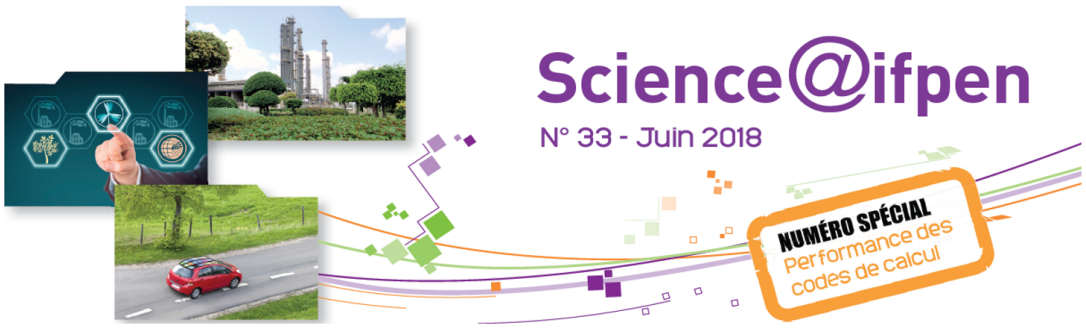


Rédigé le 09 juillet 2018

15 minutes de lecture

Actualités

Recherche fondamentale

Énergies renouvelables **Énergies éoliennes** **Hydrocarbures responsables**

Modélisation et simulation des bassins et réservoirs

Numéro spécial **Performance des codes de calcul**



Le domaine de l'énergie fait largement appel aux **simulations numériques et au calcul scientifique** : pour gérer les **réserves d'hydrocarbures**, exploiter la **géothermie**, ou concevoir un **parc éolien**, par exemple.

Or, les modèles physiques sont de plus en plus complexes, avec des **couplages entre l'hydraulique, la mécanique, la chimie, la thermique**. Les méthodes numériques doivent, en outre, traiter des changements de phase ou des milieux hétérogènes et multi-échelles, pouvant comporter des

discontinuités évolutives. Les algorithmes utilisés requièrent de ce fait un grand nombre d'opérations. Grâce aux **algorithmes parallèles**, combinés à des **modèles de programmation spécifiques**, données et opérations sont distribuées entre plusieurs ressources de calcul — **les processeurs, les cœurs ou les cartes graphiques** — et l'enjeu porte alors sur la communication entre ces entités.

Pour améliorer la performance des codes, IFPEN a également mis au point des algorithmes basés sur une décomposition en sous-domaines, notamment pour des **simulations particulaires** et des **systèmes linéaires de grande taille**. IFPEN développe aussi des méthodes adaptatives, basées sur des changements d'échelle et des traitements statistiques ou des estimations d'erreur a posteriori.

Bonne lecture,

Jocelyne Erhel, Membre du Conseil scientifique d'IFPEN

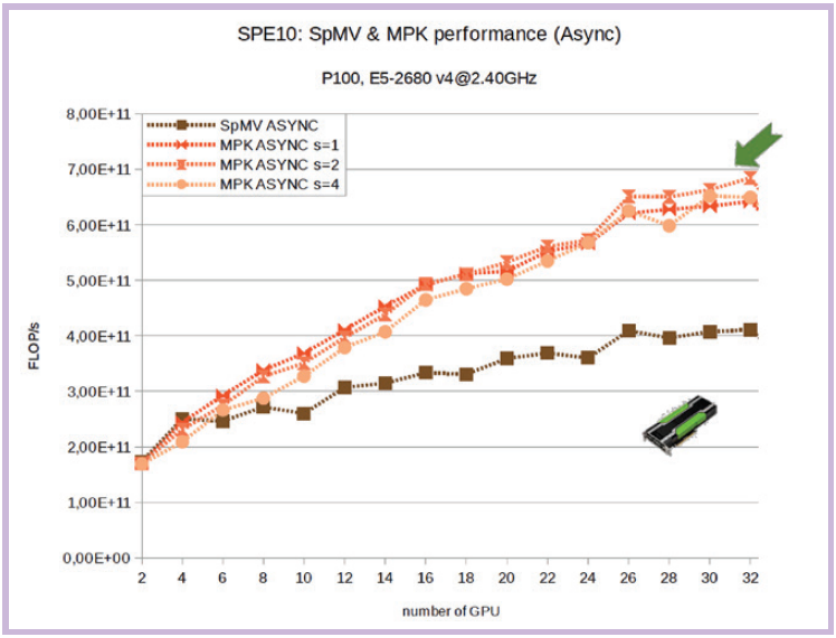
Voir le PDF de la lettre

LES BRÈVES

La **simulation numérique** est un outil stratégique, complémentaire aux études expérimentales, pour la **compréhension fine des phénomènes physiques complexes**. Dans un grand nombre d'outils de simulation[a], la performance dépend fortement de l'**efficacité de la résolution des systèmes linéaires**, étape la plus consommatrice en temps de calcul.

Recourir à la puissance de calcul parallèle, offerte par les **architectures matérielles complexes et hétérogènes**[b] des moyens de calcul actuels, permet alors d'obtenir les résultats des simulations avec la précision désirée dans un temps acceptable. Toutefois, les algorithmes de résolution n'étant pas en mesure d'exploiter pleinement ces architectures, une dégradation rapide des performances est constatée au-delà d'un certain nombre d'unités de calcul.

Nos efforts de recherche ont donc porté sur la **conception d'algorithmes parallèles pour l'inversion de grandes matrices creuses**. Ces algorithmes tirent parti des architectures matérielles modernes grâce à des modèles de programmation adaptés. Ceci a conduit à développer la **bibliothèque MCGSolver**, un vaste choix de **solveurs linéaires itératifs préconditionnés**, parallélisés pour les **architectures multicœurs et multi-GPU**(1). Cette bibliothèque gère, de façon transparente et découplée, des algorithmes numériques et les différents niveaux de parallélisme, au travers de nombreux modèles de programmation[c].



Gain de performance obtenu grâce à la minimisation des communications

MCGSolver est enrichi en permanence par de nouvelles méthodes, telles que celle basée sur la **minimisation des communications** (figure). Cette bibliothèque est disponible dans les outils de simulation d'IFPEN via la **brique logicielle ALIEN**, co-développée avec le CEA, qui rend accessible un large choix de solveurs linéaires préconditionnés au moyen d'une unique interface.

a - *Comme pour le stockage géologique de CO_2 ou les écoulements particulaires multi-échelles.*
b - *Composées de processeurs multi-coeurs (x86/ARM) et de cartes accélératrices (GPU).*
c - *MPI, HARTS(2), OpenMP, CUDA, SIMD.*

---

(1) *A. Anciaux-Sedrakian, J. Eaton, J-M. Gratien,T. Guignon, P. Have, C. Preux, O. Ricois*
DOI :10.2118/173223-MS
(2) *A. Roussel, J-M. Gratien, et T. Gautier*
DOI :10.2516/ogst/2016020

Contact scientifique : **Ani ANCIAUX SEDRAKIAN**

> NUMÉRO 33 DE SCIENCE@IFPEN

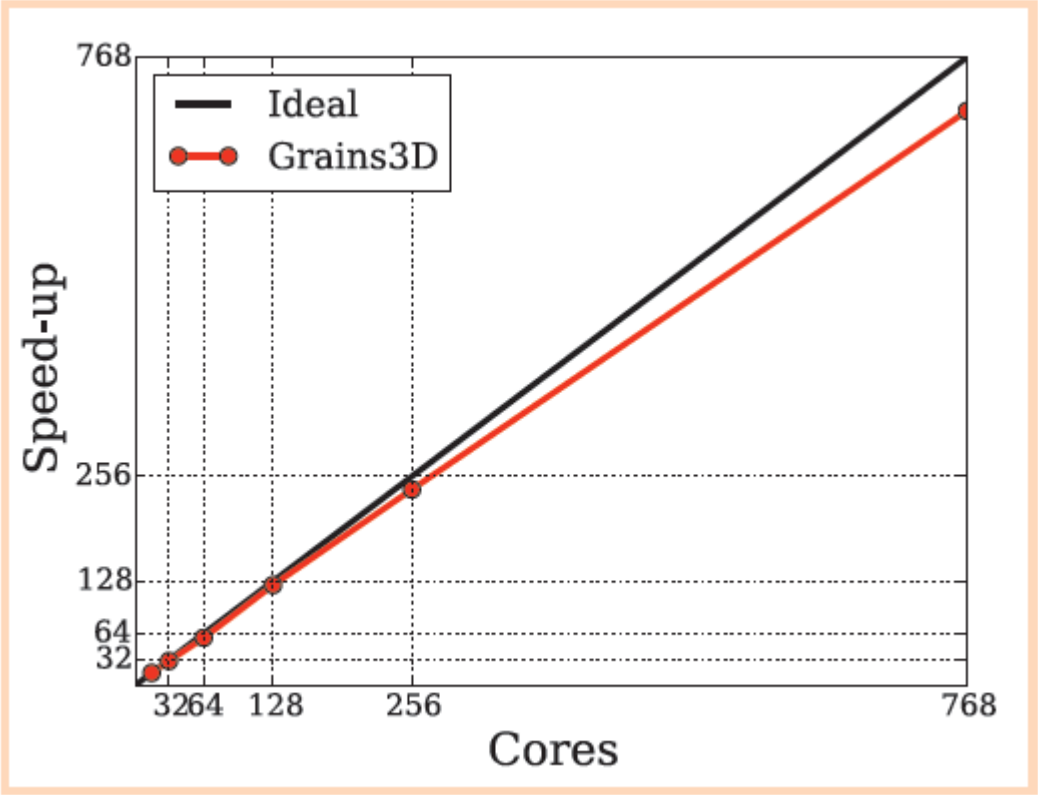
Résolution de systèmes linéaires creux sur les architectures hétérogènes

Les avancées technologiques des dernières décennies en matière de **processeurs**, notamment les **architectures multicœurs**, ont fait progresser de façon significative les métiers de la **simulation numérique et le calcul haute performances (HPC)**[a].

Les **méthodes de parallélisation** utilisées pour accroître la **performance du calcul numérique** sont utiles mais leur rendement décroît quand le degré augmente. Pour contourner cette limitation, les chercheurs d'IFPEN ont développé des approches pragmatiques.

Deux exemples, mis en œuvre respectivement sur les **codes de calcul Grains3D et PeliGRIFF** d'IFPEN, illustrent leur approche :

• Le premier a consisté à développer des méthodes spécifiques (par ex. sur des techniques de décomposition de domaine[b]) de façon à optimiser le « rendement » des calculs HPC et ainsi éviter les surcoûts liés aux communications entre processeurs.
Sur le plus gros système étudié[c], la performance obtenue sur 768 cœurs(1) (figure) a ainsi été de l'ordre de 91 % du cas idéal.



Performances(d) en calcul parallèle de Grains3D dans des calculs de lits fluidisés

• Une seconde méthode a reposé sur une **stratégie multi-échelle**(2), consistant à modéliser et à résoudre les problèmes physiques à petite échelle, puis à transférer, **par cascade vers les grandes échelles**, des données filtrées au moyen d'approches statistiques.

Cette démarche a été déployée avec succès dès 2015, dans le cadre du projet collaboratif ANR **MORE4LESS**, consacré à la **modélisation multi-échelle des écoulements particulaires réactifs**.

a - *High Performance Computing.*
b - *Séparation en sous-problèmes couplés, définis sur des domaines de taille réduite formant une partition du domaine global.*
c - *Environ 230 millions de particules fluidisées.*
d - *Normalisées*

---

(1) *A. D. Rakotonirina, A. Wachs, Powder Technology, 2015, 154-172.*
DOI : 10.1016/j.powtec.2017.10.033
(2) *A. Esteghamatian, F. Euzenat, A. Hammouti, M. Lance, A. Wachs, International Journal of Multiphase Flow.*
DOI :10.1016/j.ijmultiphaseflow.2017.11.003

Contact scientifique : **abdelkader.hammouti@ifpen.fr**

> NUMÉRO 33 DE SCIENCE@IFPEN

Comment dépasser les limites de la parallélisation ?

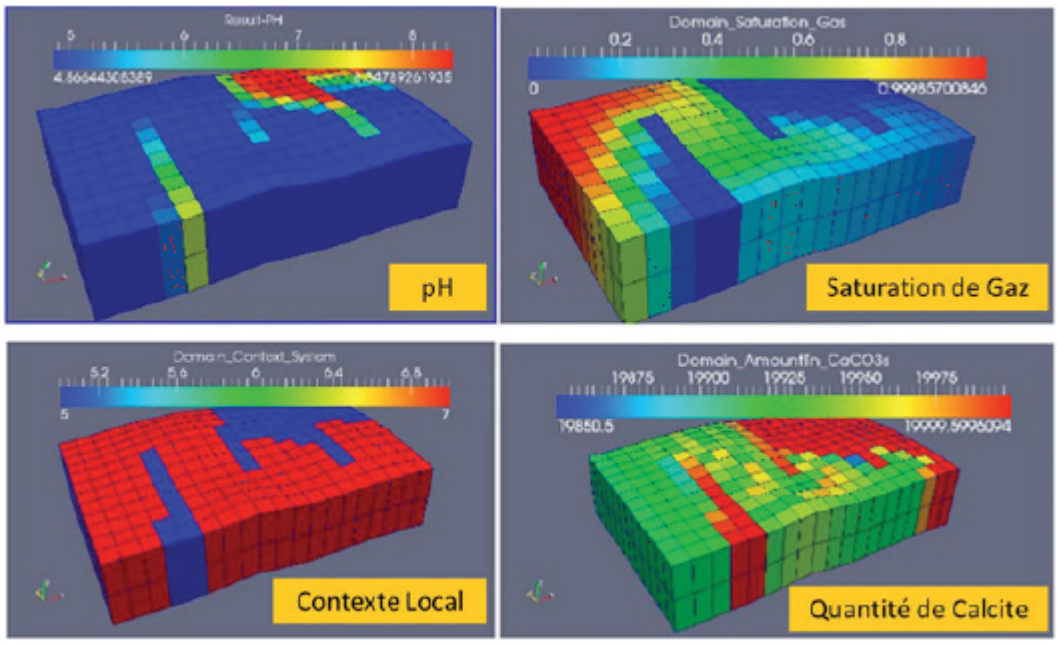
La **simulation de l'écoulement des mélanges multiphasiques (gaz et liquide)** dans les milieux poreux a des applications variées en **géosciences**[a] mais également dans le domaine de l'**ingéniérie** et des **procédés chimiques**.

Dans les simulateurs à usage industriel, les formulations globalement implicites des équations sont un élément central assurant la robustesse et la performance de calcul, tout en conservant un couplage intime entre les écoulements de fluide et la thermodynamique. Des difficultés mathématiques et numériques demeurent toutefois comme, par exemple, pour traiter l'apparition et la disparition des phases de manière simultanée avec le déplacement des constituants. Les méthodes numériques utilisées doivent donc être adaptées pour tenir compte de la **structure variable du système d'équations** et résoudre les inégalités associées.

Diverses solutions innovantes ont été proposées ces dernières années, via une reformulation fondée sur les **contraintes de complémentarité**[b]**, utilisées en optimisation et en contrôle optimal**.

En s'appuyant sur ces nouvelles idées et sur son savoir-faire historique, IFPEN a proposé une approche unifiée et un cadre général facilitant le développement d'**algorithmes** et leur implantation informatique. Ces algorithmes ont été testés au sein de prototypes(1) puis déployés avec succès dans des simulateurs opérationnels.

Par cette approche, on peut, dès à présent, traiter des systèmes couplant les écoulements avec des réactions chimiques(2) (figure), de la **thermique** et de la **compaction**(3).



Exemple de simulation d'un écoulement multiphasique réactif (stockage de CO2 et dissolution de calcite).

Les travaux en cours visent à intégrer des **réactions chimiques cinétiques** et à adapter des **solveurs** issus du monde de l'optimisation.

a - *Stockage du CO_2, stockage de gaz, exploitation des hydrocarbures, géothermie, dépollution des sols.*
b - *Par lesquelles on exprime de manière concise la positivité de deux grandeurs et la nullité d'au moins l'une d'entre elles.*

***(1)* I. Ben Gharbia** *et* **al.**, *SPE Reservoir Simulation Symposium 2015, 23-25 February, Houston.*
DOI : 10.2118/173249-MS
***(2)* T. Faney** *et* **al.**, *Workshop "Reactive Transport Modeling in the Geological Sciences", IHP, Paris. November 17-18, 2015.*
http://www.irisa.fr/sage/RTworkshop-2015/Exposes/Faney.pdf
***(3)* C. Meiller** *et* **al.**, *AAPG ACE, 100th, Houston, USA, 2-5 april 2017*
http://www.searchanddiscovery.com/abstracts/html/2017/90291ace/abstracts/2611970.html

---

Contact scientifique : **anthony.michel@ifpen.fr**

> NUMÉRO 33 DE SCIENCE@IFPEN

Des simulations d'écoulement plus efficaces en s'inspirant du contrôle optimal

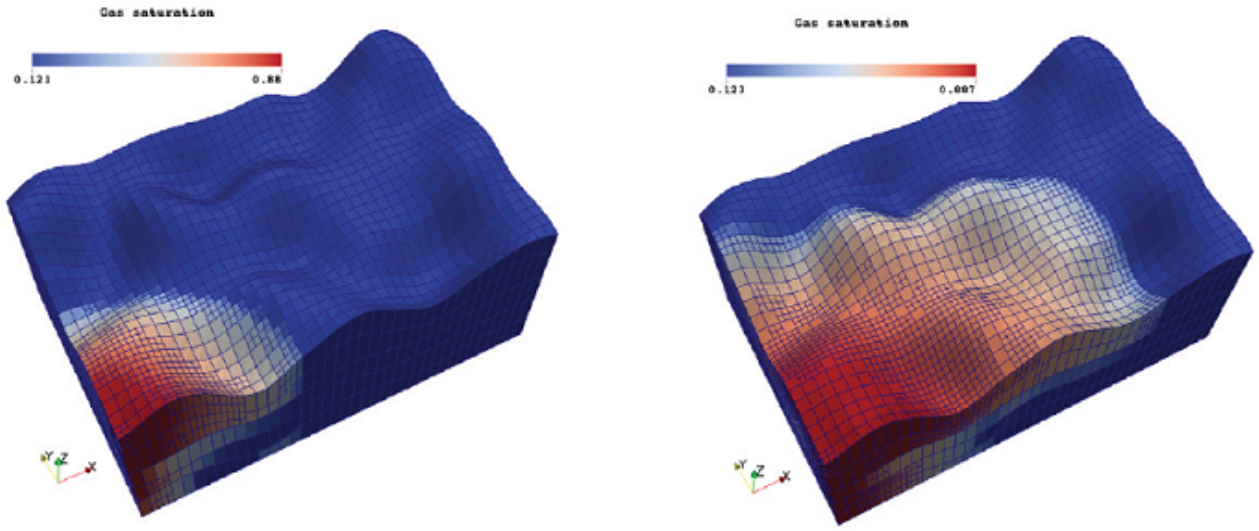
En **simulation numérique**, une représentation suffisamment fidèle des données associées aux modèles physiques exige, dans de nombreux cas, une **très grande grille numérique** qui, malgré les puissances informatiques aujourd'hui disponibles, engendre des temps de calcul excessivement longs.

Ainsi, les **modèles géologiques**, qui couvrent des zones géographiques étendues, nécessitent une grille fine qui peut comporter des **centaines de millions de mailles**. De plus, ils requièrent plusieurs calculs supplémentaires pour le **calage[a] des propriétés de réservoir**[b] à partir de données expérimentales. La chaîne de processus qui s'ensuit alors pour une seule simulation peut rendre le temps de calcul exorbitant.

Pour dépasser ce problème, IFPEN développe et met en œuvre des **stratégies d'accélération**.

L'**adaptation dynamique de maillage** est une solution judicieuse pour économiser tant les ressources en mémoire que les temps de calcul, tout en préservant une qualité suffisante des résultats. On utilise pour cela un niveau de résolution « fin » uniquement dans les zones où il est nécessaire et on se contente d'un niveau plus « grossier » partout ailleurs.

Le succès d'une telle stratégie repose, de façon cruciale, sur l'outil permettant de décider des zones à progressivement raffiner ou déraffiner (figure).



Résultat à 500 et 1 500 jours d'un calcul d'écoulement multiphasique, utilisant un maillage adaptatif.

À cet égard, les **méthodes des estimations d'erreur a posteriori**([1,2]), spécifiquement développées ces dernières années par IFPEN, constituent un outil extrêmement efficace pour le **pilotage des algorithmes de raffinement**. Cette efficacité s'explique par la rigueur mathématique des méthodes employées, à l'inverse d'autres outils plus heuristiques.

Elles ont, de plus, permis de formuler des **critères d'arrêt des solveurs linéaire/non linéaire**, apportant ainsi un gain significatif de temps CPU, ceci sans affecter la précision des résultats.

a - *Processus d'ajustement utilisant des outils d'analyse d'incertitude et d'optimisation.*
b - *Porosités, perméabilités, viscosités des fluides, pressions capillaires, etc.*

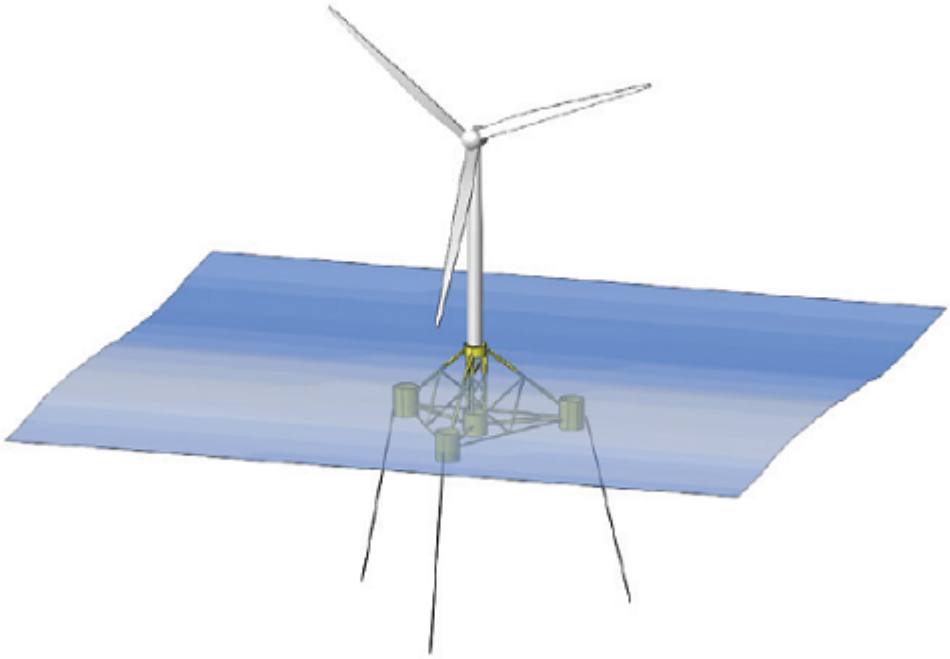
(1) *J.-M. Gratien, O. Ricois, S. Yousef, Oil Gas Sci. Technol (2016), 71, 59.*
DOI : 10.2516/ogst/2016009
(2) *M. Vohralík and S. Yousef. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 331 (2018), 728–760.*
DOI : 10.1016/j.cma.2017.11.027

Contact scientifique : **Soleiman YOUSEF**

> NUMÉRO 33 DE SCIENCE@IFPEN

Plus vite et aussi bien : telle est la devise des méthodes adaptatives

Depuis plusieurs années, IFPEN s'est lancé dans l'aventure de l'**éolien flottant** et a développé dans ce cadre l'**outil de simulation DeepLines Wind™**, en partenariat avec la société Principia(1). Ce logiciel permet de calculer, de manière couplée, les **chargements hydrodynamiques sur le support flottant et ses ancrages**, ainsi que les efforts aérodynamiques qui s'exercent sur les pales. C'est l'estimation de ces derniers qui fait l'objet du **module Wind**, récemment développé par IFPEN et ajouté à l'outil initial **DeepLines** (figure).



Configuration d'une éolienne sur le flotteur IFPEN/SBM Offshore, ayant fait l'objet de simulations avec DeepLines WindT™

La plupart des méthodes de dimensionnement aérodynamique pour l'éolien utilisent des approches analytiques reposant sur la **méthode *Blade Element Momentum***[a]. Pour valider ces approches, une **méthode lagrangienne de type vortex** a été développée(2). Pour cela, la résolution d'un système d'équations (**problème à N-corps**[b]) est nécessaire, ce qui mobilise la quasi-totalité du temps de calcul global. Pour le diminuer, la partie « critique » du calcul a été reportée sur les GPU (*Graphical Processing Units*) en utilisant le **langage spécifique CUDA**[c]. Ceci a substantiellement réduit les temps de calcul, de un à deux ordres de grandeur, rendant ainsi le code opérationnel au quotidien.

Pour poursuivre dans cette voie d'optimisation, des **solutions de type *Fast Multipole Method*** pourraient permettre un gain supplémentaire (d'un ordre de grandeur) sur le coût de calcul.

a - *Méthode basée sur la loi du disque actif et sur une approche « élément de pale » permettant le calcul des forces sur les pales d'éoliennes.*
b - *Problème consistant à résoudre les interactions entre N-corps interagissant suivant une loi physique.*
c - *Compute Unified Device Architecture.*

***(1) C. Le Cunff** et **al.**, 32nd International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering, Nantes, France, 2013.*
***(2) F. Blondel** et **al.**, Congrès français de mécanique, Lille, France, 2017.*

Contact scientifique : **frederic.blondel@ifpen.fr**

> NUMÉRO 33 DE SCIENCE@IFPEN

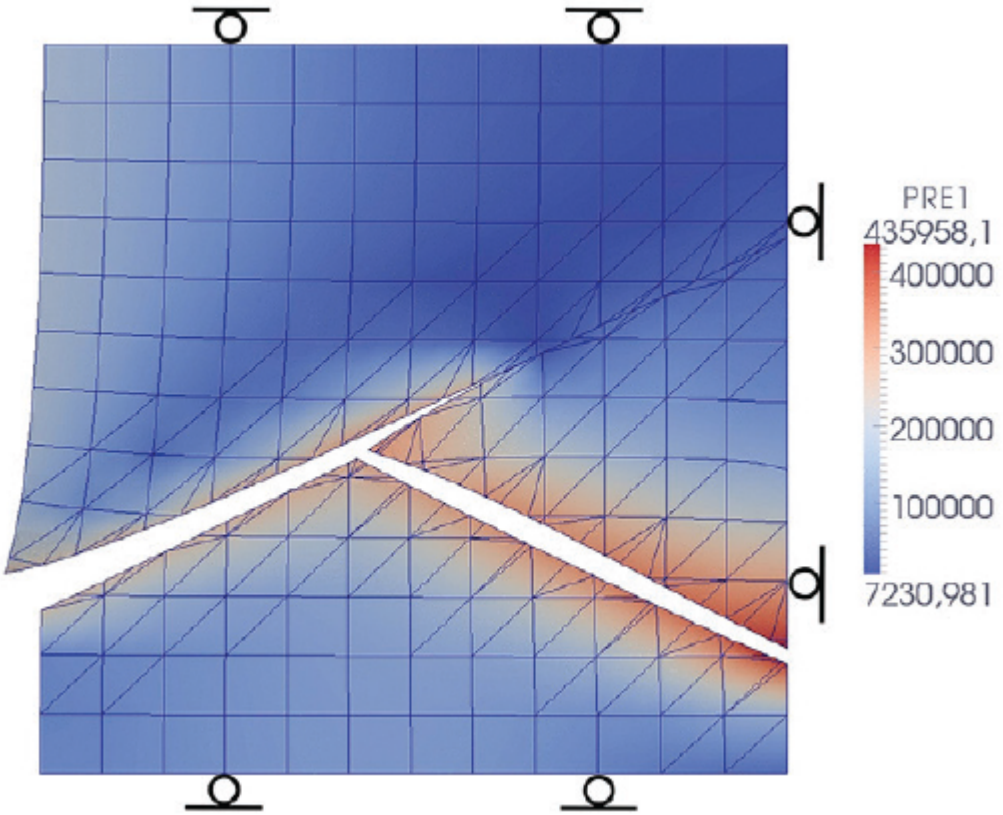
Les GPU aident les éoliennes à prendre le large

Les **fractures naturelles du sous-sol** offrent aux fluides des chemins d'écoulement préférentiels. La **perméabilité globale des roches** qui en résulte est largement mise à profit pour la production énergétique (**géothermie ou récupération d'hydrocarbures**).

En revanche, ces fractures peuvent représenter une difficulté du point de vue de l'**étanchéité des stockages géologiques**. Il est donc essentiel d'anticiper leurs effets induits et de prévoir leurs éventuelles extensions et réorientations, sous l'effet de la **pression des fluides en place** et des **contraintes mécaniques existantes dans le massif rocheux**. C'est dans ce but qu'un **modèle numérique hydromécanique totalement couplé** a été développé.

Ce nouveau modèle(1) est basé sur la **méthode des éléments finis étendue (X-FEM)**, qui permet de s'affranchir des problèmes relatifs à la génération et à la modification du maillage de calcul en présence de fractures et suite à leur évolution[a]. L'écoulement dans ces dernières est régi par leur ouverture et par les échanges de fluides qui ont lieu avec le milieu poreux environnant. Le comportement mécanique de la fracture est par ailleurs décrit par un modèle de zone cohésive.

Dénommé **HM-XFEM**, le **modèle hydromécanique** a été validé par comparaison avec des solutions analytiques et testé sur des cas synthétiques[b], afin de vérifier sa capacité à prédire le comportement des fractures en intégrant les effets des contraintes mécaniques (figure).



Influence des contraintes mécaniques sur les chemins d'écoulement dans le cas de deux fractures connectées[c](fluide en provenance du coin inférieur droit)

Parmi les futurs enrichissements possibles du modèle, figurent la prise en compte d'un **écoulement multiphasique**, la diffusion d'espèces chimiques ou l'anisotropie de la roche poreuse.

a - *Car le maillage n'a pas à suivre la géométrie des fractures..*
b - *Non issus de cas réels.*
c - *Représentation de l'ouverture des fractures et de la pression de fluide [Pa].*

---

(1) *M. Faivre, B. Paul, F. Golfier, R. Giot, P. Massin, D. Colombo, Engineering Fracture Mechanics 2016*
DOI : 10.1016/j.engfracmech.2016.03.029

Contact scientifique : **daniele.colombo@ifpen.fr**

> NUMÉRO 33 DE SCIENCE@IFPEN

Un modèle hydromécanique pour maîtriser les fractures naturelles du sous-sol

Numéro 33 de Science@ifpen - Performance des codes de calcul
09 juillet 2018

Lien vers la page web :