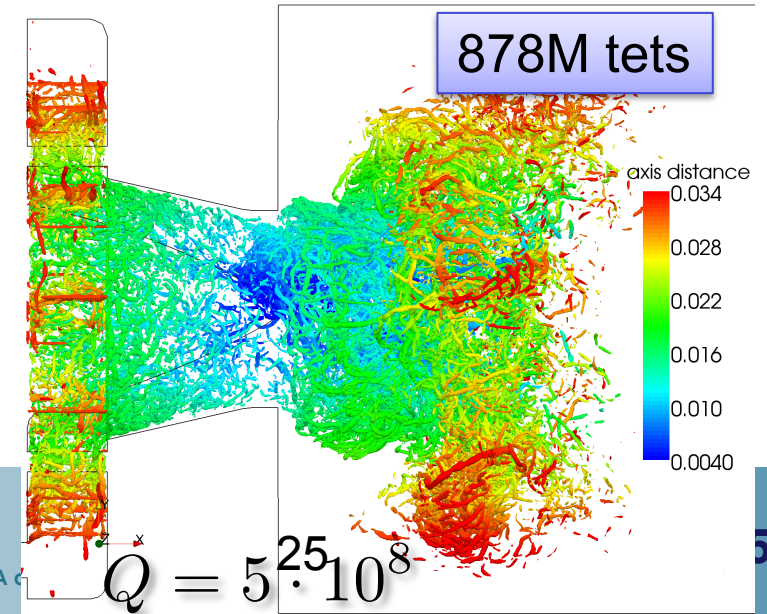
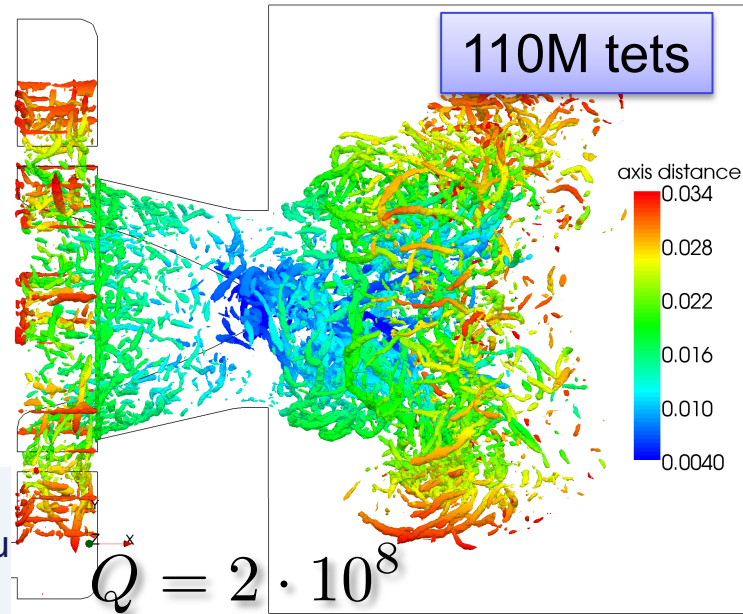
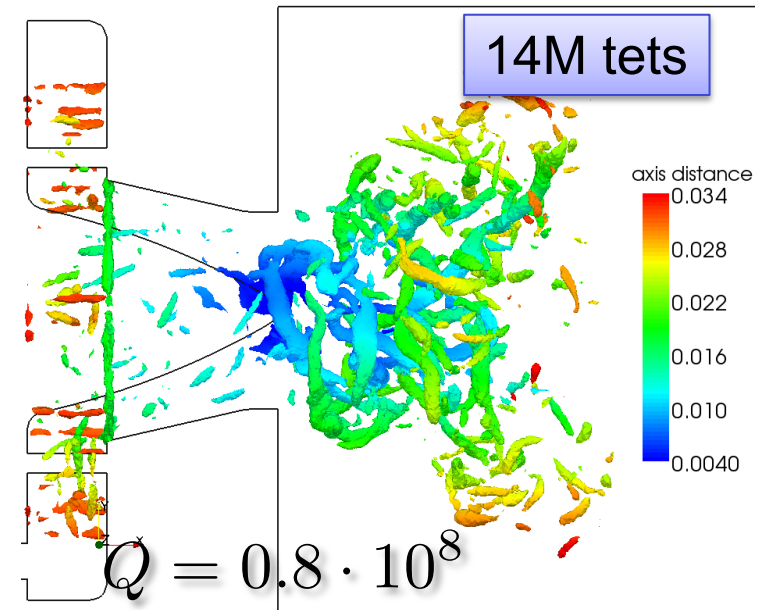
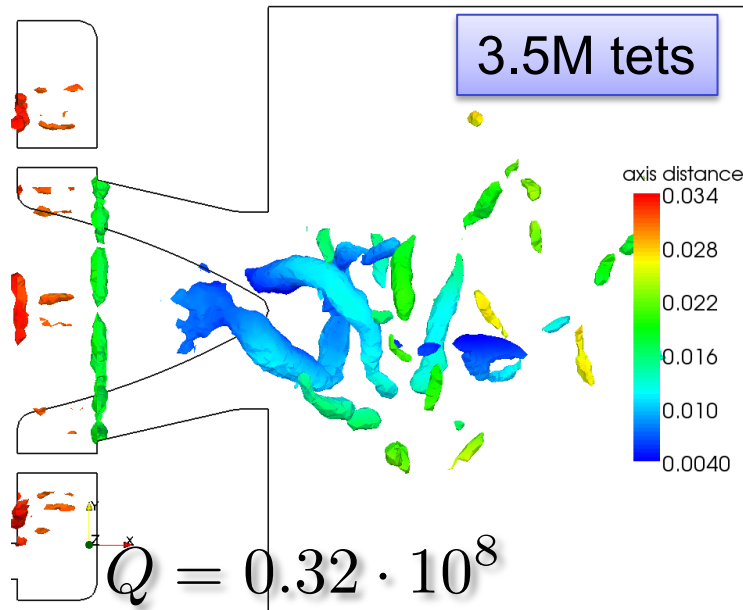


▶ More details in:

- Roux et al, Combustion and Flame (2005)
- Moureau et al, Journal of Computational Physics (2007) (2 papers)
- Galpin et al, Combustion and Flame (2008)

Influence de la résolution sur les calculs LES

Structures visualisées grâce au critère Q

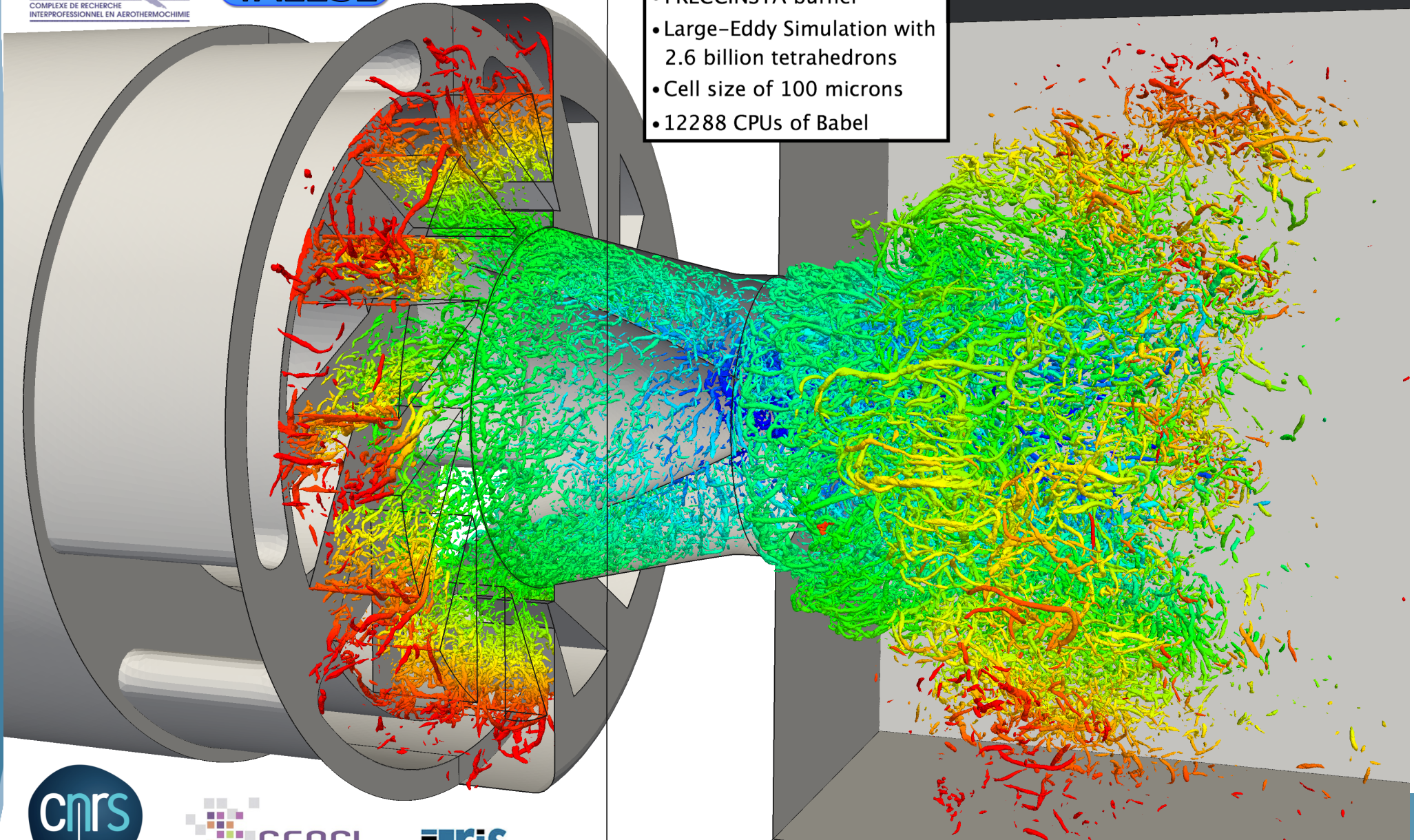


■ Simulation directe de PRECCINSTA à froid

UMR 6614
coRia
COMPLEXE DE RECHERCHE
INTERPROFESSIONNEL EN AEROTHERMOCHIMIE

YALES2

- PRECCINSTA burner
- Large-Eddy Simulation with 2.6 billion tetrahedrons
- Cell size of 100 microns
- 12288 CPUs of Babel

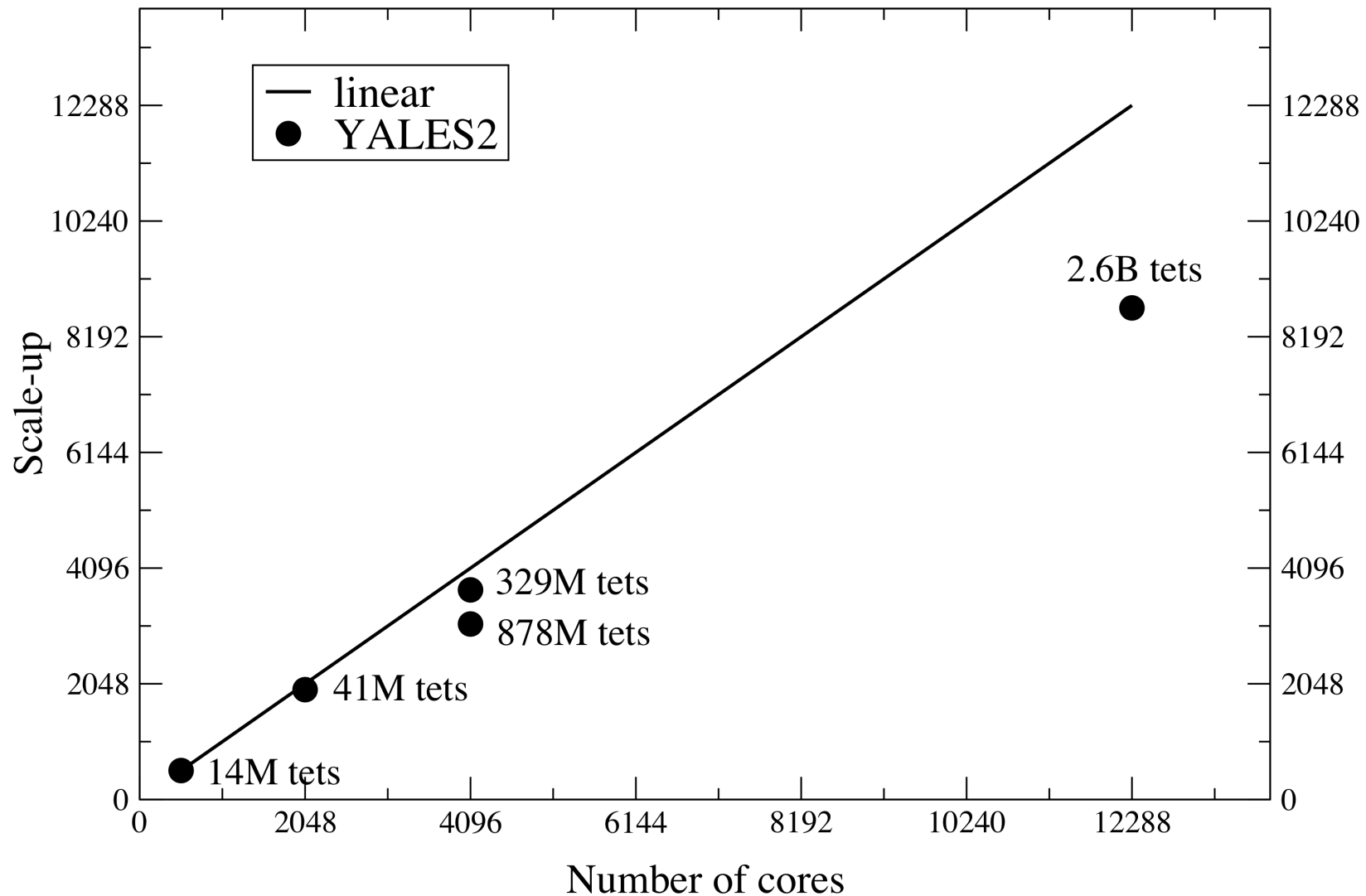


Simulation directe de PRECCINSTA à froid

► Scale-up quasi linéaire

YALES2 scale-up on Babel @ IDRIS (Blue Gene/P)

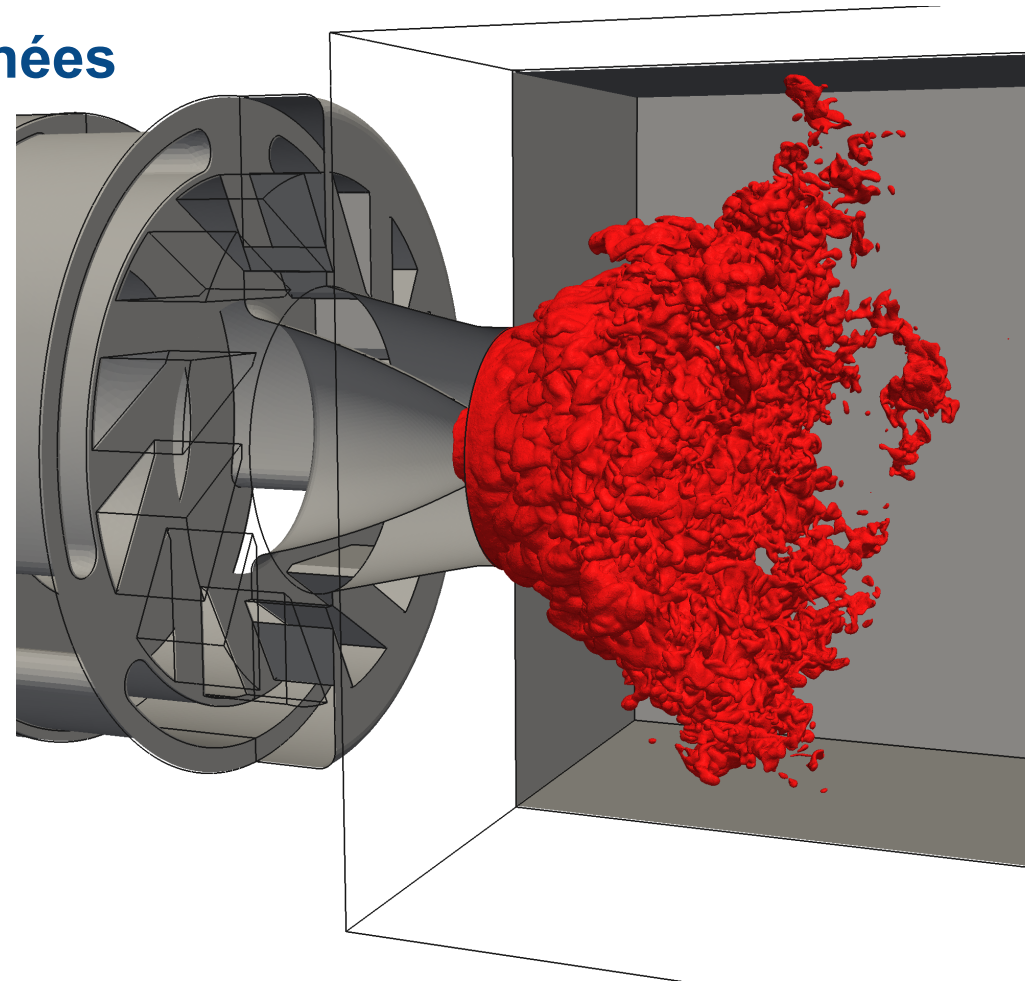
Up to 12288 cores and 2.6 billion tetrahedrons



■ Simulation directe de PRECCINSTA à chaud

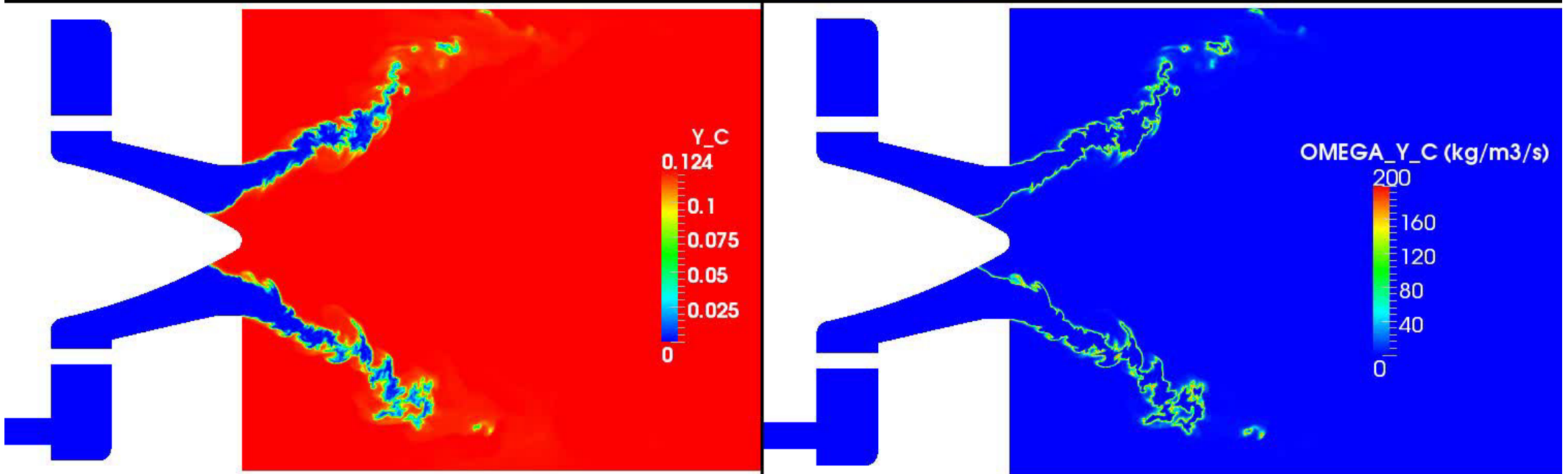
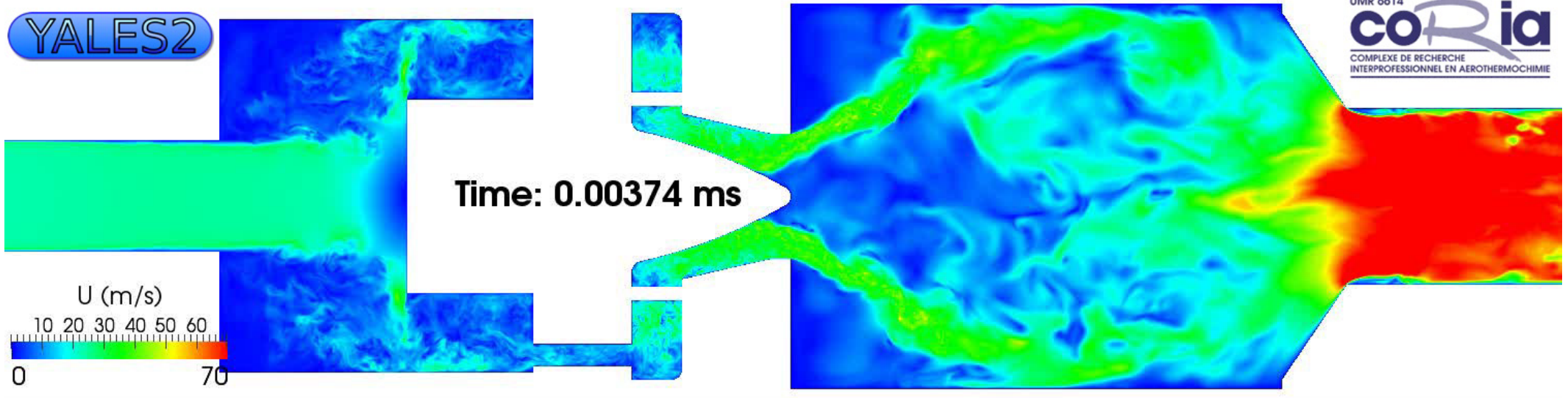
▶ Présentation de la base de données

- Flamme de prémélange à $\phi=0.83$
- Table FPI brute
- DNS avec 2,6 milliards de tétras
- Résolution de 100 microns
- 10 points dans la flamme
- 16384 CPUs Blue Gene/P
- 1 maillage + 1 solution = 150 Go



- ▶ Moureau, V., Domingo, P. & Vervisch, L., 2010, « From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame: Filtered Laminar Flame-PDF modelling », Combustion and Flame, in press.
- ▶ Moureau, V., Domingo, P., Vervisch, L. & Veynante, D., 2010, « DNS analysis of a $Re=40,000$ swirl burner », proceedings of the Center for Turbulence Research 2010 Summer Program, Stanford University, California, USA.

■ Topologie de l'écoulement simulé





Génération et gestion des maillages de grande taille

■ Problématique

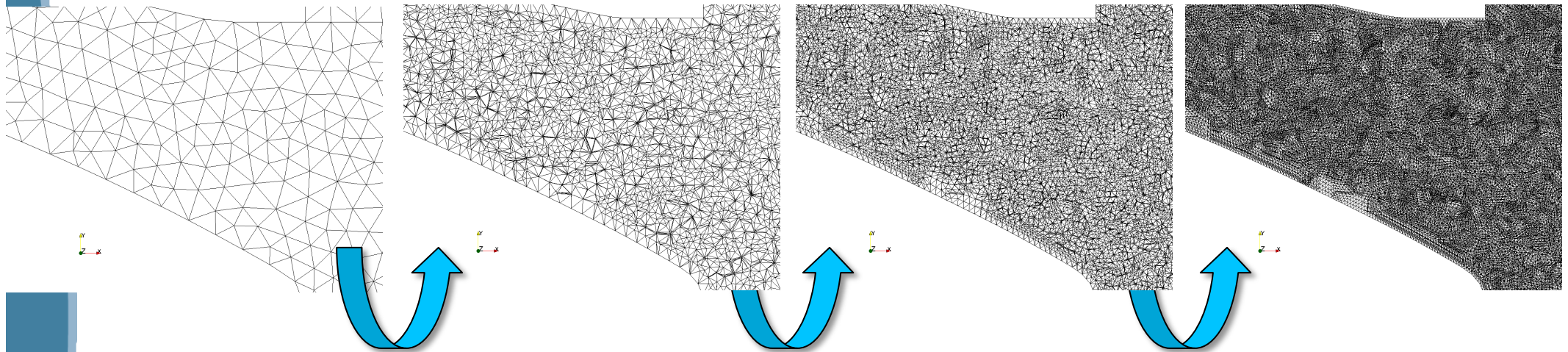
- ▶ **Un maillage de plusieurs milliards de cellules :**
 - Ne peut pas être généré avec la plupart des mailleurs actuels car ils sont séquentiels et donc limités à quelques dizaines de millions de cellules
 - Ne peut pas contenir d'indices globaux ou bien ces derniers doivent être représentés avec des entiers de plus de 4 octets (standard en 32 bits)
 - Ne peut pas être stocké en un seul fichier de plusieurs centaines de gigaoctets
 - Doit être lu et écrit pas un grand nombre de processeurs à la fois

- ▶ **Une solution : adopter des méthodes de partitionnement et de raffinement automatiques**

Stratégie

► Raffiner et partitionner

Raffinement de maillage automatique + interpolation



Taille : 2M

14M

110M

878M

Nombre
de blocs:

1

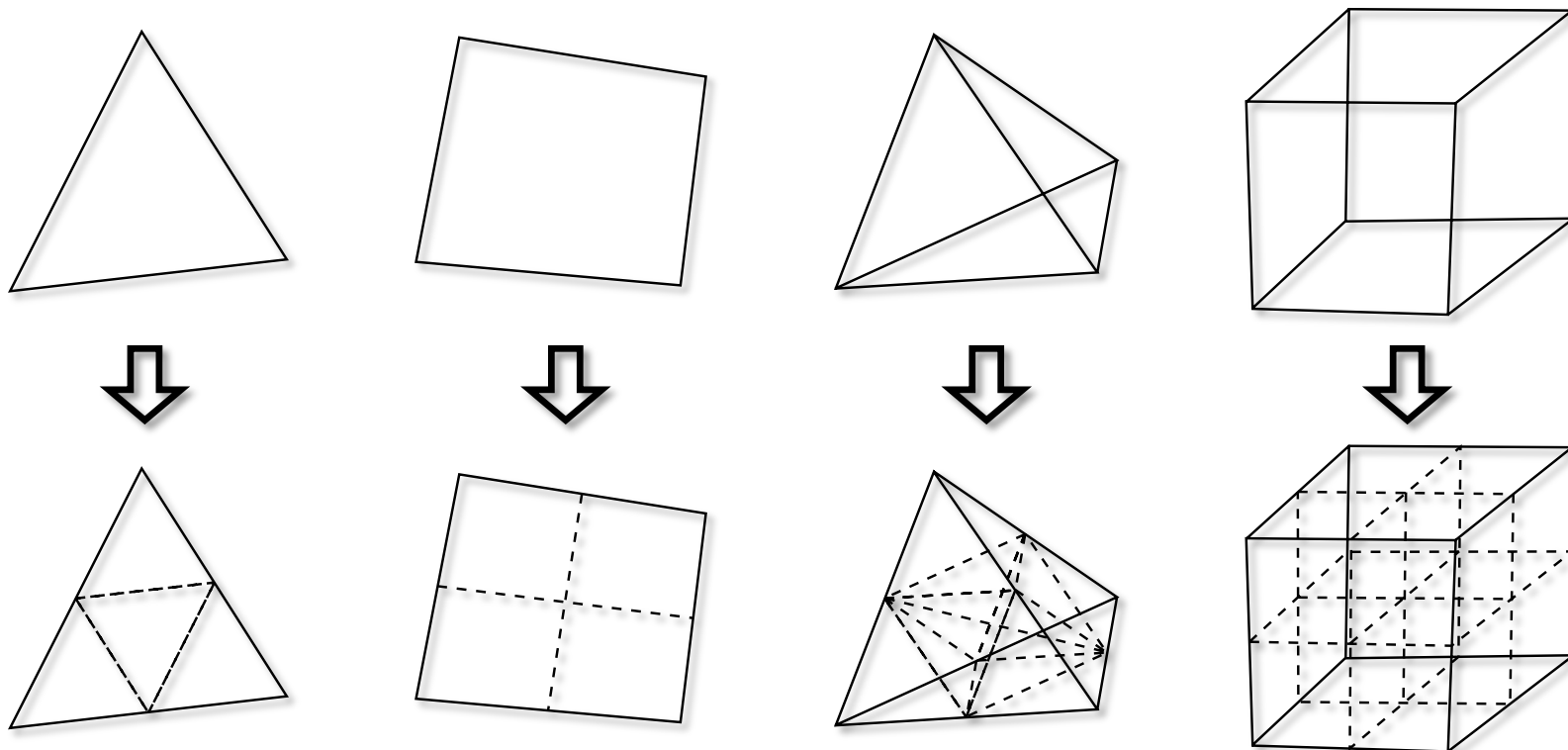
16

128

1024

■ Génération du maillage

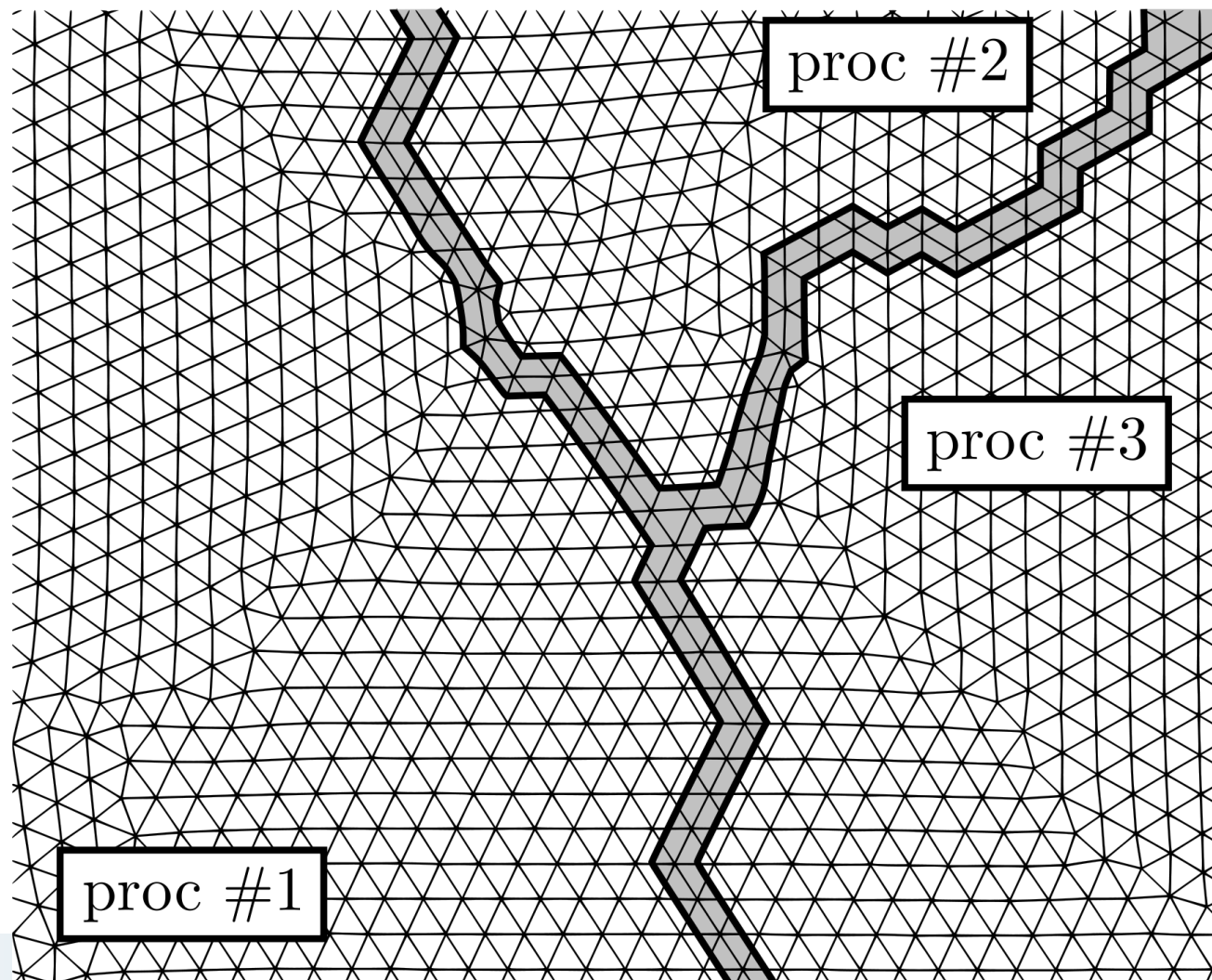
- ▶ Le raffinement homogène permet d'atteindre de grandes tailles de maillages. Il suffit que la géométrie soit bien décrite par le maillage d'origine.



- ▶ Pour les tétras, le raffinement n'est pas trivial (Rivara 1984)

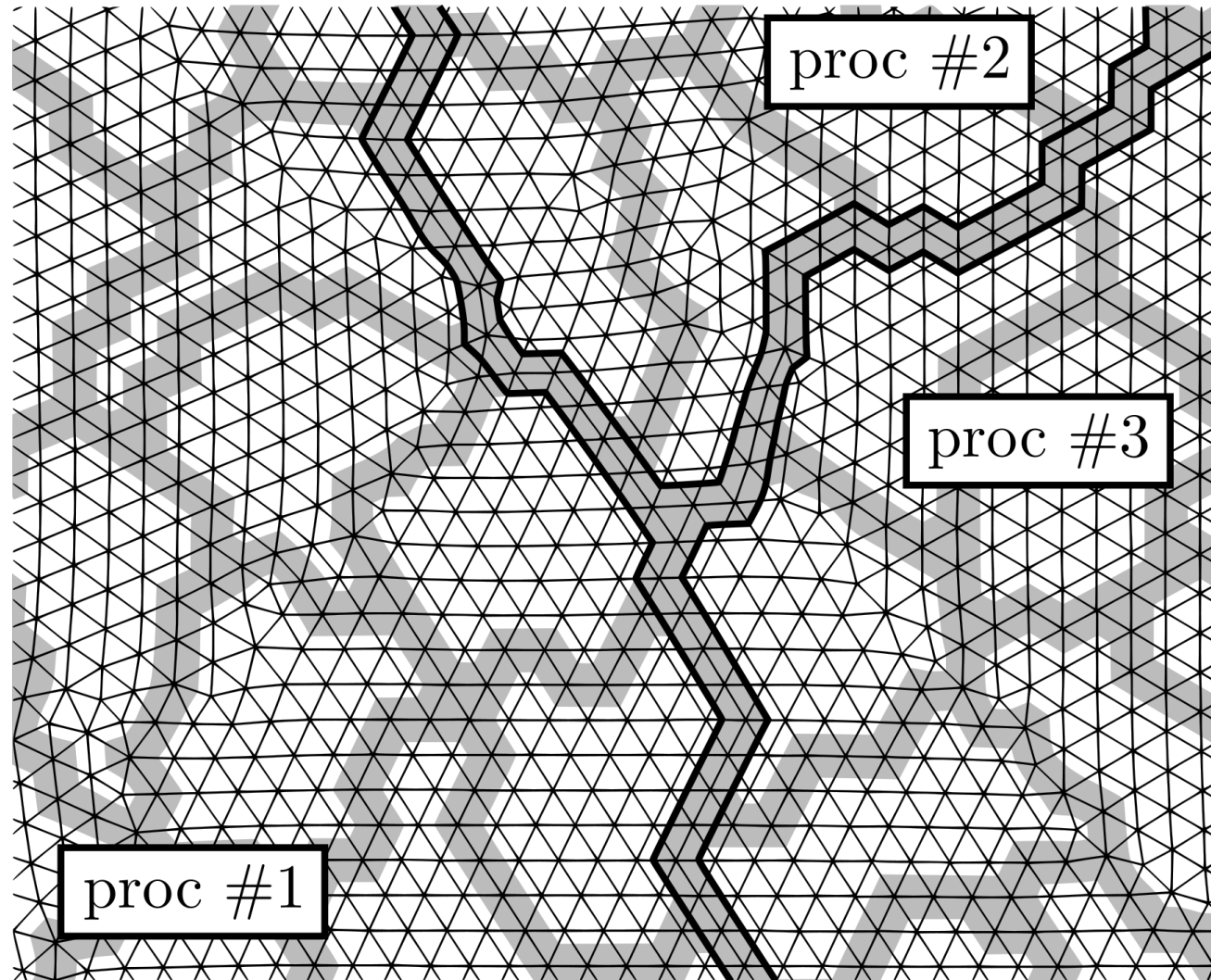
■ Gestion du maillage sur les processeurs

- ▶ 1^{ère} solution : décomposition de domaine simple
- ▶ Nombreuses bibliothèques disponibles : Metis, Scotch, ...



■ Gestion du maillage sur les processeurs

▶ 2^{ème} solution : double décomposition de domaine



■ Gestion du maillage sur les processeurs

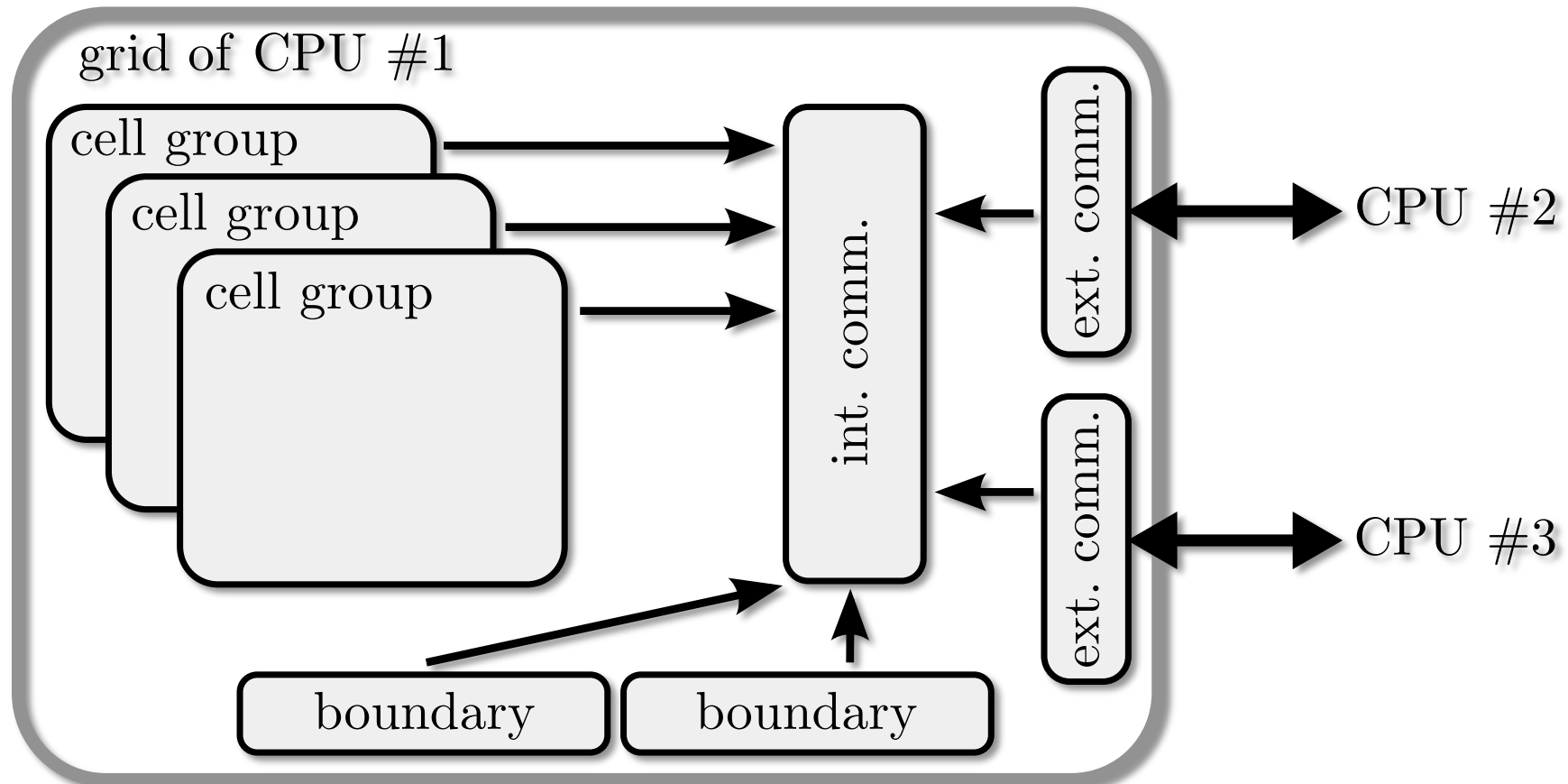
▶ Avantages de la double décomposition de domaine

- Elle optimise les accès mémoires
- Elle permet de faire de la répartition de charge en parallèle
- Elle crée un maillage grossier qui peut servir de préconditionneur
- Elle crée un partitionnement du maillage, que l'on peut utiliser pour tourner sur un plus grand nombre de processeurs

▶ Avec plusieurs niveaux de partitionnement, la connectivité devient importante. Dans YALES2, toutes les connectivités sont construites à partir de la connectivité aux faces.

■ Implantation dans le code YALES2

- ▶ Pour réaliser ces étapes de partitionnement, il faut des structures de données adaptées



- ▶ Moureau, V., Domingo, P. & Vervisch, L., 2010, « Design of a massively parallel CFD code for complex geometries », invited paper in Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, in press.



Résolution des équations de Navier-Stokes à faible nombre de Mach

■ Les équations de Navier-Stokes incompressibles

- ▶ Pour un écoulement non visqueux à faible nombre de Mach et à densité constante, les équations de Navier-Stokes incompressibles s'écrivent :

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla P \quad \text{et} \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

- ▶ La résolution des équations de Navier-Stokes incompressibles se fait souvent avec des méthodes dites de “projection”.

■ Projection des équations incompressibles

- ▶ La méthode de projection de Chorin (1968) est basée sur la décomposition d'Helmholtz-Hodge du champ de vitesse.

- ▶ Etape de prédiction pour avancer entre autres la partie solénoïdale

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = 0$$

- ▶ Etape de correction pour corriger la partie irrotationnelle

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla P \quad \text{avec}$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla P \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}$$

Équation de Poisson

- ▶ Il faut également faire attention aux conditions limites

■ Résolution de l'équation de Poisson

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla P \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t}$$

► L'équation de Poisson est une équation elliptique ...

$$\frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} \ddots & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 0 & & 0 & \\ & & \ddots & & 0 & \\ 0 & 1/\Delta x^2 & -2/\Delta x^2 & 1/\Delta x^2 & 0 & \\ & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & & & \ddots & \\ & & & & & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} \Big|_i \end{pmatrix}$$

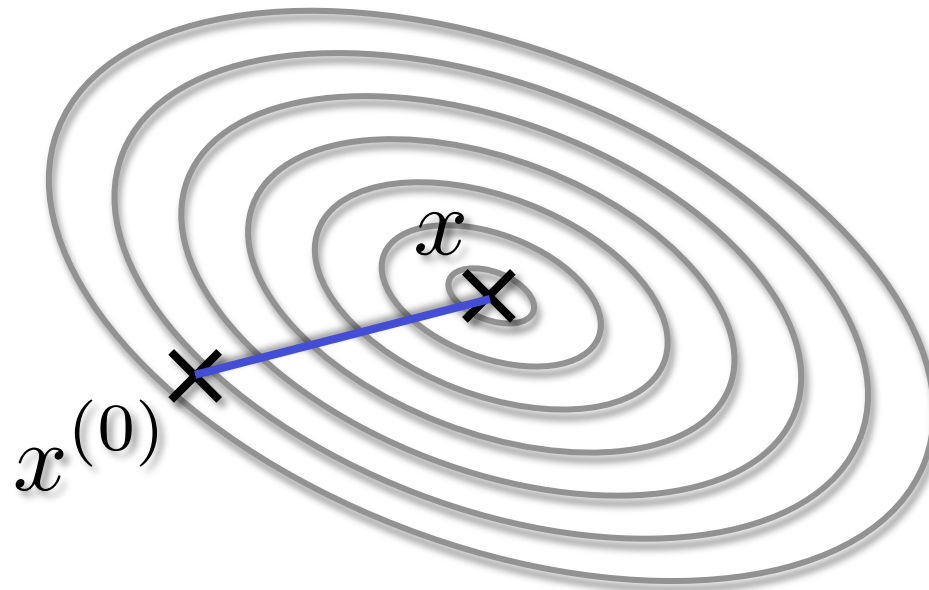
► La matrice A est tridiagonale (2nd ordre), symétrique et à diagonale non-dominante. Il faut donc des solveurs linéaires adaptés.

■ La méthode du gradient conjugué

- ▶ L'idée est de minimiser la fonction f dont le gradient est le système

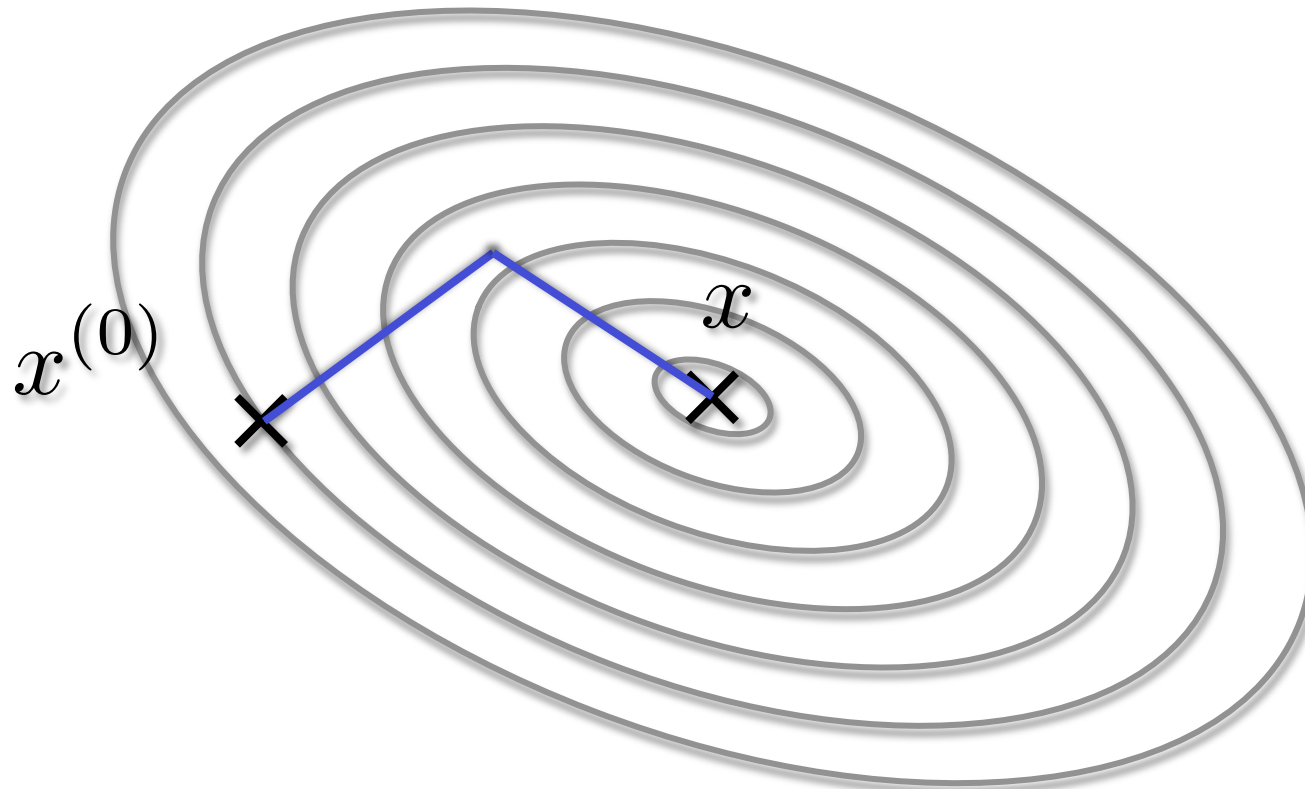
$$f(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b \quad \nabla f(x) = A x - b$$

- ▶ La minimisation doit se faire uniquement avec des produits de A et d'un vecteur ou avec des produits vecteur-vecteur



■ La méthode du gradient conjugué

- ▶ La méthode du gradient conjugué descend en suivant des directions orthogonales dans une certaine base vectorielle pour minimiser la distance à la solution.



- ▶ Le problème converge en un nombre d'itérations inférieur ou égal à la dimension du problème

■ La méthode du gradient conjugué

▶ L'algorithme complet $x^{(0)} = 0, r^{(0)} = b, p^{(1)} = r^{(0)}$

▶ Tant que $\|r^{(k)}\|_{\infty} > \epsilon$ {

$$\alpha^{(k+1)} = \frac{p^{(k+1)T} r^{(k)}}{\langle p^{(k+1)}, p^{(k+1)} \rangle}$$
$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k+1)} p^{(k+1)}$$
$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k+1)} A p^{(k+1)}$$
$$\beta^{(k+1)} = \frac{r^{(k+1)T} r^{(k+1)}}{r^{(k)T} r^{(k)}}$$
$$p^{(k+2)} = r^{(k+1)} + \beta^{(k+1)} p^{(k+1)}$$

▶ Il n'y a qu'un seul produit matrice-vecteur par itération

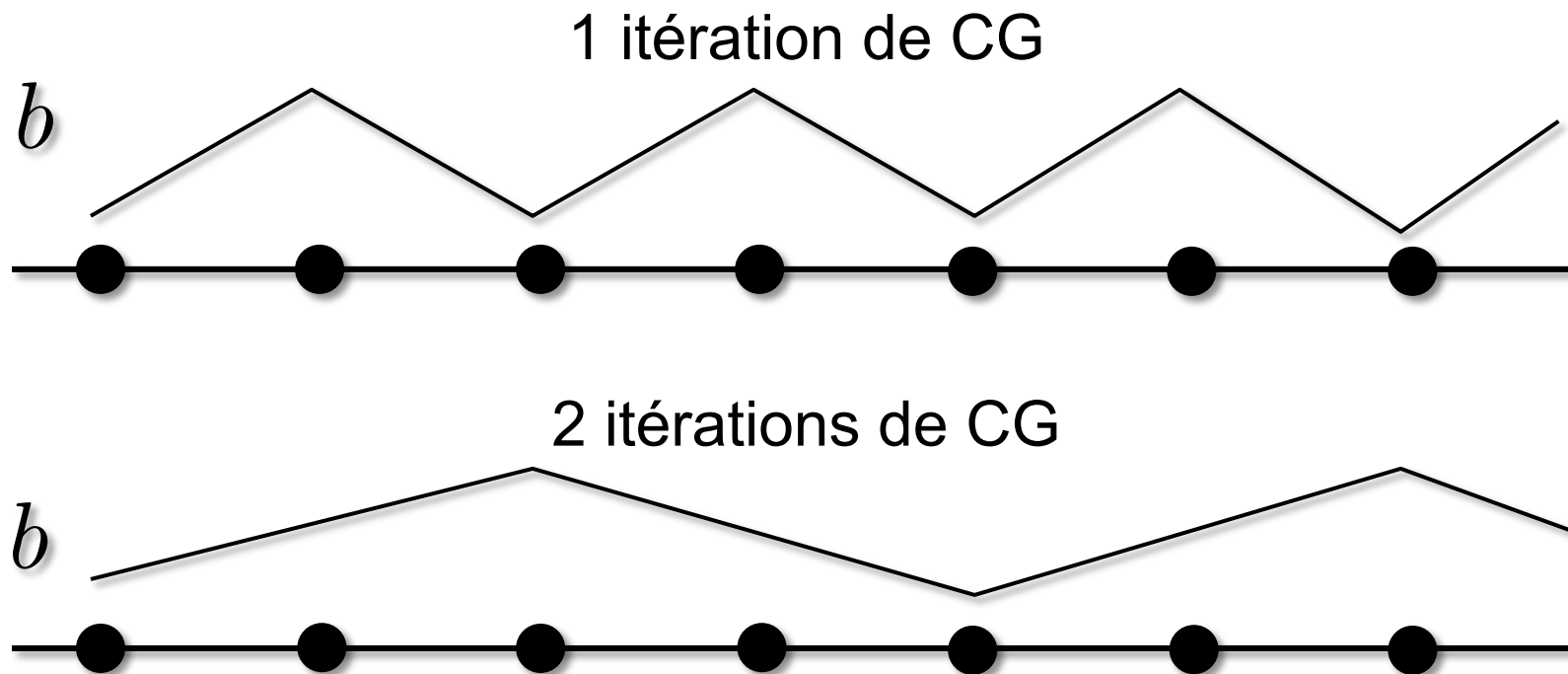
■ Le préconditionnement

- ▶ Le gradient conjugué convergence en un nombre d'itérations égal à la dimension du problème. Le coût est en N^4 en 3D.
- ▶ Au lieu de résoudre $Ax = b$, on peut chercher à résoudre le problème équivalent $K^{-1}Ax = K^{-1}b$
- ▶ Un préconditionnement courant est de prendre K égale à la diagonale de A . Ainsi, le problème à résoudre a toujours une diagonale unitaire.
- ▶ Il existe de nombreuses méthodes de préconditionnement :
 - Multi-grilles géométriques et algébriques (MG, AMG)
 - Déflation (DPCG)
 - Incomplete Cholesky (ICCG), ...

■ Les méthodes multi-grilles

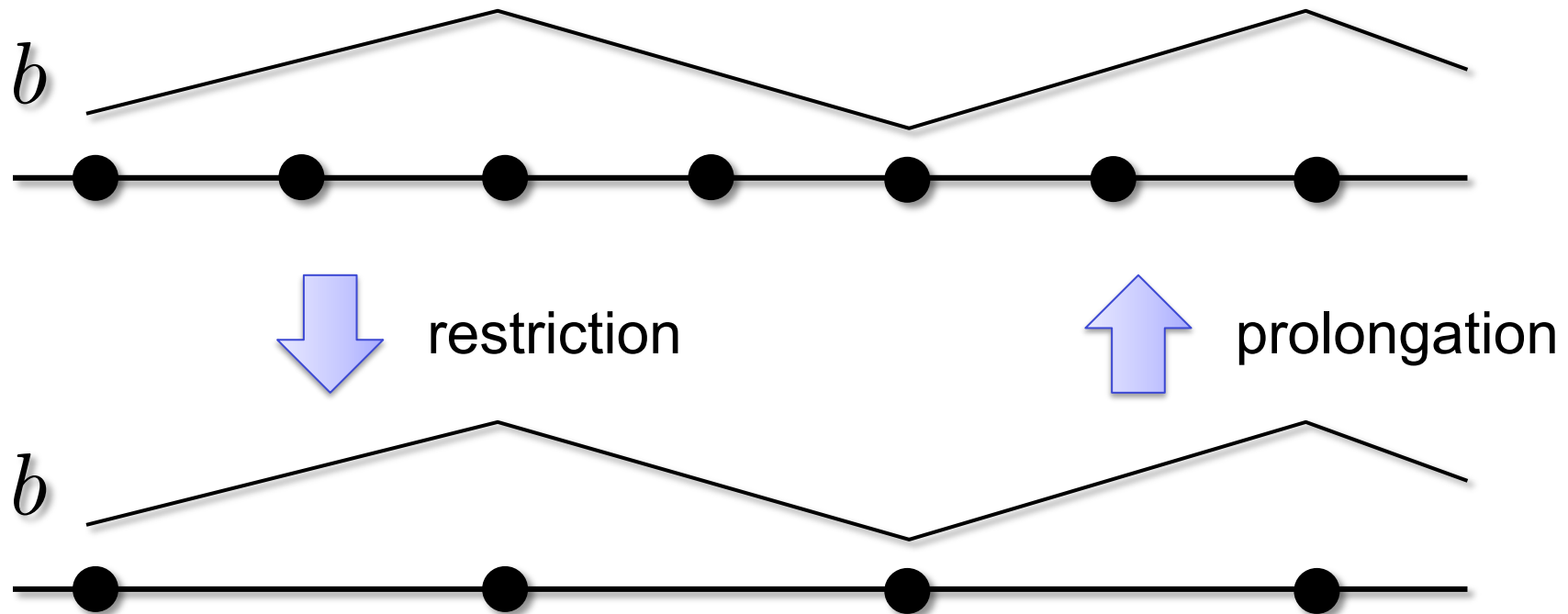
- ▶ En fonction des fréquences dans le membre de droite b ou les valeurs propres de la matrice A , le problème prend plus de temps à résoudre

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = b \quad \text{sur un domaine périodique}$$



■ Les méthodes multi-grilles

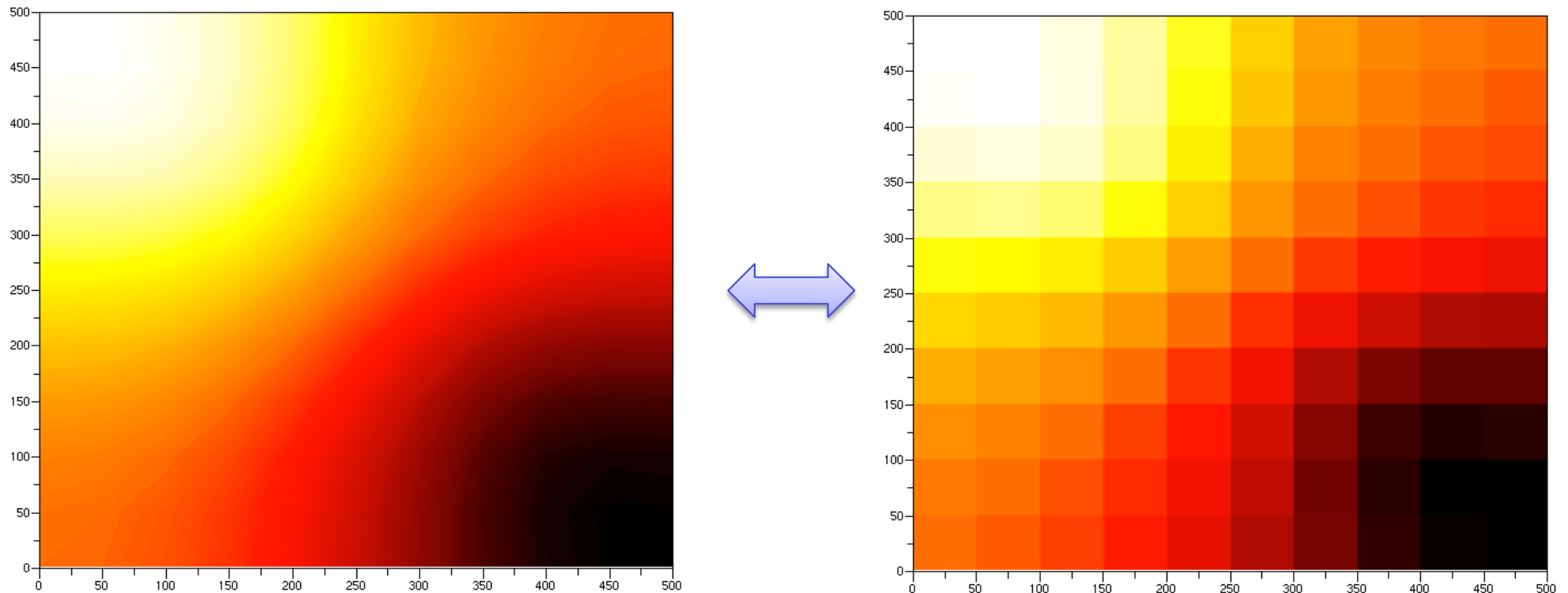
- ▶ L'idée des méthodes multi-grilles et de déflation consiste à utiliser des maillages plus grossiers pour retirer les basses fréquences



- ▶ Sur le maillage grossier, les basses fréquences sont devenues des hautes fréquences ...

■ La déflation

- ▶ Il s'agit d'une méthode très proche du multi-grille algébrique

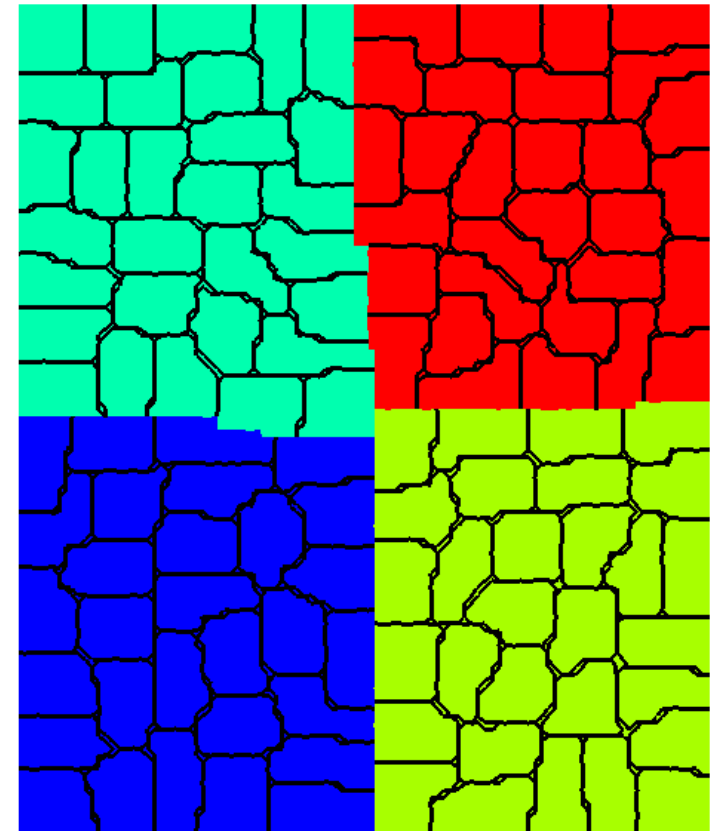
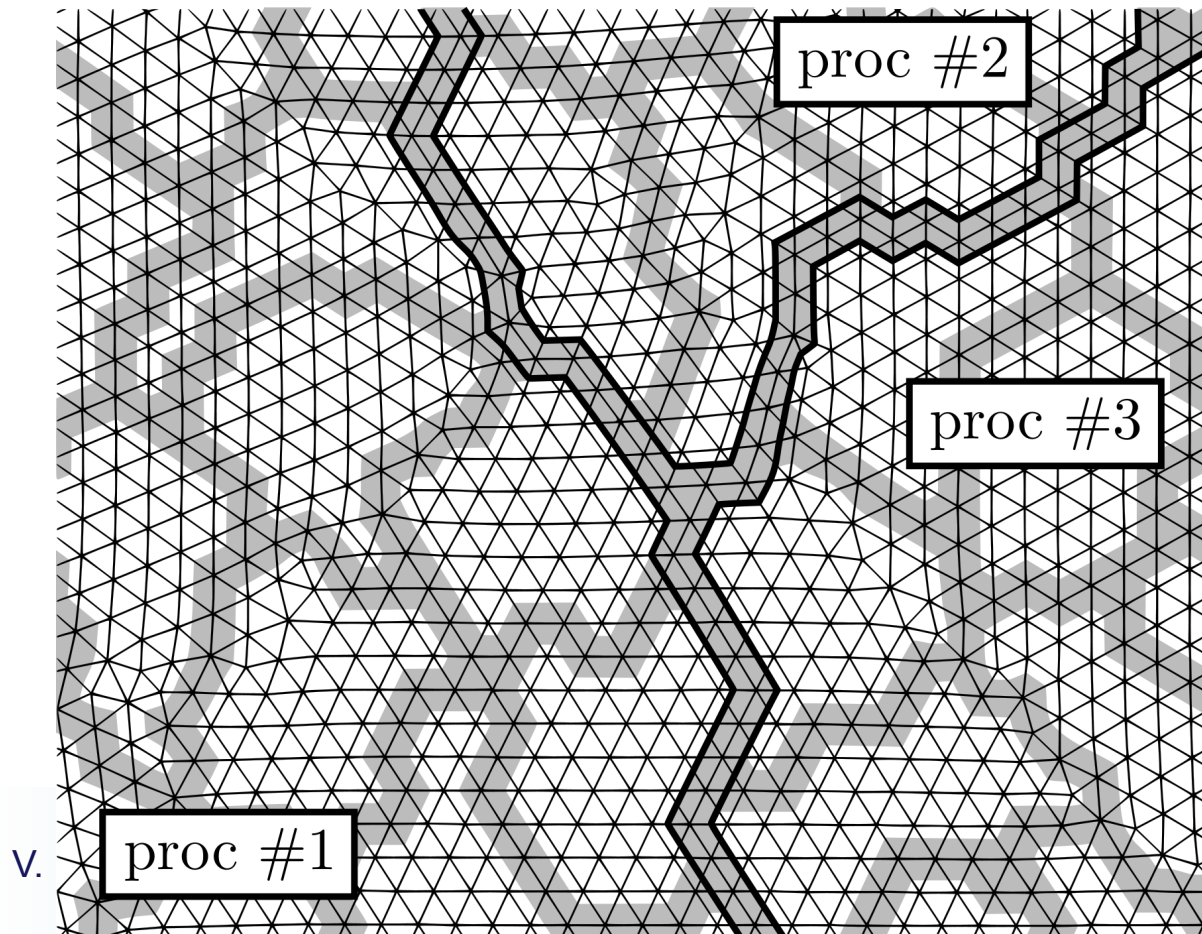


- ▶ Le préconditionnement est basé sur un projecteur

$$P = I - W \hat{A}^{-1} W^T A \quad \hat{A} = W^T A W$$

■ Implantation dans YALES2

- ▶ L'avantage de la déflation par rapport aux multi-grilles tient du fait que la projection est facile à réaliser alors que les restrictions et prolongations des multi-grilles sont plus délicates.
- ▶ On peut profiter de la double décomposition de domaine pour implanter la déflation :

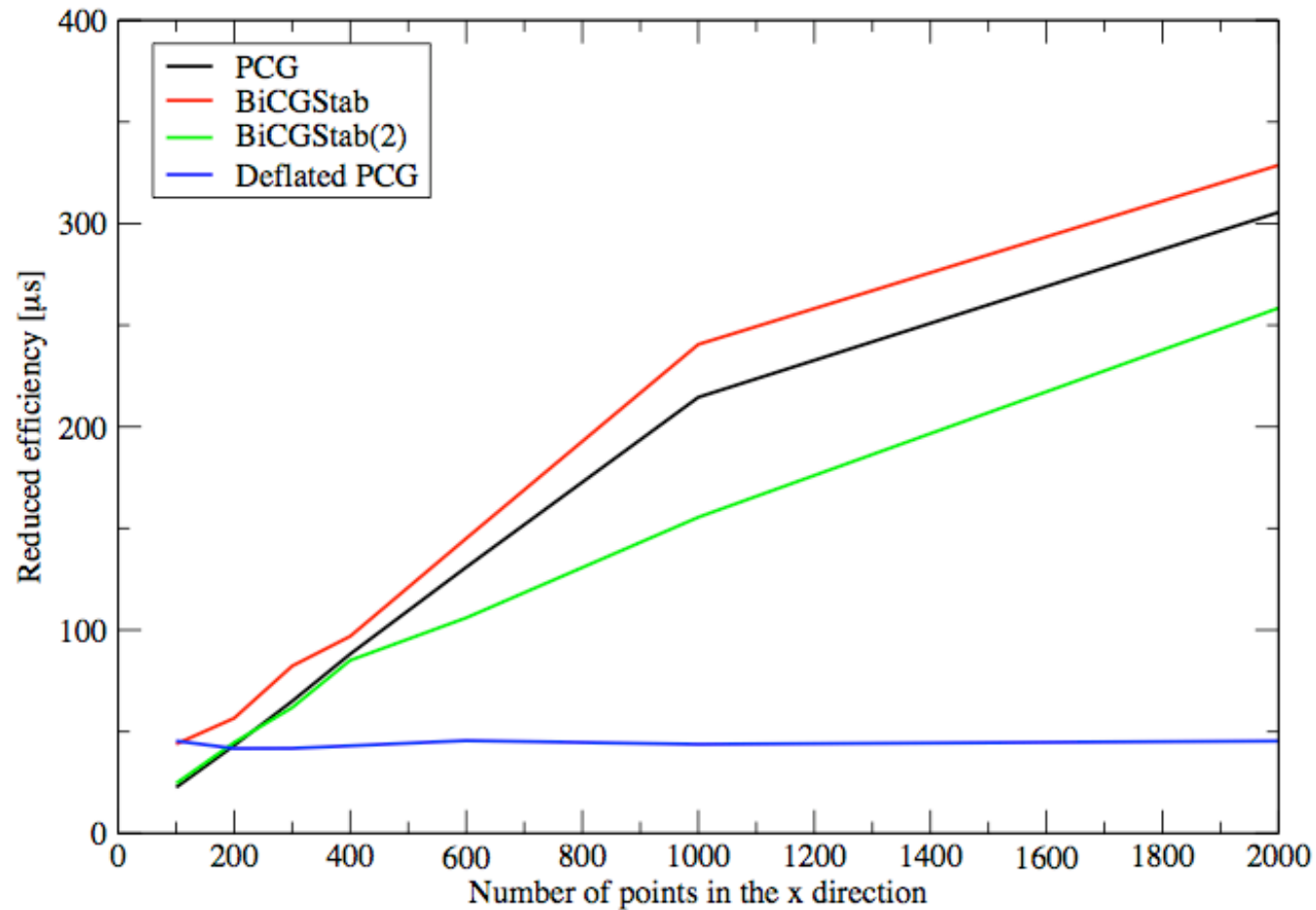


■ Comparaison de méthodes

▶ Quelques résultats sur des maillages cartésiens 2D

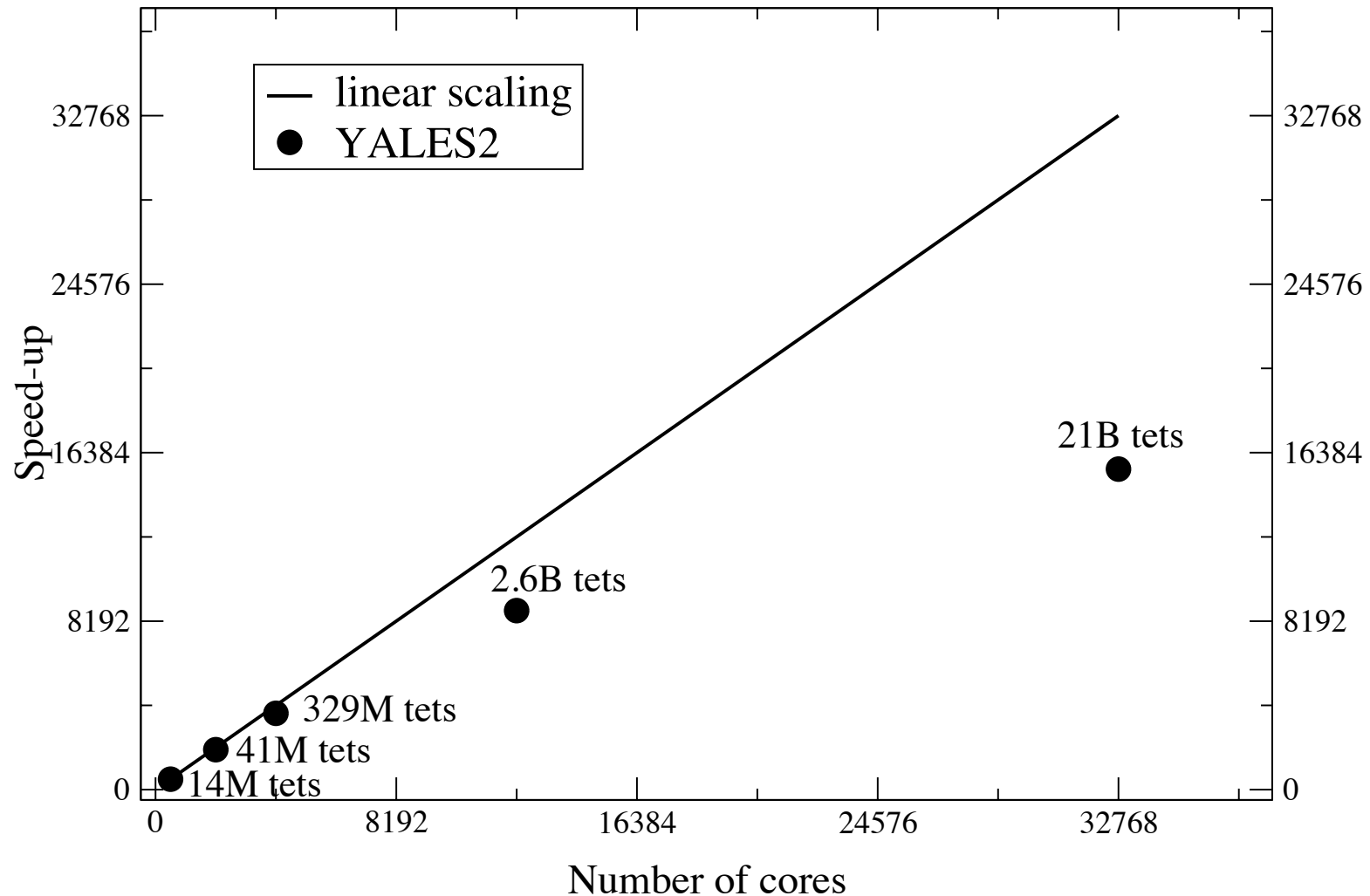
Reduced efficiency for the Poisson solver (cpu*nprocs/nnodes)

Square box, NELEM_PER_GROUP=200, Convergence=1E-10



■ Performances en massivement parallèle

▶ Weak scaling sur les machines Blue Gene/P à l'IDRIS et à JUELICH



■ Leçons apprises et perspectives

- ▶ Il est difficile de bien connaître à la fois les architectures de calcul, les méthodes numériques et la modélisation. Il faut donc aller chercher les connaissances où elles existent (IDRIS, ...).

- ▶ Quelques leçons apprises sur le calcul massivement parallèle
 - Privilégier les communications asynchrones avec les RECV avant les SEND
 - Les IO séquentielles fonctionnent bien à condition de limiter le nombre de processeurs, qui lisent ou écrivent simultanément
 - Le nombre de fichiers et le nombre d'ouvertures/fermetures sont critiques
 - Les phases de partitionnement peuvent être longues sur plus de 65536 procs

- ▶ Les performances sur les très gros maillages dépendent principalement du solveur de Poisson, qui peut être amélioré
 - Déflation à plusieurs niveaux (thèse M. Malandain)
 - Recyclage de résidus (Fischer 1998, nouvellement implémenté dans YALES2)



Schémas volumes finis du 4^{ème} ordre

Collaboration avec G. Lartigue, CORIA

■ Contexte

- ▶ Les méthodes LES et DNS résolvent un grand nombre d'échelles turbulentes, qui sont plus ou moins bien résolues.
- ▶ Les schémas d'ordre élevé sont plus adaptés à la LES et la DNS car ils permettent de réduire les erreurs de diffusion et de dispersion numériques.
- ▶ De nombreux travaux ont porté sur les méthodes différences finies et éléments finis (éléments spectraux, ...) d'ordre élevé mais il serait souhaitable également d'avoir des méthodes volumes finis d'ordre élevé.

■ Les volumes finis

▶ Problème de transport/diffusion

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = \nabla \cdot (D \nabla \phi)$$

▶ Intégration sur un volume de contrôle avec un schéma temporel simple

$$\bar{\phi}_{\Omega_p} = \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} \phi \, d\Omega$$

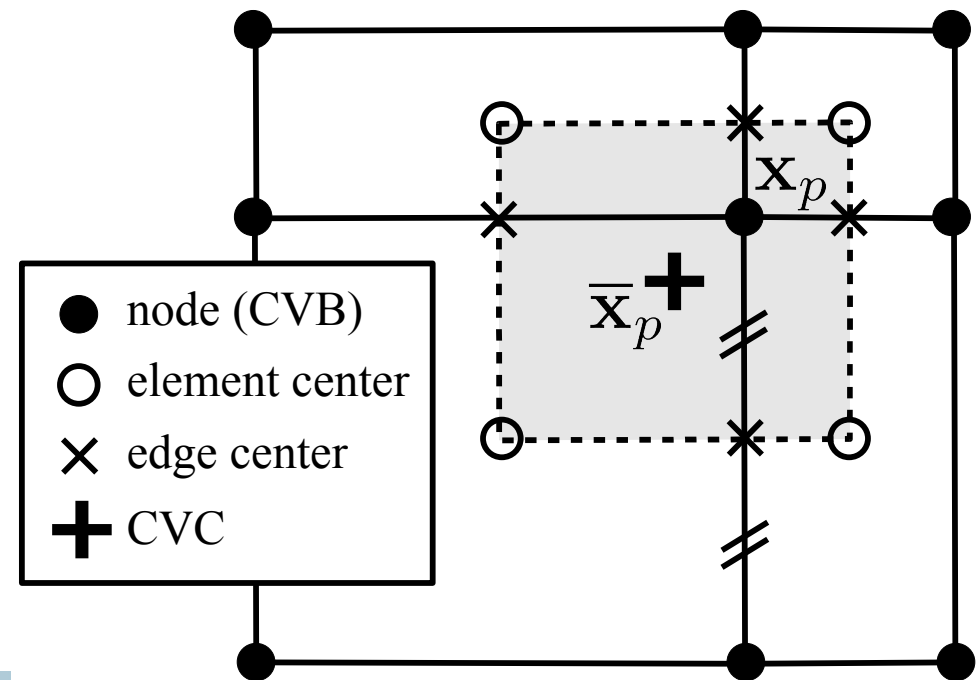
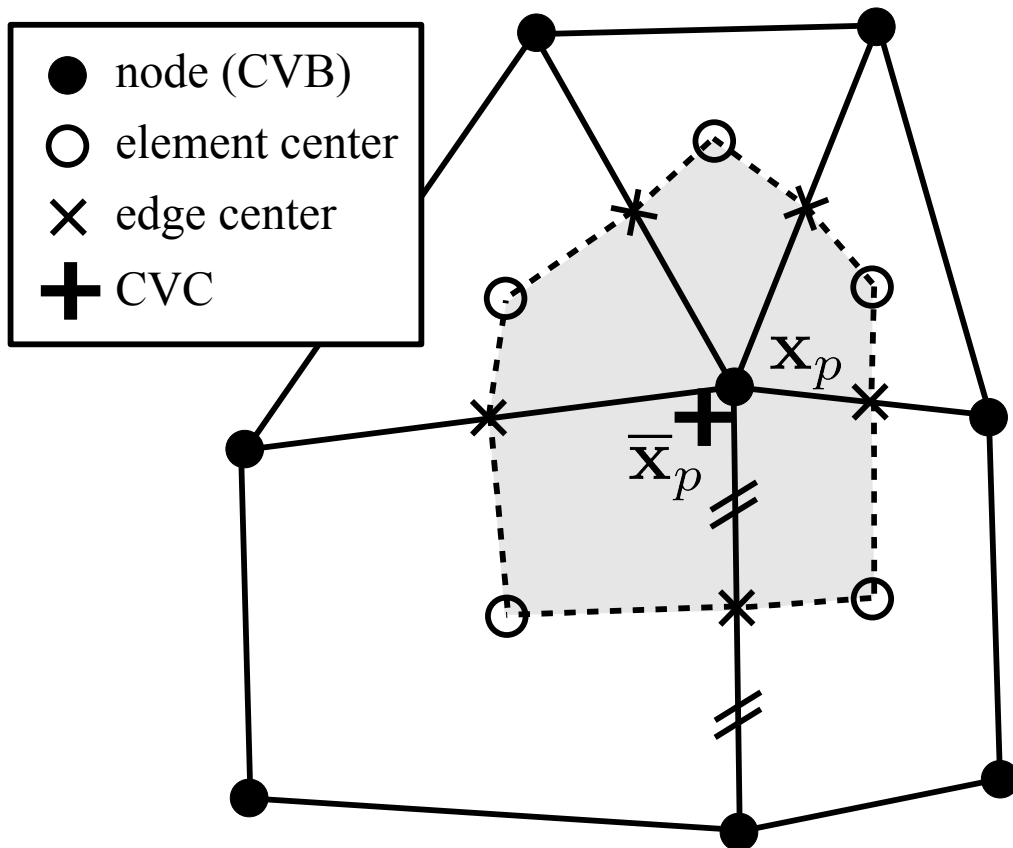
$$\frac{\bar{\phi}_{\Omega_p}(t + \Delta t) - \bar{\phi}_{\Omega_p}(t)}{\Delta t} + \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) \, d\Omega = \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} \nabla \cdot (D \nabla \phi) \, d\Omega$$

$$\frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} (\nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) - \nabla \cdot (D \nabla \phi)) \, d\Omega = \frac{1}{V_p} \int_{\partial \Omega_p} (\phi \mathbf{u} - D \nabla \phi) \cdot d\mathbf{A}$$

Notations et volumes de contrôle

- ▶ Les volumes de contrôle sont basés aux nœuds mais la méthodologie est valable pour toutes les autres types de volumes de contrôle

$$\mathbf{x}_{\bar{p}} = \bar{\mathbf{X}}_{\Omega_p} = \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} \mathbf{x} dV$$



■ Schéma du second ordre

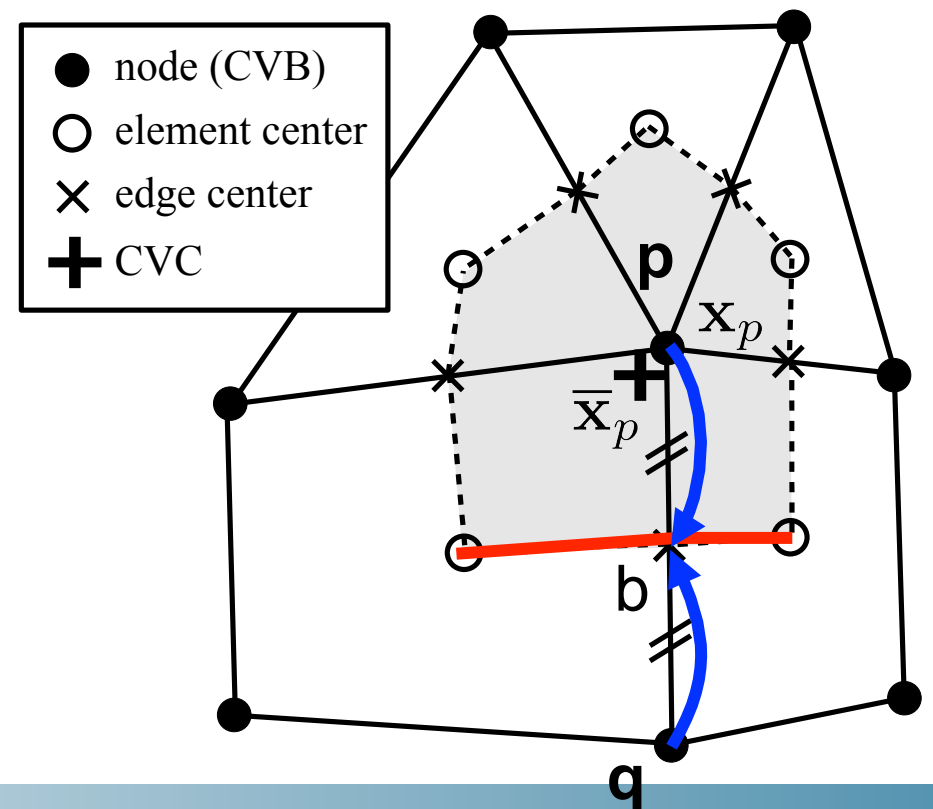
▶ Expression du flux

$$\psi = \phi \mathbf{u} - D \nabla \phi$$

▶ Schéma du 2nd ordre

$$\psi_b = \frac{\psi(\bar{\phi}_{\Omega_p}) + \psi(\bar{\phi}_{\Omega_q})}{2}$$

▶ Ce schéma est en réalité du 1^{er} ordre sur maillages irréguliers



■ Déconvolution de l'intégration volumes finis

▶ Développement en série de Taylor dans l'intégrale

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_{\Omega_p} &= \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} \phi_p \, d\Omega \\ &+ \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} (x^i - x_p^i) (\partial_i \phi)|_p \, d\Omega \\ &+ \frac{1}{2} \frac{1}{V_p} \int_{\Omega_p} (x^i - x_p^i) (x^j - x_p^j) (\partial_{ij}^2 \phi)|_p \, d\Omega + \mathcal{O}(\Delta^3)\end{aligned}$$

$$\bar{\phi}_{\Omega_p} = \phi_p + \overline{\delta x_p^i} (\partial_i \phi)|_p + \frac{1}{2} \overline{\delta^2 x_p^{ij}} (\partial_{ij}^2 \phi)|_p + \mathcal{O}(\Delta^3)$$

▶ Inversion

$$\phi_p = \bar{\phi}_{\Omega_p} - \overline{\delta x_p^i} (\partial_i \bar{\phi}_{\Omega_p}) - \left(\frac{1}{2} \overline{\delta^2 x_p^{ij}} - \overline{\delta x_p^i} \overline{\delta x_p^j} \right) (\partial_{ij}^2 \bar{\phi}_{\Omega_p}) + \mathcal{O}(\Delta^3)$$

■ Augmentation de l'ordre de l'interpolation

▶ Développement limité autour d'un point b

$$\phi = \phi_b + (x^i - x_b^i) \nabla_i \phi_b + \frac{1}{2} (x^i - x_b^i)(x^j - x_b^j) \nabla_{ij}^2 \phi_b + \mathcal{O}(\Delta^3)$$

▶ Pour le nœud p

$$\phi_{b/\Omega_p} = \phi_{\bar{p}} + \delta x_{\bar{p},b}^i (\nabla_i \phi_{\bar{p}}) + \frac{1}{2} \delta^2 x_{\bar{p},b}^{ij} (\nabla_{ij}^2 \phi_{\bar{p}}) + \mathcal{O}(\Delta^3)$$

▶ En utilisant la déconvolution

$$\begin{aligned} \phi_b &= \frac{\bar{\phi}_{\Omega_p} + \bar{\phi}_{\Omega_q}}{2} - \frac{\bar{\delta x}_p^i + \bar{\delta x}_q^i}{2} \nabla_i \left(\frac{\bar{\phi}_{\Omega_p} + \bar{\phi}_{\Omega_q}}{2} \right) \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\delta x_{\bar{p},b}^i \delta x_{\bar{q},b}^j + \delta x_{\bar{q},b}^i \delta x_{\bar{p},b}^j}{2} - \frac{\bar{\delta}^2 x_{\bar{p}}^{ij} + \bar{\delta}^2 x_{\bar{q}}^{ij}}{2} \right) \nabla_{ij}^2 \left(\frac{\bar{\phi}_{\Omega_p} + \bar{\phi}_{\Omega_q}}{2} \right) + \mathcal{O}(\Delta^3) \end{aligned}$$

■ Schéma 4ème ordre pour le transport

▶ Après de nombreuses simplifications

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_{\partial\Omega_b} &= \left(\frac{\bar{\phi}_{\Omega_p} + \bar{\phi}_{\Omega_q}}{2} \right) + \left(M_1^i - \frac{\bar{\delta x}_p^i + \bar{\delta x}_q^i}{2} \right) \nabla_i \left(\frac{\bar{\phi}_{\Omega_p} + \bar{\phi}_{\Omega_q}}{2} \right) \\ &+ \frac{1}{6} \delta x_{\bar{p},\bar{q}}^i \nabla_i (\bar{\phi}_{\Omega_p} - \bar{\phi}_{\Omega_q}) + \mathcal{O}(\Delta^3)\end{aligned}$$

▶ En 1D sur maillage régulier, les schémas VF et DF sont identiques !

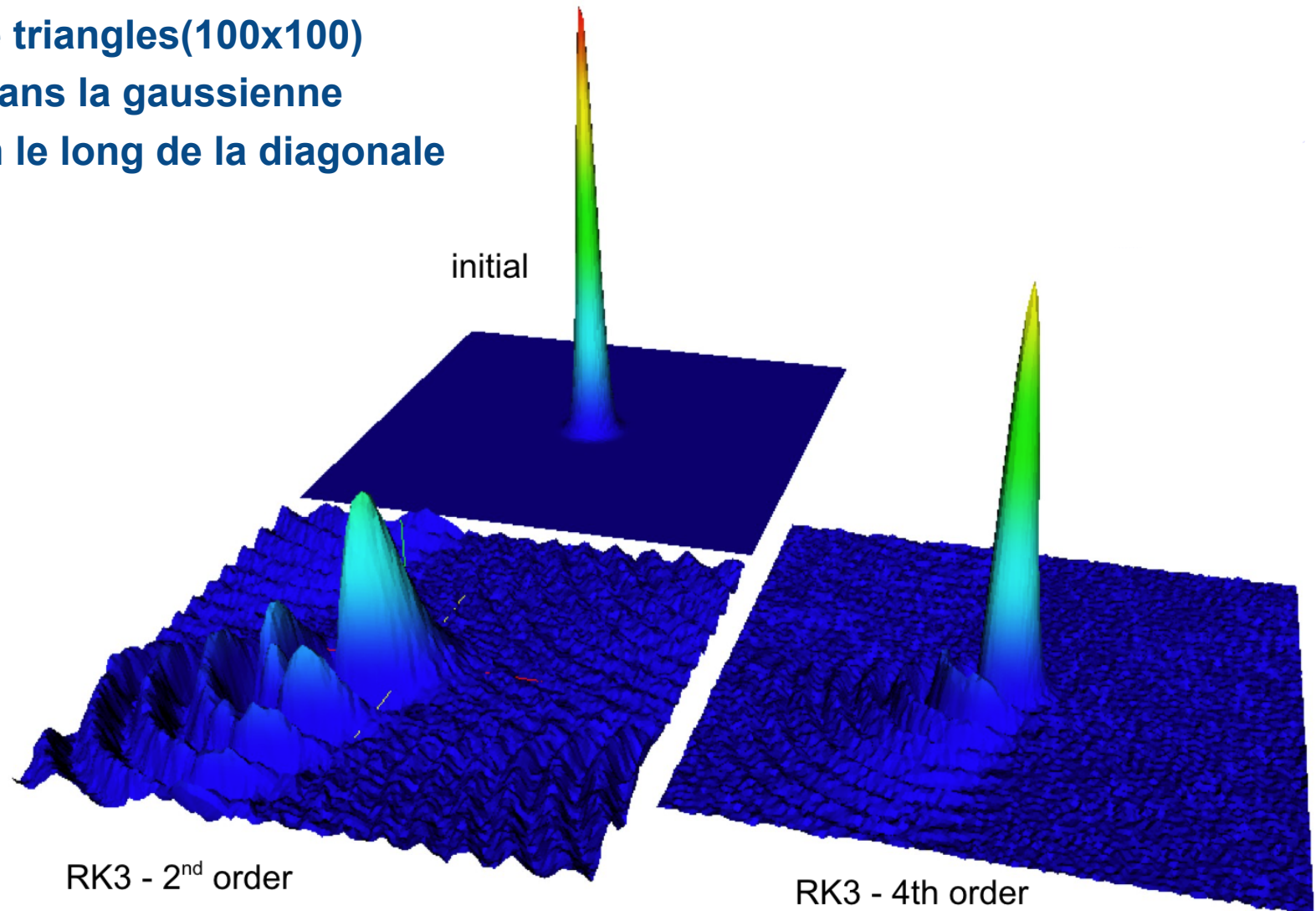
$$\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{-\bar{\phi}_{i+2} + 7\bar{\phi}_{i+1} + 7\bar{\phi}_i - \bar{\phi}_{i-1}}{12}$$

▶ On peut faire la même chose pour la diffusion

■ Performances du schéma 4ème ordre

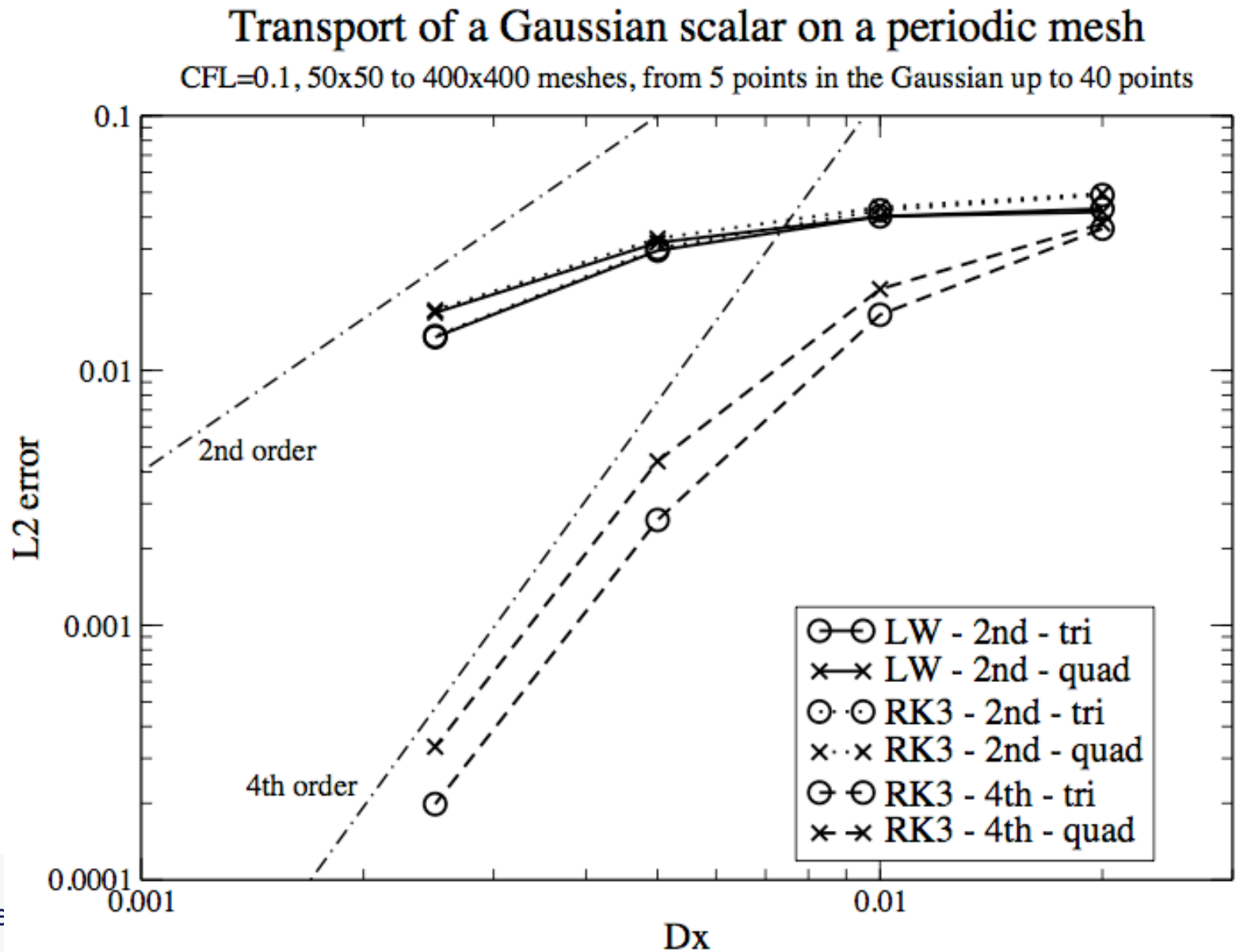
▶ Convection d'une gaussienne sur maillage non-structuré

- Maillage de triangles(100x100)
- 10 points dans la gaussienne
- Convection le long de la diagonale



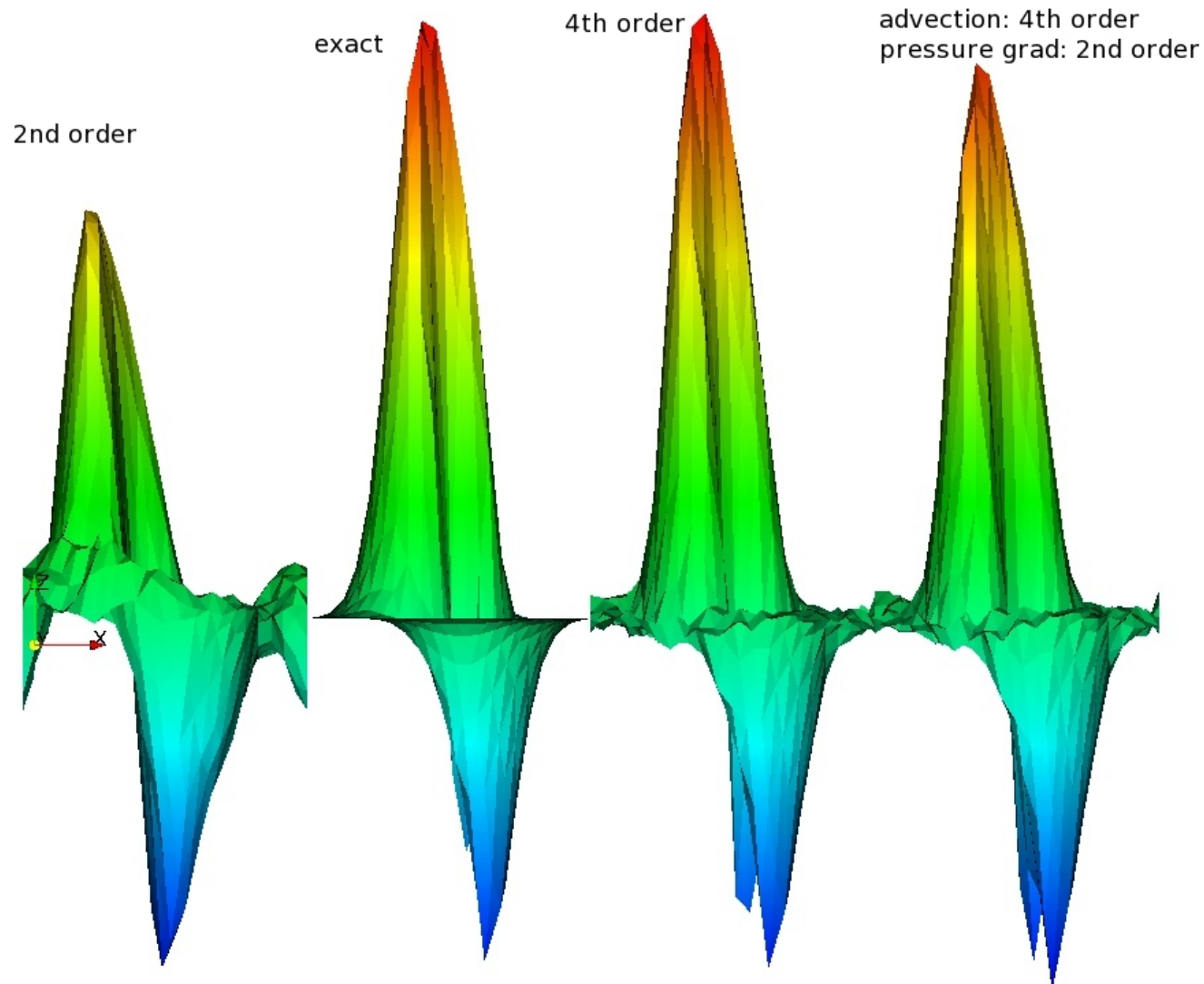
■ Performances du schéma 4ème ordre

▶ Sur différents types d'éléments



■ Performances du schéma 4ème ordre

▶ Convection d'un tourbillon sur un maillage cartésien 2D

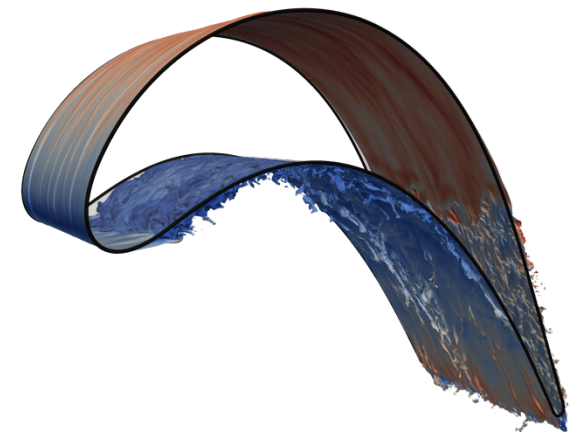
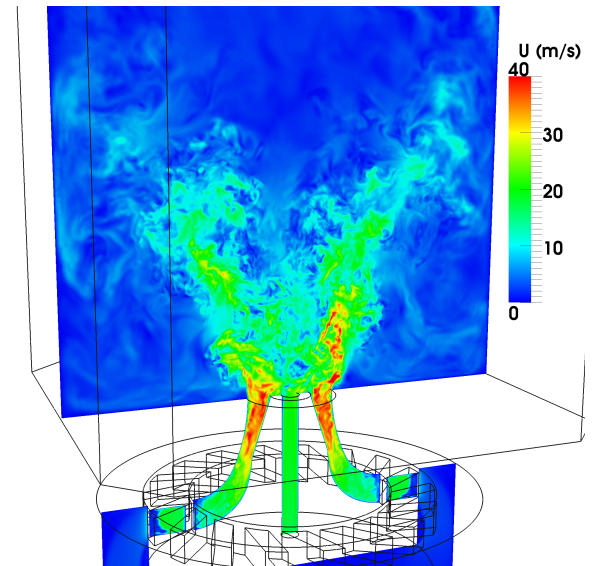




Conclusions et perspectives

■ Conclusions

- ▶ Avec l'augmentation de la puissance de calcul, de nouveaux problèmes sont à notre portée
 - Turbulence, combustion et atomisation sur des maillages très résolus
- ▶ Le métier de modélisateur change rapidement
 - Les simulations sont de plus en plus multi-physiques : couplage combustion, rayonnement, thermique du solide, ...
 - L'exploitation des nouveaux moyens de calcul devient de plus en plus technique : tourner sur 295 000 cœurs est presque un métier
- ▶ Il est donc important de mutualiser les outils et les connaissances.



■ Perspectives

- ▶ **En 2011, un effort important portera sur le couplage de tous les solveurs de YALES2 et sur le développement de nouveaux solveurs**
 - Solveurs Navier-Stokes compressibles explicite et implicite
 - Solveur ALE pour les maillages déformables

- ▶ **Aller vers la simulation « optimale » : la solution finale doit être indépendante de l'utilisateur. Il est donc nécessaire de disposer d'algorithmes**
 - De génération automatique de maillage
 - De raffinement local automatique de maillage

- ▶ **S'adapter aux nouvelles architectures de calcul**
 - Massivement multi-cœurs
 - GPU

■ Références

▶ Articles

- Moureau, V., Domingo, P. & Vervisch, L., 2010, « From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame: Filtered Laminar Flame-PDF modelling », *Combustion and Flame*, in press.
- Moureau, V., Domingo, P., Vervisch, L. & Veynante, D., 2010, « DNS analysis of a Re=40,000 swirl burner », proceedings of the Center for Turbulence Research 2010 Summer Program, Stanford University, CA, USA.
- Moureau, V., Domingo, P. & Vervisch, L., 2010, « Design of a massively parallel CFD code for complex geometries », invited paper in *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*, in press.

▶ Conférences

- Moureau, V., Domingo, P. & Vervisch, L., 2010, « Studying Swirling Flames using Highly Resolved Simulations of an Industrial Premixed Burner », ECCOMAS CFD2010 conference, Lisbon, Portugal.
- Vervisch, L., Nguyen, P. D., Lodier, G., Moureau, V. & Domingo, P., 2010, « Turbulent Combustion Modeling: New Approaches for Highly Refined Simulations », invited lecture, ECCOMAS CFD2010, Lisbon, Portugal.

▶ Site web

- YALES2 homepage: <http://nonpremixed.insa-rouen.fr/~moureau/yales2.html>

▶ Prix

- 3rd of the 2010 Bull-Joseph Fourier prize for promoting super-computing



Merci pour votre attention