

**Soluciones HPC para demandas futuras
en las industrias de potenciación del
transporte, energía eólica, petróleo y gas**

WHITE PAPER



ENERXICO



INTRODUCCIÓN

Según el Acuerdo de París adoptado en diciembre de 2015 (CMNUC, 2015) [1], se espera que la demanda mundial de energía experimente un gran crecimiento durante los 28 años comprendidos entre 2012 y 2040. Sin embargo, la escasez de energía o el uso ineficiente pueden generar precios más altos, que tendrá un impacto crítico en la economía, como destaca el Energy Challenge en el programa de trabajo de Horizonte 2020.

Específicamente en México, el índice de independencia energética, que muestra la relación entre la producción y el consumo nacional de energía, fue equivalente a 0,72 en 2019 [2]. Este resultado implica que se consumió más energía de la que se produjo en el país. En este contexto, la autosuficiencia energética es fundamental para el desarrollo de la industria en el país, que deberá enfrentar los nuevos desafíos de productividad y crecimiento económico.

Durante los últimos años, los recursos de computación de alto rendimiento (HPC) han experimentado una transformación dramática, con una explosión en el paralelismo disponible y el uso de procesadores para propósitos especiales. El número de núcleos en una computadora ExaFLOPS (10^{18} FLOPS) será del orden de 100 millones. Esto impone una fuerte presión para aumentar la eficiencia paralela de las aplicaciones. Al mismo tiempo, este paralelismo masivo abre nuevas oportunidades para aumentar la precisión al simular fenómenos físicos.

Debido a sus capacidades de procesamiento, las supercomputadoras permiten a los científicos ejecutar simulaciones más avanzadas y análisis de datos aplicados a diferentes sectores energéticos y ayudarlos a llevar estas tecnologías rápidamente al mercado. Por ejemplo, hoy en día muchas empresas de energía están utilizando soluciones HPC para buscar nuevas fuentes de energía, como el petróleo.

En particular, durante la pandemia de COVID-19, muchos sectores industriales se vieron afectados negativamente. En general, la demanda mundial de energía se redujo un 5% en 2020 [3]. Este fue también el caso de los combustibles fósiles, que fueron menos utilizados y cuya financiación cayó un 9% el mismo año [4]. Sin embargo, al mismo tiempo, la pandemia aceleró el uso de energía renovable. Por ejemplo, en Estados Unidos el consumo de esta energía aumentó en un 40% en las primeras diez semanas de bloqueo [5]. Por tanto, aunque está claro que la producción de combustibles fósiles requiere una gran inversión en infraestructura y es difícil tenerla en tiempos de crisis, el COVID-19 probablemente pueda reforzar la integración de fuentes de energía renovables [6]. Esta situación refuerza la necesidad de contar con fuentes estables y aumentar la eficiencia

para enfrentar los efectos negativos de la pandemia. En este contexto, HPC permite aprovechar y adaptar las tecnologías al mercado para satisfacer las demandas futuras con mayor rapidez y no desperdiciar fuentes de energía.

En el marco del proyecto de colaboración de la UE y México ENERXICO, se han aplicado técnicas de HPC a exaescala a diferentes simulaciones de la industria energética de interés crítico en México. El proyecto ha reunido a los principales actores del país en la industria y empresas energéticas europeas que trabajan en el mercado mexicano para desarrollar, más allá de las herramientas de simulación de alto rendimiento de última generación, para dar soluciones a estos sectores industriales tan importantes: el petróleo y el gas, energía eólica y propulsión y generación de energía.

Por un lado, la investigación sobre petróleo y gas ha brindado una oportunidad extraordinaria para el uso de tecnología de exaescala en la industria. La escalabilidad del resultado de la investigación permite la expansión de las técnicas desarrolladas a áreas de recuperación de carbono y el desarrollo de energías bajas en carbono. Por otro lado, ENERXICO también ha investigado nuevas herramientas de diseño de energía eólica para comprender y predecir las escalas de movimiento atmosférico para la operación y el rendimiento de aerogeneradores y parques en situaciones eólicas complejas. Por último, el proyecto se ha centrado también en el desarrollo y la validación de herramientas de simulación de combustión predictiva, con especial atención a los combustibles renovables para optimizar el diseño y el rendimiento del combustible hacia sistemas de propulsión más sostenibles y ecológicos. Los resultados ayudan a proporcionar una mayor comprensión de las propiedades que pueden ayudar en la descarbonización en el sector del transporte y lograr el mejor rendimiento y un impacto ambiental mínimo.

En resumen, ENERXICO ha ayudado a los diferentes sectores energéticos dando soluciones para la modernización de toda la industria energética mexicana y ha aportado su granito de arena para mejorar la cooperación entre industrias de la UE y México, así como grupos de investigación líderes en ambas regiones.



Soluciones HPC de última generación para las futuras demandas en las industrias del petróleo y el gas, la energía eólica y la combustión para el transporte.

COLABORACIÓN Y COOPERACIÓN ENTRE LA UE Y MÉXICO EN TRES ÁREAS:

<div style="display: flex; align-items: center; margin-bottom: 10px;">  <div style="margin-left: 10px;"> <h3 style="margin: 0;">Petróleo y Gas</h3> </div> </div> <ul style="list-style-type: none"> — Utilización de la exploración geofísica de yacimientos subsalinos para aumentar las reservas de petróleo y gas. — Realización de simulaciones de datos masivos para ordenadores de exaescala con el fin de lograr una exploración, un transporte de producción y un refinado de petróleo y gas eficientes. — Explotación de modelos in-silico de nuevos catalizadores para el refinamiento del petróleo con el objetivo de reducir la dependencia de los experimentos tradicionales de laboratorio. 	<div style="display: flex; align-items: center; margin-bottom: 10px;">  <div style="margin-left: 10px;"> <h3 style="margin: 0;">Energía eólica</h3> </div> </div> <ul style="list-style-type: none"> — Uso de plataformas HPC a exaescala para mejorar la fidelidad física de los modelos utilizados en el diseño de parques eólicos. — Especificación de parámetros externos importantes en situaciones de flujo complejas para clasificar las condiciones de viento que son relevantes para el diseño de turbinas eólicas. — Evaluación de las técnicas de acoplamiento de meso y microescala desarrolladas en flujos complejos. 	<div style="display: flex; align-items: center; margin-bottom: 10px;">  <div style="margin-left: 10px;"> <h3 style="margin: 0;">Combustión para el transporte</h3> </div> </div> <ul style="list-style-type: none"> — Desarrollo de herramientas de simulación predictiva de la combustión para optimizar el diseño y el rendimiento del combustible con el fin de crear sistemas de propulsión más sostenibles y ecológicos. — Utilización de la HPC para comprender mejor el proceso de combustión y las características de las emisiones de los nuevos combustibles. — Establecimiento de modelos de combustión y emisiones para nuevas directrices industriales de funcionamiento y mantenimiento de motores.
--	--	--



HPC EN LA INDUSTRIA DEL PETRÓLEO Y EL GAS

El negocio de la exploración del subsuelo se basa en determinar, con la mayor precisión posible, la ubicación de nuevos yacimientos de hidrocarburos. Aunque hace varias décadas era razonable buscar en áreas donde el petróleo era abundante y probar sus posibilidades, cuanto más se explotaban estas regiones de “petróleo fácil”, menos funcionaba la estrategia. Esencialmente, en los años 70, la búsqueda de petróleo nuevo solo se hizo posible mediante la exploración geofísica. Los principios subyacentes fueron simples al principio. Al emitir ondas sísmicas desde la superficie y escuchar el eco de las ondas, o las ondas reflejadas, se pudieron identificar varias capas.

Esta estrategia basada en datos tenía sus deficiencias. Por un lado, las ubicaciones de los reflectores en profundidad eran difíciles de identificar porque las velocidades sísmicas no son constantes en el subsuelo. En segundo lugar, en áreas donde la geología era compleja, la interpretación obtenida fallaría. Ambos problemas podrían mitigarse empleando diferentes “compensaciones” para cada emisor de la exploración. Al tener una colección de receptores a diferentes distancias del emisor, las ondas tomaron diferentes caminos antes y después de reflejarse en la superficie. Un análisis geométrico cuidadoso de tales diferencias en los tiempos de viaje redujo las ambigüedades. Esencialmente, al agregar más datos y algo de computación, se podría obtener una mejor imagen del subsuelo. La tendencia hacia más datos aumentó considerablemente para abarcar la adquisición de datos 3D en los años 80 con varios azimuts y flujos de trabajo de procesamiento de datos más

complejos que se convirtieron en estándar a principios de los años 2000. Sin embargo, los algoritmos geofísicos clásicos se basaron en supuestos sólidos, con respecto a la distribución de la velocidad en el subsuelo o la planitud de los reflectores. Los yacimientos demasiado profundos o complejos eran más difíciles de caracterizar y, al mismo tiempo, la perforación profunda se volvió cada vez más cara.

Para eludir la mayoría de las limitaciones en geofísica, se implementaron varios algoritmos de manera eficiente para que pudieran aplicarse a los levantamientos geofísicos. Esto incluyó la migración en profundidad antes del apilamiento de Kirchoff (PSDM) y la migración en tiempo inverso (RTM) [7]. Ambos algoritmos podían mapear reflectores con precisión en el subsuelo, pero el costo computacional asociado era muy alto para ser manejado por estaciones de trabajo regulares. En

el primer caso, las ondas sísmicas se consideraron como rayos de flexión que podrían interactuar con todas las estructuras del subsuelo. Como esto tenía que hacerse para cada par fuente-receptor, la cantidad de trazado de rayos fue enorme. PSDM ya tuvo un impacto significativo en la capacidad de obtención de imágenes del subsuelo. Por otro lado, RTM comenzó a tener un impacto en la última mitad de la década del 2000. En lugar de utilizar un enfoque de frecuencia infinita (rayos) para las señales sísmicas, utilizó el modelado físico completo de ondas en medios 2D / 3D. Mediante el uso de un modelado cinemático basado en la física, se pudieron obtener imágenes de modelos geológicos de complejidad casi arbitraria, siempre que los modelos de velocidad subyacentes fueran lo suficientemente buenos. PSDM y RTM, en todo caso, marcaron la ventaja para la adopción revolucionaria de HPC dentro de la industria del petróleo y el gas. Desde entonces, varias empresas de O&G han aparecido regularmente en la lista top500 [8], que muestra las supercomputadoras más poderosas del mundo. Donde muchos hubieran esperado que los sectores aeroespaciales, automotriz o de gran tecnología fueran las estrellas en tales listas, han sido los sistemas de O&G, dedicados principalmente a imágenes sísmicas, las contribuciones principales de la industria en una lista que está llena principalmente de supercomputadoras estatales. dedicada a la I + D pública. Lejos de ser una anomalía en el tiempo, aún en 2020 podríamos contar con 9 sistemas O&G HPC entre las 100 computadoras más rápidas del mundo (por ejemplo, Eni, Total, Petrobras, PGS).

La razón de la prevalencia de HPC en O&G se puede atribuir al desarrollo continuo de nuevas técnicas de imagen que han seguido haciendo un buen uso de la supercomputación. En particular, los mínimos cuadrados RTM y muy especialmente la inversión de forma de onda completa (FWI) han tenido un impacto transformador en la última década [9,10].

La inversión de forma de onda completa permite la posibilidad de obtener modelos de velocidad de fondo empleando el modelado de forma de onda

en modo inverso. Esto tiene una doble ventaja para la industria de O&G. Por un lado, aborda una necesidad en la creación de imágenes, por ejemplo, para RTM, donde los buenos modelos dan como resultado mejores imágenes. Por otro lado, es algorítmicamente similar a RTM, por lo tanto, muchos desarrollos relacionados con la optimización y mejora de RTM, obtenidos en años de desarrollo, se pueden aplicar fácilmente a FWI. Sin embargo, FWI no está exento de limitaciones y problemas. En primer lugar, llevó mucho tiempo adaptar los algoritmos a conjuntos de datos diferentes de los primeros, lo que excluyó varios tipos de adquisición de datos de la inversión y también limitó el impacto de la tecnología en sus inicios. En segundo lugar, para converger, FWI necesita frecuencias muy bajas que no eran habituales en las exploraciones de O&G antes de FWI. Por lo tanto, los levantamientos sísmicos se adaptaron a los requisitos algorítmicos al registrar desplazamientos más largos y frecuencias más bajas.



Finalmente, al ser un problema de optimización, se pueden usar muchas estrategias para mejorar las inversiones, algunas de ellas usando diferentes funciones de costos, otras usando modelos físicos más complejos (por ejemplo, anisotrópicos, elásticos) y otras tratando de cerrar las brechas entre “background model” y “reflectivity model”. El éxito de los geofísicos en la resolución de tales problemas marcará la relación continua de HPC y O&G en el futuro, donde tecnologías novedosas como el aprendizaje automático plantean la posibilidad de ayudar, complementar o quizás incluso reemplazar varias tecnologías geofísicas actuales en el futuro próximo. En cualquier caso, es a través de la I + D tanto en geofísica como en HPC que el problema de las imágenes se puede abordar y resolver en los próximos años.



HPC EN LA INDUSTRIA DE LA ENERGÍA EÓLICA

El desarrollo comercial de la energía eólica en las últimas décadas ha sido impulsado por continuas mejoras incrementales en todos los aspectos del diseño, producción, instalación y explotación de aerogeneradores, lo que ha llevado a los aerogeneradores actuales de hasta 8 MW y 220 m de altura. El aumento de tamaño y altura de las turbinas eólicas modernas ha desafiado nuestro conocimiento actual de las condiciones de funcionamiento de las turbinas eólicas porque las condiciones del viento cambian drásticamente de 50-100 a 100-300 metros sobre el suelo.

En comparación con nuestra comprensión actual de la tecnología de turbinas en sí, aún falta la comprensión de las condiciones del viento a las que están expuestas las grandes turbinas eólicas. Esto se debe a la amplia naturaleza multiescala de las variaciones del viento y su interacción con el medio ambiente. Esta brecha de conocimiento tiene implicaciones significativas para el diseño y la construcción de turbinas eólicas, así como para la operación, mantenimiento y producción de energía durante la vida útil de estas máquinas. En consecuencia, abordar esta brecha de conocimiento crítica, es una contribución vital para continuar la reducción de los costos de energía eólica que hemos visto en las últimas décadas. Por lo tanto, permitirá a la UE cumplir su objetivo de energía renovable de al menos el 27% del consumo de energía y el compromiso de seguir reduciendo las emisiones de gases de efecto inver-

nadero, estableciendo un objetivo de reducción del 40% para 2030 en relación con los niveles de 1990.

Un posible habilitador es el uso de plataformas HPC de exaescala donde el aumento masivo de la potencia computacional podría usarse para mejorar drásticamente la fidelidad física de los modelos utilizados en el diseño de parques eólicos. A continuación, se analiza una posible aplicación a exaescala para la mejora de los diseños de parques eólicos junto con algunos de los principales cuellos de botella algorítmicos a resolver antes. Una posible aplicación es considerar los pronósticos de energía eólica en diferentes escalas de tiempo, desde el corto plazo (downscaling meso-micro dinámico o estadístico), hasta estacional o decenal utilizando modelos climáticos globales. Una dirección viable en esta área es utilizar las metodologías de acoplamiento disruptivas en-

tre modelos de microescala y mesoescala desarrolladas en el proyecto ENERXICO utilizando Alya (código BSC CFD) [11,18], donde se han tomado tanto los desafíos relacionados con HPC como los aspectos numéricos / de modelado. en consideración. Aquí se ha desarrollado un enfoque de acoplamiento que utiliza tendencias de mesoescala [12], donde los datos de acoplamiento de mesoescala de ERA5 o WRF se obtienen extrayendo términos presupuestarios de mesoescala. El código del modelo a microescala lee los datos promediados horizontalmente, que se interpolan y agregan como términos de origen a las ecuaciones de momento microescalar [13]. Los dominios periódicos se utilizan para desarrollar turbulencias locales impulsadas por los términos de forzamiento de mesoescala. A nivel de microescala, las ecuaciones LES se discretizan utilizando una formulación no estabilizada de elementos finitos, con un método de paso fraccionario no incremental para estabilizar la presión, lo que permite una interpolación de igual orden para la presión y la velocidad. Esta formulación no disipativa, que utiliza una discretización que conserva la energía, mejora en gran medida la precisión del LES [14].

La viscosidad turbulenta se cierra en términos del modelo de subcuadrícula de Vreman [15]. La siguiente estrategia se ha probado en el contexto del experimento ALEX17 [16]. Este experimento se realizó para caracterizar las condiciones del viento en todo el valle de Elortz al norte del sitio de prueba de Alaiz para la validación de modelos de flujo. Del período operativo intensivo, se seleccionó un estudio de caso para un punto de referencia de Wakebench que consiste en una serie de ciclos diurnos con vientos del norte relativamente persistentes. La validación se centra en un mástil de 118 m en el sitio de prueba, con seis mástiles met de 80 m en el valle y un transecto en Z de 10 km de largo construido a partir de cinco escáneres de viento de largo alcance, a una altura constante de 125 m sobre el nivel del suelo. WRF (un modelo de mesoescala puro) puede reproducir correctamente las características a gran escala de la señal experimental, se espera que con el acoplamiento de microescala las altas frecuencias provenientes

del terreno se agreguen a la solución numérica. En el presente trabajo se simulan cuatro días de la campaña experimental. Como ejemplo, para un dominio de microescala de 16 km x 16 km con una resolución vertical de 10 m y una resolución tangencial de 35 m, la simulación acoplada WRF + LES presenta un BIAS normalizado promedio frente a las observaciones de menos del 4%, que es una gran mejora con respecto a las simulaciones WRF puras con un BIAS típico del 30% (utilizando mallas de resolución de 3 km y dominios de 264 km x 264 km) [16]. La mejora está muy relacionada con la capacidad superior del modelo acoplado de meso-microescala para introducir las altas frecuencias provenientes del terreno en la solución general de mesoescala. Sin embargo, para lograr esta simulación se utilizan 2000 CPU y se necesitan 2h de tiempo de CPU para obtener 1h de simulación (por lo tanto, se necesitarían 8 días de CPU para obtener los 4 días de la campaña experimental). Dado que se utilizan mallas de 20 millones de nodos, el límite de la aceleración fuerte ya se alcanza en unas 4000 CPU, por lo que no hay buenas formas de mejorar el tiempo de solución. ¡Esto significa que para obtener una simulación de un año básicamente, el usuario debe esperar un año!

Una posible solución es aplicar una estrategia par-in-time, donde los datos de mesoescala se agrupan en bloques de 2 días (uno para hacer girar la turbulencia local y el otro es el día de simulación real). Esta estrategia también es conveniente porque minimiza la posibilidad de que el modelo se desplace entre los dominios de microescala y mesoescala.



Se podrían ejecutar los 365 días de un año en 365 bloques con un costo de 2 días con aproximadamente 1,5 millones de CPU (esto es 70 M horas de CPU). Esta es una aplicación que es más probable que se implemente en una máquina de exaescala, donde podrían estar disponibles 70 millones de horas de CPU para su uso en solo un par de días. En las máquinas Petascale actuales, este tipo de trabajos se suelen implementar en proyectos HPC de un año de duración. Por lo tanto, la estrategia propuesta podría permitir evaluaciones anuales de los recursos eólicos utilizando el acoplamiento de escala meso-micro en las próximas máquinas de exaescala, y si el experimento ENERXICO (que usa solo 4 días) se mantiene, el sesgo con las observaciones podría reducirse significativamente (del 30% al 4% en condiciones extremas).

Sin embargo, para poder ejecutar dichos cálculos de manera efectiva en una próxima plataforma de exaescala, los códigos de energía eólica meso y microescala deberán mejorar en varios aspectos. De ahora en adelante nos centraremos en la parte de microescala y el código BSC CFD Alya. Se necesitarán acciones similares en otros paquetes de CFD; por lo tanto, la discusión es bastante general. Para aprovechar las plataformas HPC de exaescala, el código Alya está experimentando una gran transformación. Para resolver problemas de flujo incompresible usando un tratamiento explícito de la ecuación de momento, los dos núcleos principales son el ensamblaje del término del lado derecho (RHS) para la ecuación de momento y la solución de una ecuación de Poisson de presión. Las mejoras en estos dos núcleos principales también deben ir acompañadas de mejoras en la tolerancia a fallas, entrada-salida, visualización in situ e incluso inteligencia artificial para aprovechar al máximo el hardware de exaescala.

En cuanto al ensamblaje del término RHS, hemos estado trabajando con un equipo de expertos en optimización a nivel de nodo de Friedrich-Alexander-Universität (FAU) para analizar y mejorar el código utilizando su herramienta Likwid [17]. Para la implementación de la CPU, encontraron que el ensamblado de RHS no está limitado a la memoria

como uno esperaría inicialmente para un código de cuadrícula no estructurado. Esto, y el hecho de que al usar AVX512, las CPU se ejecutan a aproximadamente el 25% de su rendimiento máximo de punto flotante, indica que la implementación de Alya ya es muy eficiente. El equipo de FAU ha podido encontrar algunas modificaciones leves de código para ayudar al compilador que proporciona un 20% de aceleración.

Para la implementación de GPU, el comportamiento no es tan satisfactorio. El ensamblado RHS está fuertemente ligado a la memoria. Además, el código presenta una baja ocupación y un bajo paralelismo de memoria. Esto significa que aún queda trabajo por hacer. Se ha creado una mini-aplicación que replica el comportamiento del ensamblado RHS para facilitar el proceso de optimización. Después de algunas optimizaciones, el tiempo para la mini-aplicación se redujo de 612 ms a 175 ms. Además, con una conversión semiautomática a CUDA, el tiempo se redujo aún más a 53 ms. Esta es una reducción de más de diez veces con respecto a la sincronización original. Si estas mejoras se pueden traducir al código fuente de Alya, la versión GPU estará en una posición muy competitiva.

Teniendo en cuenta que la mayor parte de Alya puede ejecutarse en CPU o GPU, una posible dirección es desarrollar un enfoque de ejecución conjunta que haga un mejor uso de las supercomputadoras actuales de pre-exaescala, que normalmente combinan GPU y CPU. De esta manera, hacemos un uso total tanto de las GPU como de las CPU. Las CPU suelen estar infrutilizadas en este tipo de máquinas. Una partición de malla geométrica rápida y escalable basada en la curva de llenado de espacio (SFC) ha sido vital para permitir la ejecución conjunta con un equilibrio de carga correcto entre las GPU y las CPU. Al comienzo de la simulación, la partición SFC se llama varias veces de forma iterativa hasta obtener una partición óptima de la malla. En la primera iteración, cada tarea MPI (ya sea CPU o GPU) recibe una porción específica de la malla de acuerdo con algunos pesos iniciales. Con esta partición, calcula un par

de pasos de tiempo. Según el tiempo computacional que toma cada tarea MPI, vuelve a adaptar los pesos y las particiones. Después de un par de iteraciones, cada procesador recibe la cantidad correcta de trabajo para que todos tomen casi el mismo tiempo. Las GPU reciben una parte más significativa de la malla que las CPU. De esta manera, el trabajo realizado por las CPU se ahorra en comparación con un cálculo puro de GPU. Las pruebas de problemas de energía eólica realizadas en la supercomputadora CTE-Power9 en BSC, que tiene nodos con 2 CPU POWER9 8335 y 4 GPU NVIDIA Volta V100, mostraron que el código escala correctamente hasta dos millones de incógnitas por nodo. Además, la implementación de la GPU se ejecuta 4.3 veces más rápido que la implementación de la CPU, mientras que el enfoque de ejecución conjunta se ejecuta cinco veces más rápido que la implementación de la CPU. Así, la co-ejecución ahorra el 18% del tiempo.

Como ya se mencionó, el segundo núcleo clave es la solución de un sistema lineal de presión. El artículo más citado de Alya [18] reconoce que la falta de escalabilidad algorítmica es una de sus principales limitaciones. Esto se debe al uso de solucionadores basados en Krylov codificados internamente, cuyo número de iteraciones para converger a una cierta tolerancia se sabe que aumenta a medida que se refina la malla. Multigrid es la mejor solución para este problema. Dado que Alya se ocupa de mallas no estructuradas, el AMG algebraico de redes múltiples es la respuesta obvia. En lugar de intentar codificar nuestro propio preconditionador AMG, hemos preferido conectar Alya a una biblioteca externa. Este trabajo presentará los resultados obtenidos con PS-

BLAS y su paquete multigrid AMG4PSBLAS [19]. Para realizar el estudio de escalabilidad débil, usamos una herramienta de multiplicación automática de mallas [20] disponible en Alya que permite dividir elementos en elementos con la mitad del tamaño. Comenzamos con una malla no estructurada para el punto de referencia Bolund con 5.6 M nodos y aplicamos la multiplicación de malla dos veces para obtener una malla con 358M nodos. Ejecutamos la malla original en un nodo de Marenstrum IV con 48 núcleos. Para mantener la carga promedio por núcleo cuando pasamos a la malla fina, usamos 64 nodos. El solucionador necesita cinco iteraciones para converger en la malla gruesa, mientras que solo necesita cuatro iteraciones en la malla fina. Esta excelente escalabilidad algorítmica va acompañada de tiempos de CPU que aumentan de 0.67 s solo 0.72 s cuando se pasa de la malla gruesa a la fina. Por lo tanto, podemos decir que esta es la primera vez que el solucionador de Alya logra una escalabilidad débil correcta.

Aunque solo describimos nuestra experiencia con AMG4PSBLAS, también hemos interconectado Alya con otros cuatro solucionadores lineales AGMG [21], Maphys [22], Pastix [23] y Mumps [24]. El esfuerzo de interactuar con paquetes externos de álgebra lineal ha sido relativamente pequeño en comparación con lo que habría costado implementar las mismas funcionalidades nosotros mismos. Este ha sido un cambio de paradigma para Alya, que se basó principalmente en el código interno en el pasado. La apertura de Alya al uso de bibliotecas externas no se ha concentrado solo en herramientas de álgebra lineal. Las bibliotecas de tolerancia a fallos, entrada-salida y visualización in situ, como FTI [25], PDI [26],



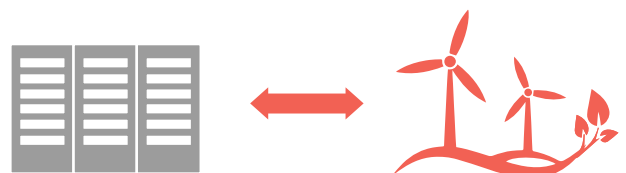
Sensei [27], Adios [28] y Catalyst [29], también se han interconectado con Alya últimamente. La fuerte interacción con expertos de diferentes campos es una forma eficiente de acelerar el camino hacia la exaescala.

En resumen, el uso de plataformas HPC de exaescala puede mejorar drásticamente la fidelidad física de los modelos utilizados en el diseño de parques eólicos. Una posible aplicación es considerar los pronósticos de energía eólica en diferentes escalas de tiempo, desde el corto plazo (meso-micro dinámico), hasta estacional o decenal utilizando modelos climáticos globales. Los demostradores a pequeña escala (que utilizan WRF + LES acoplados dinámicamente) indican que los errores en la predicción de la velocidad del viento podrían disminuir del 30% a menos del 4% al adoptar estas técnicas en terrenos complejos y condiciones climáticas desafiantes. Sin embargo, el costo computacional sigue siendo alto, alrededor de 2 días de cálculo usando 1.5 millones de CPU juntas para producir una predicción anual de la energía de un parque eólico. Para poder ejecutar dichos cálculos de manera efectiva en una próxima plataforma de exaescala, los códigos de energía eólica meso y microescala deberán mejorar en varios aspectos. Las mejoras en el rendimiento tanto a nivel de nodo como a nivel de sistema también deben ir acompañadas de mejoras en la tolerancia a fallas, entrada-salida, visualización in situ e incluso inteligencia artificial para aprovechar al máximo el hardware de exaescala.

Por último, aunque Europa es actualmente líder mundial en energía eólica con empresas como Vestas, Siemens-Gamesa e Iberdrola, su inversión en simulación de HPC para energía eólica hacia exaescala es significativamente menor de lo que está invirtiendo Estados Unidos. La visión eólica de EE. UU. reconoce que "sin acciones para mejorar la posición competitiva de la energía eólica en el mercado, la nación corre el riesgo de perder su infraestructura de fabricación eólica existente y una serie de beneficios públicos como se ilustra en la visión eólica". La simulación avanzada tie-

ne un papel clave en la Visión eólica de EE. UU. (Visión del viento: una nueva era para la energía eólica en los Estados Unidos) en lugar de la Visión eólica de la UE (Energía eólica: una visión para Europa en 2030). Lamentablemente, no hay ninguna referencia a la simulación.

Herbert Owen, líder del desafío Wind Scientific, dentro del proyecto EoCoE-II, ha estado recientemente en contacto con Michael Sprague, líder de los proyectos estadounidenses Exawind y Atmosphere Electrons (a2e). Si bien EoCoE y ENER-XICO son la contraparte europea más cercana a los proyectos a2e y Exawind US, su presupuesto eólico es un orden de magnitud menor. Además, los proyectos de la UE tienen una duración significativamente más corta. Con diferencias tan enormes en el presupuesto, es inevitable avanzar a un ritmo mucho menor en Europa que en Estados Unidos. Si la UE realmente quiere estar "en forma para los 55" para 2030 y seguir siendo competitiva con los EE. UU., esto debe cambiar urgentemente. Como dijo el presidente von der Leyen en la sesión plenaria del Parlamento Europeo [30], "en el fondo está nuestra misión de convertirnos en el primer continente climáticamente neutro para 2050. Pero no llegaremos allí con el statu quo, tenemos que ir más rápido y hacer las cosas mejor". Estamos llegando al límite de las cosas que podemos hacer de forma analógica. Europa debe ahora liderar el camino en lo digital. "Si Europa quiere avanzar y actuar con rapidez, debemos dejar de lado nuestras vacilaciones". La HPC y la energía eólica son dos pilares de la transformación que queremos para Europa. La HPC para energía eólica debe moverse rápidamente en la dirección correcta, ya que actualmente estamos muy por detrás de EE. UU.





HPC EN LA INDUSTRIA DEL TRANSPORTE

El sector del transporte representa alrededor del 25% de la participación en el sector energético y tiene una tasa de crecimiento del 1,4% anual [31]. En el caso del transporte por carretera, el mayor consumo de combustibles bajos en carbono y el despliegue de vehículos híbridos o eléctricos presentan alternativas viables, aunque la mayoría de los vehículos que operan en la actualidad todavía utilizan combustibles convencionales asociados a motores de combustión interna (ICE). Este escenario conduce a problemas con el suministro de energía para el sector del transporte, como el aumento de precios, la seguridad y la disponibilidad, además de la preocupación crítica mundial sobre el impacto de las futuras emisiones de gases de efecto invernadero y contaminantes relacionados con la salud pública y el cambio climático.

Los esfuerzos actuales en el transporte apuntan a reemplazar los motores de combustión interna por motores eléctricos en aplicaciones de baja potencia, como motocicletas o automóviles de pasajeros. Para aplicaciones de mayor potencia destinadas a la movilidad de personas, transporte de carga y aéreo, prescindir de los trenes de potencia de combustible líquido es más difícil. Un camino posible es el reemplazo de los combustibles fósiles actuales por renovables, lo que puede ayudar a enfrentar el desafío de mantener una alta densidad energética con el compromiso de la neutralidad de CO₂. La descarbonización incluye todas las opciones para reducir las emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) y hacer que el transporte por carretera sea más limpio, inclui-

dos los portadores de energía con bajas emisiones de carbono, como los biocombustibles y los combustibles de conversión de energía a líquido, también conocidos como electrocombustibles o e-combustibles. Ninguna de estas soluciones podrá resolver este desafío por sí sola, y los combustibles de transporte renovables tienen un papel esencial para cerrar la brecha entre los objetivos de reducción de emisiones de GEI y las reducciones de emisiones previstas [32].

Según las predicciones de la Agencia Internacional de Energía (AIE), el uso de biocombustibles para el transporte debería expandirse un 24% durante el período 2019-2024 [33]. Aparte de los biocombustibles, es decir, los derivados de la bioe-

nergía, los combustibles de conversión de energía en líquido constituyen otra alternativa interesante. Todos estos combustibles parten esencialmente de hidrógeno renovable. Actualmente se están evaluando intensivamente diferentes opciones para su uso en motores de combustión, incluido el uso directo de hidrógeno, procesos de síntesis que combinan hidrógeno y CO₂ y que dan lugar a una apuesta de interesantes moléculas oxigenadas (metanol, dimetiléter y oximetilen éteres), o incluso síntesis de amoníaco. [34]. Todas estas opciones solo deben producirse a partir de electricidad renovable, y su penetración en el mercado dependerá en gran medida del costo. Es necesario comprender las características de combustión de todos estos combustibles para que puedan aplicarse en sistemas de combustión con una eficiencia óptima y unas emisiones contaminantes mínimas.

Existen varias limitaciones que limitan el uso generalizado de combustibles líquidos renovables. Aparte de las complejidades en su producción, cumplir con los estrictos requisitos de certificación y la compatibilidad con la infraestructura energética existente son desafíos importantes. Las emisiones dependen en gran medida del tipo de combustible y del diseño del sistema de combustión. Las especificaciones del combustible líquido generalmente se definen en términos del rendimiento requerido del combustible, incluidas características como el contenido de energía, el punto de congelación y la estabilidad térmica. Para aplicaciones automotrices, a menudo se prefiere tener combustibles líquidos para ser "drop-in", que se define como combustibles que no requieren ninguna modificación en el equipo o la infraestructura. Uno de los principales desafíos en el suministro de combustible sostenible es equilibrar el suministro de combustible convencional y la economía durante las próximas décadas, al tiempo que se satisfacen los requisitos de seguridad y emisiones cada vez más estrictos. Para hacer frente a este desafío, los nuevos combustibles deben suministrarse y utilizarse de manera eficiente con un impacto ambiental mínimo.

A medida que estas nuevas corrientes de combustible ingresan al mercado, se está desarrollando una serie de nuevas tecnologías de motores que prometen una mayor eficiencia y una combustión más limpia. Sin embargo, hasta la fecha, falta una comprensión fundamental y un esfuerzo estratégico para hacer coincidir los combustibles líquidos futuros con los sistemas de inyección en evolución y el diseño en cilindros. Para proporcionar el conocimiento fundamental que permita la utilización de estos "e-combustibles" en la industria, se debe explorar más a fondo el conocimiento actual sobre su desempeño de combustión. Ha habido un número considerable de actividades en esta área en los últimos años que han conducido a un progreso mucho más rápido de lo esperado anteriormente, con algunas mezclas de combustibles incluidas en las especificaciones europeas / estadounidenses recientemente y se espera que se incluyan varias más en los próximos años. Sin embargo, las especificaciones existentes para la nueva generación de combustibles no están completamente establecidas, especialmente cuando se trata de emisiones.

Es probable que las estrategias de combustión que involucren estas nuevas mezclas de combustibles se caractericen por una mayor presión en el cilindro, mayor nivel de dilución, mínima formación de contaminantes y emisiones de CO₂ y, por lo tanto, máxima eficiencia. No se comprende bien la combustión en entornos termodinámicos inexplorados donde las nuevas propiedades físicas y químicas del combustible dan lugar a interacciones complejas con respecto a la variabilidad del combustible. Por ejemplo, el fluido puede estar en el régimen supercrítico de combustión a altas presiones, donde las propiedades de transporte del fluido serán muy diferentes de las de las condiciones ambientales. Tanto la transferencia de energía intermolecular como la intramolecular afectarán al entorno reactivo local. También se desconocen los aspectos clave de la cinética de combustión de estas mezclas de combustibles. Dentro de este contexto, se necesitan capacidades de modelado de alta fidelidad para guiar el de-

sarrollo de tecnologías de combustión de próxima generación, así como el diseño y optimización de un funcionamiento avanzado de motores de combustibles combinados más limpios y altamente eficientes. Esto es especialmente importante dado que las futuras aplicaciones de motores de combustión se centran en el transporte marítimo y por carretera, donde los motores de gran tamaño hacen que el trabajo experimental sea mucho más desafiante y costoso. Es esencial un marco práctico que conecte los modelos de subprocesos y proporcione una descripción completa desde las escalas macroscópicas hasta las escalas microscópicas de mezcla cinética y turbulenta muy detalladas. El acceso a Exascale Computing brinda una oportunidad única para acelerar esta transición, ya que las plataformas de prueba virtuales desarrolladas en el contexto de HPC se pueden utilizar para llevar a cabo una simulación de alta fidelidad de condiciones realistas del motor.

El uso de simulaciones numéricas avanzadas nos ha permitido realizar contribuciones importantes para aumentar la eficiencia del ciclo, reducir las emisiones contaminantes y utilizar combustibles alternativos en aplicaciones prácticas [35]. Los fabricantes de aviones, automóviles o turbinas de gas emplean herramientas numéricas todos los días para diseñar y optimizar los sistemas de combustión. De hecho, el aumento de la potencia de cálculo en los últimos años ha llevado a la transición de los enfoques de Navier-Stokes (RANS) promediados por Reynolds a los enfoques de simulaciones de remolinos grandes (LES) en el proceso de diseño y desarrollo, lo que reduce la incertidumbre de los modelos y aumenta la fiabilidad de las predicciones numéricas [36]. En esta nueva era, cuando las futuras arquitecturas de exaescala estén disponibles, el uso de LES o incluso DNS podría pasar a desempeñar un papel más importante en la comprensión del rendimiento de los sistemas de combustión en condiciones más complejas. La caracterización completa de los sistemas de combustión prácticos es una tarea compleja y trae muchos desafíos asociados con diferentes disciplinas de ingeniería, química,

física, informática y matemáticas, entre otras.

En particular, una de las partes más importantes es el modelado del aerosol que reacciona en condiciones realistas, ya que incluye la interacción de fenómenos físicos complejos como la inyección de combustible líquido a alta presión, atomización, vaporización, mezcla de combustible / aire y combustión. Esta interacción no se comprende



bien y juega un papel importante en el desempeño general del sistema. Con el uso de futuras arquitecturas a exaescala, los códigos CFD tendrán que adaptarse para funcionar de manera eficiente en estas máquinas con nuevos algoritmos y métodos numéricos, pero tendrán todo el potencial de realizar operaciones exaFLOPS, esto significa 10¹⁸ operaciones de punto flotante por segundo. Una de las cuestiones fundamentales asociadas con el modelado y simulación de combustibles renovables en condiciones similares a las de un motor es tener en cuenta la química. En la práctica, los combustibles de hidrocarburos tradicionales requieren del orden de cientos de especies y más de miles de reacciones para caracterizar el proceso de combustión en condiciones similares a las de un motor [37]. En este tipo de problemas, el costo de resolver las ecuaciones de Navier-Stokes se vuelve insignificante en comparación con el necesario para los cálculos químicos. Estos esquemas de cinética química se vuelven aún más grandes con descripciones realistas de combustibles y sustitutos complejos o mezclas de combustibles,

por lo que esto sostiene la investigación de combustibles alternativos y reduce la aplicabilidad de simulaciones numéricas en este contexto. [38, 39].

La predicción correcta de la formación y destrucción de especies y radicales no solo requiere pequeños pasos de tiempo, sino también alta resolución en el dominio computacional, ya que algunas especies pueden tener tiempos de vida cortos y largos. En la práctica, las emisiones se controlan mediante reacciones lentas y rápidas, es decir, el NO_x se rige por escalas de tiempo lentas, pero el CO procedente de la oxidación parcial del CO₂ se caracteriza por escalas de tiempo rápidas, por lo que tanto los procesos lentos como los rápidos son importantes y deben ser tenidos en cuenta. Esto significa que las simulaciones numéricas deberán ejecutarse durante largos tiempos físicos utilizando cuadrículas finas y pequeños pasos de tiempo. Estos altos requisitos en términos de resolución espacial y temporal son aún más exigentes en el caso de sistemas operados a presión moderada o alta. En estas condiciones, las capas de reacción son más pequeñas y el costo computacional de las simulaciones aumenta dramáticamente. Existen estrategias para simplificar el problema químico, como la reducción química, la tabulación química, los modelos PDF transportados o los cierres condicionales, pero solo son válidos para regímenes y condiciones bien conocidos, y su aplicabilidad a problemas generales puede ser cuestionable. [40, 41, 42, 43, 44].

Otra limitación importante de las tecnologías de modelado actuales está asociada con el proceso

de atomización del combustible [45, 52]. La formación del spray es un fenómeno físico complejo caracterizado por el proceso de rotura de la película líquida en gotitas y sus posteriores etapas de atomización hasta que las gotitas se vaporizan logrando la fase gaseosa. El proceso de inyección de combustible tiene una gran influencia en los límites de estabilidad, la eficiencia de la combustión y las emisiones contaminantes. Hoy en día, los diseñadores de sistemas de inyección de alta presión realizan grandes esfuerzos para garantizar la generación de pequeñas gotas para promover una evaporación rápida y mezclas más homogéneas, que a su vez aumentan la eficiencia de la combustión y reducen las emisiones contaminantes. El proceso de atomización se puede dividir en ruptura primaria y secundaria con diferentes dinámicas físicas y están controladas por colisiones de gotas, coalescencia, transferencia de calor, cambio de fase junto con interacciones turbulentas entre fases [46, 47, 48]. Esto es especialmente complejo en las condiciones de funcionamiento de los motores, que suelen tener condiciones de números de Reynolds y Weber elevados con inyección de combustible líquido a alta velocidad en toberas de pequeño diámetro.

Hay muchos enfoques para resolver estos problemas, desde los métodos de gota de Lagrange hasta los enfoques totalmente eulerianos [49, 50]. El enfoque más simple para modelar la atomización primaria es el uso de modelos fenomenológicos, que requiere un bajo costo computacional, pero ofrece baja precisión. Estos modelos pueden proporcionar la distribución de gotas aguas abajo



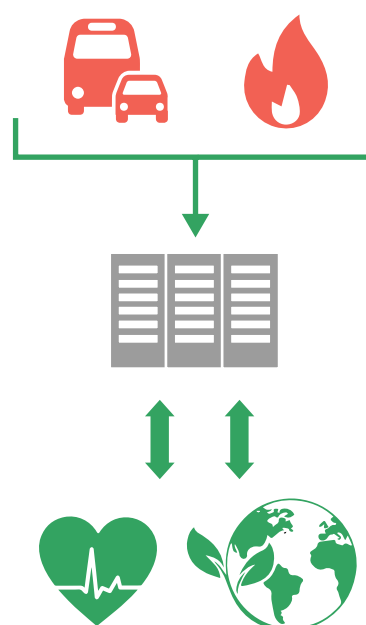
del borde de atomización con una pequeña cantidad de parámetros y sin simular el proceso de atomización real. Son los más adecuados para el análisis de combustión donde el objetivo principal no es comprender el proceso de atomización, sino reproducir con precisión las principales características del spray que inciden en la llama y las consiguientes emisiones contaminantes. El bajo costo de CPU y los requisitos de memoria de este enfoque lo hacen adecuado para su integración en códigos CFD para realizar simulaciones de gran remolino del dominio completo (atomizador y cámara de combustión). Este enfoque se ha utilizado recientemente para desarrollar un modelo fenomenológico para el proceso de atomización aguas abajo de un borde de atomización en un marco LES. [50].

Un segundo enfoque, basado en el modelo ELSA de superficie / densidad [48], permite el estudio de configuraciones más realistas, pero con un coste de CPU más elevado. En este enfoque, la fase líquida se describe por su fracción de masa y el área superficial media de la interfaz por volumen. Esta información se acopla a un solucionador de Lagrange en la región diluida para seguir la evolución de la pulverización. Este método ha dado resultados interesantes para atomizadores de chorro de aire y chorros de líquido a alta presión para ICEs [51], pero también necesita una calibración preliminar dependiente de la geometría. Finalmente, entre los enfoques con mayor grado de detalle y costo se encuentran las técnicas de captura de interfaces como Level Set [53, 54, 55, 56].

Estos métodos requieren simulación numérica directa (DNS) para predecir con precisión el nivel de turbulencia en el origen de las inestabilidades primarias en el líquido. Han demostrado su capacidad para describir con precisión el proceso de atomización, pero la amplia gama de escalas de longitud involucradas requiere cuadrículas con un número extremo de celdas y están restringidas a configuraciones académicas simplificadas y de tamaño reducido. Estos son problemas particularmente exigentes que no son factibles con las

estrategias de modelado actuales y los recursos computacionales actuales en condiciones de interés práctico.

En resumen, la era de la exaescala proporcionará una plataforma significativa para realizar contribuciones importantes en los sectores de energía y transporte hacia sistemas más eficientes, más flexibles en combustible y con bajas emisiones con un impacto directo en la salud pública y el cambio climático. Con el uso de estas nuevas arquitecturas y con los correspondientes avances en los códigos para aprovechar al máximo las capacidades de este nuevo chip, los desafíos en las tecnologías de propulsión y los sistemas de generación de energía se abordarán convenientemente permitiendo una transición a sistemas de combustión más ecológicos y avanzados basados en bajas emisiones. Combustibles de carbono combinados con tecnologías de energía renovable que pueden funcionar conjuntamente.



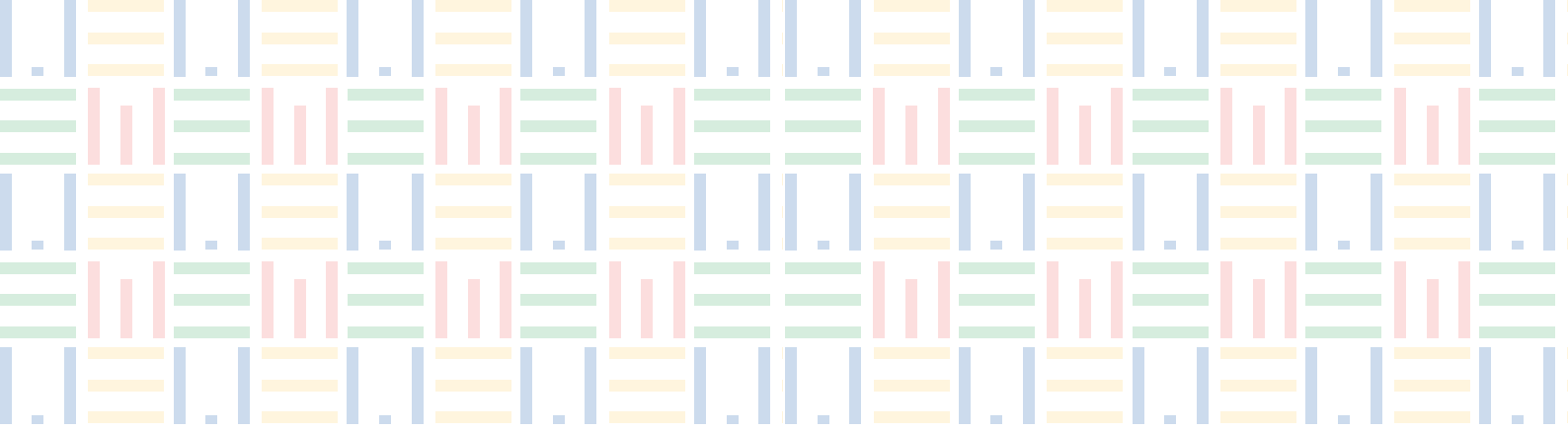
REFERENCIAS

- [1] United Nations Framework Convention on Climate Change, 2015. Paris Agreement: UN Climate Conference.
- [2] Balance Nacional de Energía 2019. Subsecretaría de Planeación y Transición Energética. Dirección General de Planeación e Información Energéticas. México, 2020.
- [3] Global Energy Review 2020, ISBN 92-64-36216-9, IEA, 2020.
- [4] <https://www.spglobal.com/marketintelligence/en/news-insights/latest-news-headlines/fossil-fuel-financing-falls-in-2020-amid-covid-19-environmental-groups-find-63302209>
- [5] <https://www.power-technology.com/news/covid-19-pandemic-accelerated-future-renewable-energy-usage-poll/>
- [6] Navon, A.; Machlev, R.; Carmon, D.; Onile, A.E.; Belikov, J.; Levron, Y. Effects of the COVID-19 Pandemic on Energy Systems and Electric Power Grids—A Review of the Challenges Ahead. *Energies* 2021, 14, 1056. <https://doi.org/10.3390/en14041056>
- [7] Gray, S. H., Etgen, J., Dellinger, J., & Whitmore, D. (2001). Seismic migration problems and solutions. *Geophysics*, 66(5), 1622-1640.
- [8] www.top500.org
- [9] A. Long (2020). HPC and the Future of Seismic. Industry Insights (www.pgs.com)
- [10] Virieux, J., & Operto, S. (2009). An overview of full-waveform inversion in exploration geophysics. *Geophysics*, 74(6), WCC1-WCC26.
- [11] Avila M, Gargallo-Peiro A, and Folch A. A CFD framework for offshore and onshore wind farm simulation. *Journal of Physics: Conference Series*, 854(1):012002, 2017.
- [12] Javier Sanz Rodrigo J, Churchfield M and Kosovic B. A methodology for the design and testing of atmospheric boundary layer models for wind energy applications. *Wind Energ. Sci.*, 2, 1–20, 2017.
- [13] Lehner, M, 2012, Observations and large-eddy simulations of the thermally driven cross-basin circulation in a small, closed basin, Ph.D. thesis. University of Utah.
- [14] Lehmkuhl O, Houzeaux G, Owen H, et al. A low-dissipation finite element scheme for scale resolving simulations of turbulent flows. *J. Comput. Phys.*, 390:51 – 65, 2019. ISSN 0021-9991.
- [15] Vreman AW. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Phys. Fluids*, 16(10):3670–3681, 2004.

- [16] J Sanz Rodrigo et al. The ALEX17 diurnal cycles in complex terrain benchmark. 2021 J. Phys.: Conf. Ser. 1934 012002.
- [17] <https://github.com/RRZE-HPC/likwid>
- [18] Mariano Vázquez, Guillaume Houzeaux, Seid Koric, Antoni Artigues, Jazmin Aguado-Sierra, Ruth Arís, Daniel Mira, Hadrien Calmet, Fernando Cucchietti, Herbert Owen, Ahmed Taha, Evan Dering Burness, José María Cela, Mateo Valero, Alya: Multiphysics engineering simulation toward exascale, Journal of Computational Science, Volume 14, 2016, Pages 15-27, <https://doi.org/10.1016/j.jocs.2015.12.007>.
- [19] Pasqua D'Ambra, Fabio Durastante, and Salvatore Filippone. Amg preconditioners for linear solvers towards extreme scale, 2021.
- [20] Guillaume Houzeaux, Raul de la Cruz, Herbert Owen, and Mariano Vázquez. Parallel uniform mesh multiplication applied to a Navier Stokes solver. Computers and Fluids, 80:142 – 151, 2013.
- [21] Y. Notay. AGMG software and documentation. <http://agmg.eu>
- [22] MaPHYs team. MaPHYs software and documentation. <https://gitlab.inria.fr/solverstack/maphys>.
- [23] PaStiX team. PaStiX software and documentation. <https://gitlab.inria.fr/solverstack/pastix>.
- [24] MUMPS team. MUMPS: Multifrontal massively parallel solver. <http://mumps-solver.org/>.
- [25] <https://github.com/leobago/fti>
- [26] <https://pdi.julien-bigot.fr/master/>
- [27] <https://sensei-insitu.org>
- [28] <https://csm.d.ornl.gov/adios>
- [29] <https://www.paraview.org/Wiki/ParaView/Catalyst/Overview>
- [30] https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/SPEECH_20_1655-
- [31] International Energy Outlook 2016 (IEO2016), With Projections to 2040, Energy Dept., Energy Information Administration, Office of Energy Analysis.
- [32] D. Bacovsky, A. Sonnleitner, A. Brown, The Role of Renewable Transport Fuels in Decarbonizing Road Transport, AMF Annex 58 / IEA Bioenergy Task 41 Project 10, 2020.

- [33] IEA (2019), "Renewables 2019", IEA, Paris
<https://www.iea.org/reports/renewables-2019>
- [34] Masri, A. R. (2021). Challenges for turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 38(1), 121–155.
- [35] H.Pitsch, Large-eddy simulation of turbulent combustion, *Annual Review of Fluid Mechanics* 2006 38:1, 453-482.
- [36] Kim WW, S Syed. 2004. "Large-Eddy Simulation Needs for Gas Turbine Combustor Design." In *Proceedings of the 42nd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, pp. 3162-3175, Reston, Virginia.
- [37] Dryer, F.L., Chemical kinetic and combustion characteristics of transportation fuels, *Proc. Combust. Inst.*, 35 117-144, 2014.
- [38] Jacobs, S., D'ontgen, M., Alquaity, A. B., Kopp, W. A., Kröger, L. C., Burke, U., Pitsch, H., Leonhard, K., Curran, H. J., and Heufer, K. A., 2019. "Detailed kinetic modelling of dimethoxymethane. Part II: Experimental and theoretical study of the kinetics and reaction mechanism". *Combustion and Flame*, 205, jul, pp. 522–533.
- [39] Cai, L., Jacobs, S., Langer, R., vom Lehn, F., Heufer, K. A., and Pitsch, H., 2020. "Auto-ignition of oxymethylene ethers (OMEn, n= 2–4) as promising synthetic e-fuels from renewable electricity: shock tube experiments and automatic mechanism generation". *Fuel*, 264, p. 116711.
- [40] Kundu, P., Ameen, M., Unnikrishnan, U., and Som, S., "Implementation of a Tabulated Flamelet Model for Compression Ignition Engine Applications," *SAE Technical Paper* 2017-01-0564, 2017
- [41] Jochim, B., Korkmaz, M., and Pitsch, H. (2017). Scalar dissipation rate based multi-zone model for early-injected and conventional diesel engine combustion, *Combust. Flame*, 175, 138–154.
- [42] D. Mira, O. Lehmkuhl, A. Both, P. Stathopoulos, T. Tanneberger, T. Reichel, C.O. Paschereit, M. Vázquez, G. Hozeaux, 'Numerical characterization of a premixed hydrogen flame under conditions close to flashback', *Flow, Turbulence and Combustion*, 104(2): 479-507, 2020
- [43] Wehrfritz, A., Kaario, O., Vuorinen, V., and Somers, B. (2016). Large Eddy Simulation of n-dodecane spray flames using Flamelet Generated Manifolds, *Combust. Flame*, 167, 113–131.
- [44] D. Mira, E. Pérez, A. Surapaneni, J.M. García-Oliver, J. Benajes, J.M. Pastor, D. de León, LES Study on Spray Combustion With Renewable Fuels Under ECN Spray-A Conditions, *Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference ICEF2021*, 67745.

- [45] Faeth G.M., Hsiang L.-P., Wu P.-K., "Structure and breakup properties of sprays", *Int. J. of Multiphase Flow* 21 (1995) 99–127.
- [46] Hiroyasu H., *Spray breakup mechanism from the hole-type nozzle and its applications, Atomization and Sprays*", vol. 10, pp. 511–527, 2000.
- [47] Pitsch, H. and Desjardins, O., Detailed numerical investigation of turbulent atomization of liquid jets, *Atomization Sprays*, Vol. 20, pp. 311–336, 2010.
- [48] Vallet A., Burluka A.A., Borghi R., Development of a Eulerian model for the atomization of a liquid jet, *Atomization and Sprays* 11, 619–642, 2001.
- [49] F. Jaegle, J.-M. Senoner, M. Garcia, F. Bismes, R. Lecourt, B. Cuenot, T. Poinsot, Eulerian and Lagrangian spray simulations of an aeronautical multipoint injector, *Proc. Combust. Institute* 33 (2011) 2099–2107
- [50] Chaussonnet, G., Gepperth, S., Holz, S., Koch, R., Bauer, H.J., "Influence of the ambient pressure on the liquid accumulation and on the primary spray in prefilming airblast atomization", *Int J Multiphase Flow* 125, p. 103229, 2019.
- [51] S. Jay, F. Lacas, S. Candel, Combined surface density concepts for dense spray combustion, *Combustion and Flame*, Volume 144, Issue 3, 2006, pp. 558-577.
- [52] Menard, T., Tanguy, S., Berlemont, A., 2007. Coupling level set/VOF/ghost fluid methods: validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet. *Int. J. Multiphase Flow* 33, 510–524.
- [53] O Desjardins, V Moureau, H Pitsch, An accurate conservative level set/ghost fluid method for simulating turbulent atomization, *Journal of computational physics*, 2008, Vol. 227, pp. 8395-8416.
- [54] Fuster, D., Bagu, A., Boeck, T., Le Moyne, L., Leboissetier, A., Popinet, S., Ray, P., Scardovelli, R., Zaleski, S., 2009. Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and VOF method. *Int. J. Multiphase Flow* 35, pp. 550–565.
- [55] Shinjo, J., Umemura, A., 2010. Simulation of liquid jet primary breakup: dynamics of ligament and droplet formation. *Int. J. Multiphase Flow* 36, 513–532.
- [56] Herrmann, M., 2010. A parallel Eulerian interface tracking/Lagrangian point particle multi-scale coupling procedure. *J. Comput. Phys.* 229, 745–759.



ENERXICO

enerxicoproject@bsc.es



The research leading to these results has received funding from the European Union's Horizon 2020 Programme under the ENERXICO Project (www.enerxico-project.eu), grant agreement no 828947 and under the Mexican CONACYT-SENER-Hidrocarburos grant agreement B-S-69926.