

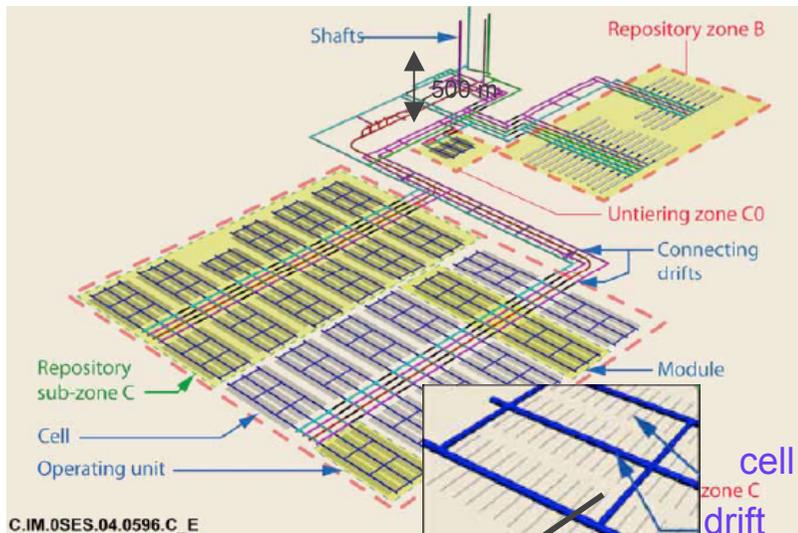
Les calculs hautes performances à EDF dans les codes utilisés pour le stockage

R. Fernandes – S. Granet – I. Rupp - F. Dumortier
- F. Decung
EDF R&D

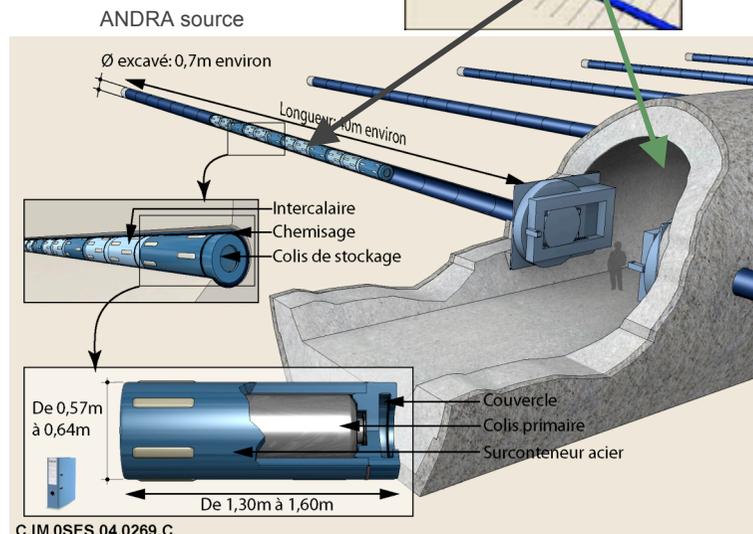
Plan de la présentation

- **La modélisation du stockage sous terrain : rappel du contexte**
 - ✓ Les différentes étapes et outils de modélisation
- **Les besoins en terme de calculs haute performance : Exemple des modélisations THM du champs proche avec Code_Aster**
 - ✓ Une physique complexe
 - ✓ Les schémas numériques utilisés
 - ✓ Exemple d'applications
- **État des lieux en terme de parallélisme des différents codes utilisés à EDF pour modéliser le stockage**
 - ✓ Code_Aster (modélisation THM)
 - ✓ Syrthes (modélisation thermique)
 - ✓ ESTEL (sureté long terme)

Le stockage sous terrain : Concept général



C.IM.0SES.04.0596.C_E



C.IM.0SES.04.0269.C

Étapes de modélisations du stockage :

- **Modélisation thermique** : permet le dimensionnement en tenant compte du respect du critère thermique. **Code SYRTHES**
- **Modélisation THM du champ proche** : estimation de la zone endommagée, compréhension du comportement des bouchons et scellements, évaluation des pressions de gaz et des chemins préférentiels. **Code_Aster**
- **Sûreté long terme pour évaluer l'impact radiologique** : **ESTEL**

Pourquoi des calculs Hautes Performance ?

Une physique de plus en plus complexe

- De plus en plus de mécanismes à prendre en compte : + de DDLs
- Des modèles physiques couplés non linéaires de plus en plus pointus -> nécessités de schémas numériques adaptés

Une géométrie plus riche

- Généralisation du 3D : + de DDLs
- Aspect multi-échelles
- Maillages irréguliers -> nécessités de schémas numériques adaptés

=> Des schémas numériques de plus en plus robustes sont développés

- Mais ces schémas peuvent parfois être coûteux en DDL

=> Exemple de la simulation THM avec Code_Aster

La THM du champ proche

➤ Des matériaux hétérogènes à forts contrastes

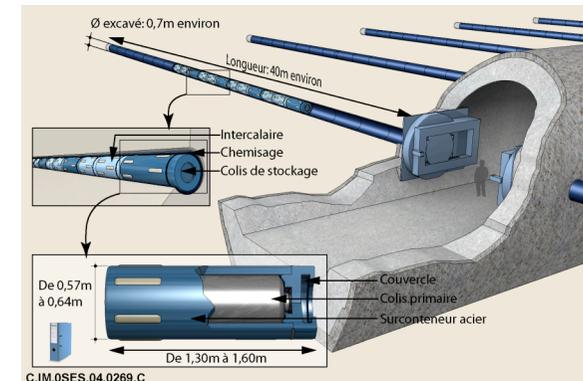
- ✓ Argilite saine ou endommagée
- ✓ Bétons, remblais
- ✓ Bouchons (argile gonflante)
- ✓ Vides et jeux fonctionnels
- ✓ Acier : surconteneurs, chemisages, soutènements
- ✓ Forts contrastes de saturation (bouchons ou remblais désaturés, sol saturé)

➤ Un problème multiphysique : thermique, hydraulique, mécanique, (chimique)

- ✓ Chargement d'origine mécanique : excavation
- ✓ Chargement d'origine thermique : les colis radioactifs
- ✓ Chargement d'origine hydrique : ventilation, gaz de corrosion

➤ Spécificités hydriques

- ✓ Fortes pressions capillaires (100 MPa)
- ✓ Pressions de gaz pouvant atteindre plusieurs MPa



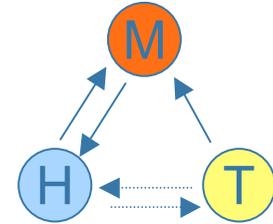
Complexité des modèles THM macroscopiques

➤ Des modèles entièrement couplés T.H.M

- ✓ De plus en plus de termes de couplages sont pris en compte

➤ Des modèles mécaniques adaptés aux différents matériaux

- ✓ Pour l'argilite (Drücker Prager, Hoek & Brown, Laigle, L&K viscoplastique ...)
- ✓ Pour les matériaux ouvragés (Cam-Clay; Barcelone ..)
- ✓ Pour les bétons ...



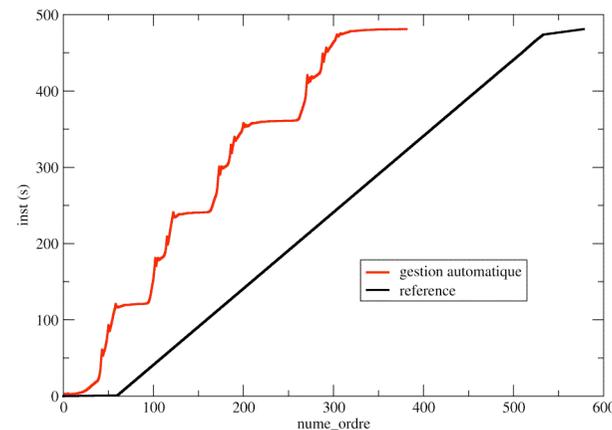
➤ Un modèle hydraulique diphasique classique

- ✓ Écoulements Darcéens 2 phases, 2 constituants (ex : eau + hydrogène).
Modèle multicomposants ?
- ✓ De très fortes non linéarités :
 - Termes de perméabilités relatives (ex. Mualem), de presions capillaires (Van-Genuchten)
 - Termes de diffusions Fickiennes
- ✓ Des questions liées à l'apparition ou la disparition d'une phase

***Des problèmes très linéaires avec un grand nombre de DDL
demandant des schémas numériques adaptés***

Choix numériques généraux de la THM Aster

- Formulation totalement couplée T,P,U
- Inconnues hydrauliques : Pc, Pw
- Schémas en temps Euler implicite
- Pas de temps adaptatifs



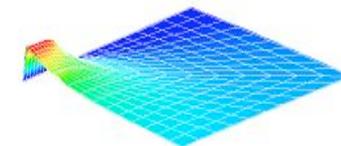
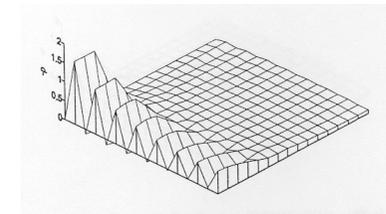
➤ Résolution des problèmes non linéaires

- ✓ Méthode de Newton avec matrices symétriques ou non
- ✓ Recherche linéaire
- ✓ Alternative à Newton
 - Méthode Implex

Les schémas numériques en THM : Les EF

Les éléments finis

- **Ordre 2 en mécanique et 1 en hydraulique**
 - ✓ Résultat théorique de convergence (Ern, Meunier)
- **En 2D, 3D, Axi**
- **Intégration :**
 - ✓ Intégration numérique = gauss
 - oscillations numériques sur des problèmes de type consolidation -> pratiquement abandonnés
 - ✓ Intégration numérique = nœuds (EF lumpés)
 - OK sur le problème de consolidation mais perte de précision en mécanique
 - ✓ Intégration numérique « sélective »
 - nœuds pour les termes en $*/dt$
 - Gauss pour les autres (termes de diffusions)



Le meilleur compromis actuel

Les schémas numériques en THM : Les VF (1/2)

Les schémas volumes finis pour les problèmes d'hydraulique

✓ Motivation :

- » Traitement des fronts raides
- » Nécessité de maillages déformés
- » Bénéficier des avancées de la communauté des VF

✓ Une vision différente

» En EF :

Discrétisation interne. Utilise une formulation variationnelle, s'appuie sur des fonctions de forme.

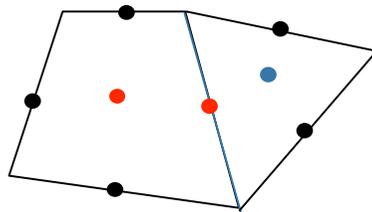
DDLs portés par des nœuds. DDLs connectés ssi ils appartiennent à un même élément

» En VF :

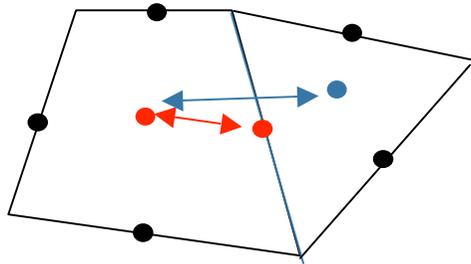
Plus prêt des approximations externes : on calcule des flux et/ou gradients discrets

Certains ddl peuvent être connectés s'ils appartiennent à des mailles voisines

✓ Développement dans Code_Aster de schémas de type SUSHI (Scheme Using Stabilisation and Hybrid Interfaces - *Eymard, Gallouet, Herbin 2007*)



Les schémas numériques en THM : Les VF (2/2)



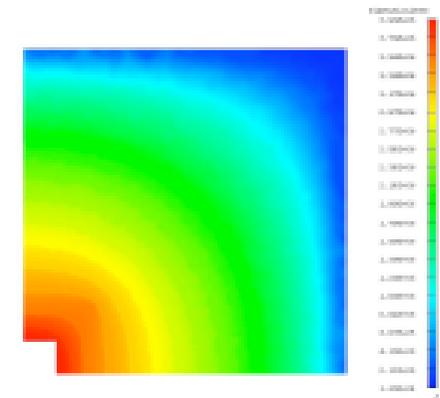
Plusieurs variantes

- Décentrés mailles (notion de voisinage)
- Décentrés arêtes (pas d'intervention des voisins)

✓ Exemple : Injection de gaz dans un domaine saturé en liquide(2D)

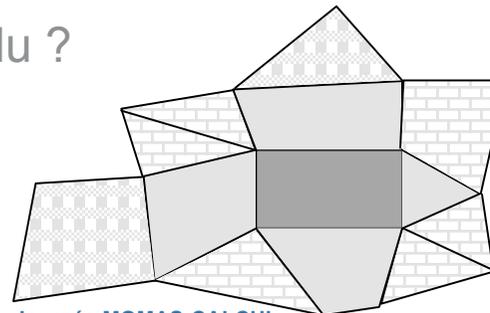
- Maillage : 4373 triangles

	EF classique	Sushi décentré mailles	Sushi décentré arêtes
Nombre d'équations	2826	13484	13484
Taille de la matrice	38276	935 824	155 080



Pression de gaz à 50 ans

✓ Perspectives : voisinage étendu ?

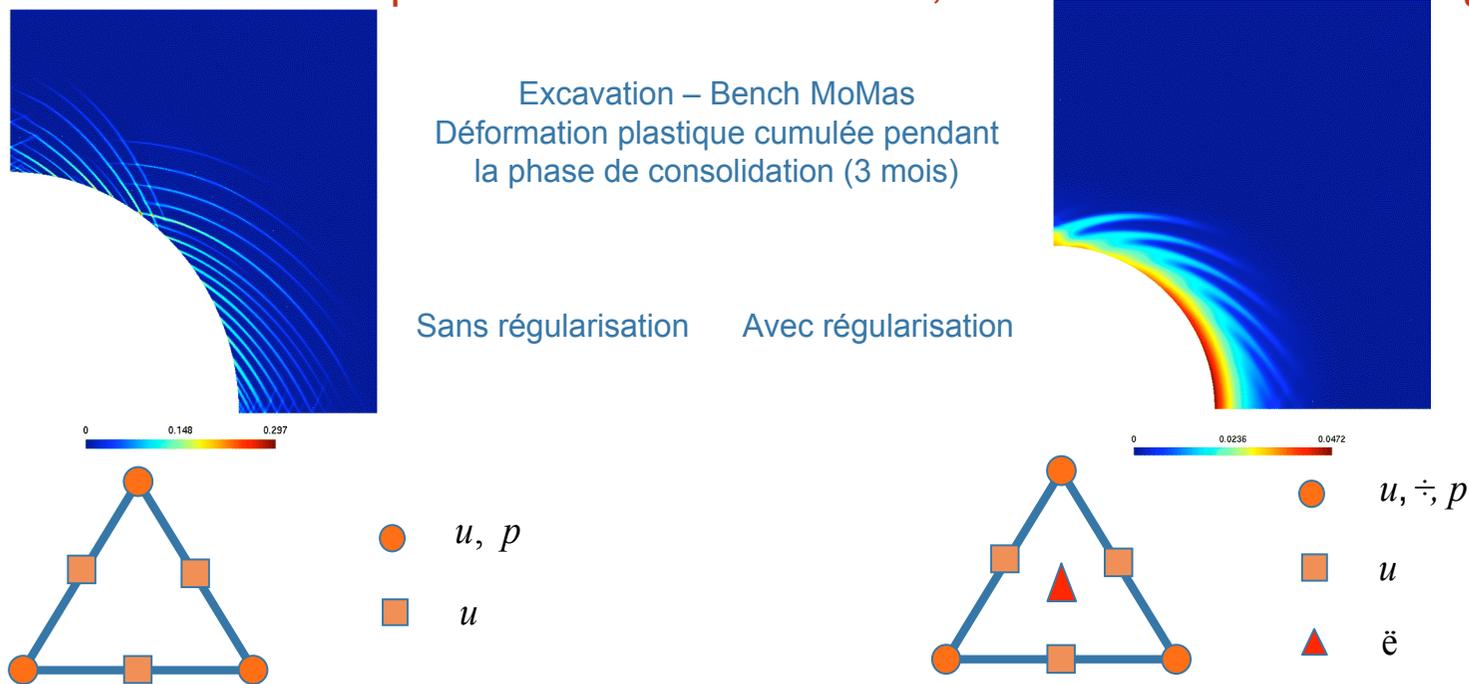


Journée MOMAS-CALCUL

Les schémas numériques en THM - Méthode de régularisation

✓ Régularisation adaptée aux milieux poreux : Modélisation à gradient de déformation volumique

- Éviter les problèmes de localisation, indépendance au maillage



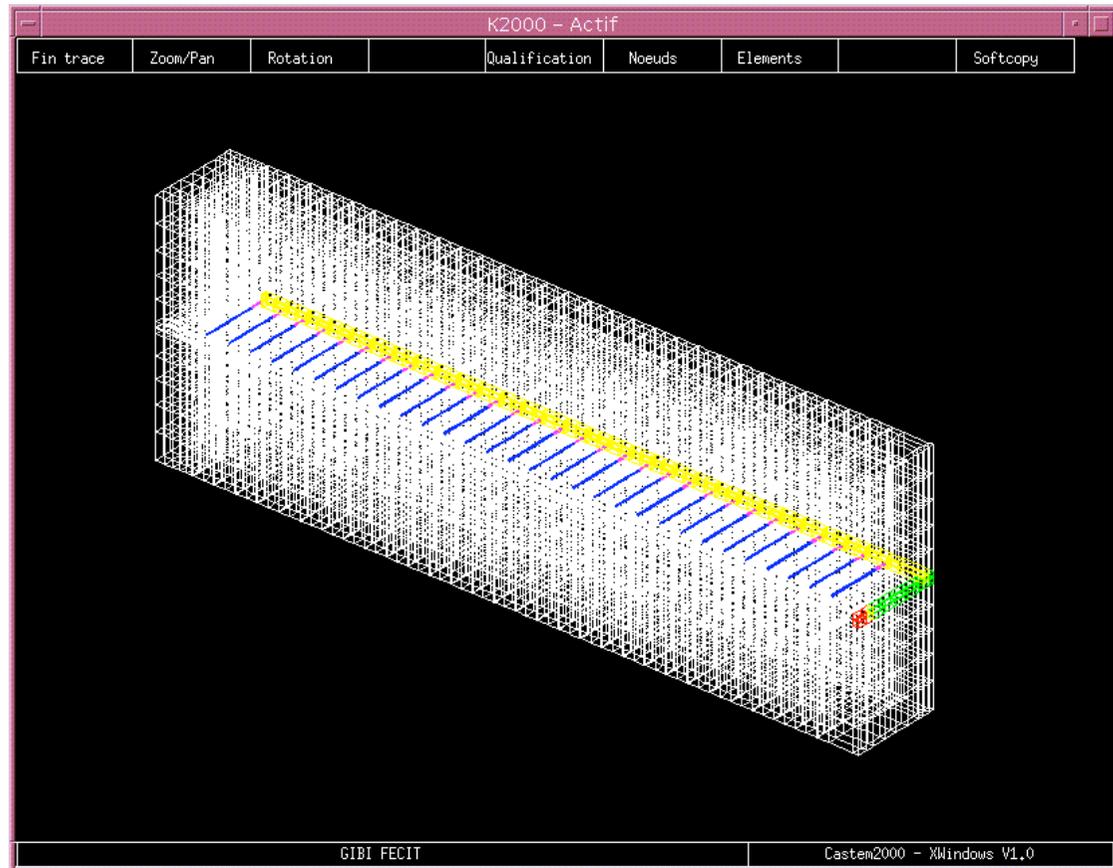
Second gradient de dilatation / local : +33% de dds
Mais convergence grandement améliorée

Performance en séquentiel : calcul couplé avec 15 mois de consolidation en 2D (78 000 triangles): 22 heures

Exemple d'application : Le Benchmark COUPLEX GAZ 3D

Calculs en hydraulique
pure (EF) - 2008

- 160 000 Nœuds
- 287 000 Équations
- 6 M termes non nuls
- 100 heures pour
simuler 500 000 ans
(calcul séquentiel)



- Calcul à enrichir : M + T – Maillages plus fins, VF etc.

Plan de la présentation

▪ État des lieux en terme HPC des différents codes utilisés à EDF pour modéliser le stockage

- ✓ Code_Aster (modélisation THM)
- ✓ Syrthes (modélisation thermique)
- ✓ ESTEL (sûreté long terme)

Le parallélisme dans Code_Aster : *état des lieux*

▪Machine utilisée :

- Bull 2 nœuds pour parallélisme
- 16 proc par nœud
- 128 GO de Ram par nœud
- Réseau dédié
- Bibliothèque MPI de Bull

▪Parallélisme par décomposition de domaine en mémoire distribuée : solveur FETI

- Standard MPI
- Partitionneur Metis et Scotch
- Gains en linéaire :
 - CPU /10 sur 10 procs
 - Mémoire /2

▪Parallélisme numérique mis en oeuvre dans les algorithmes de résolution de systèmes linéaires

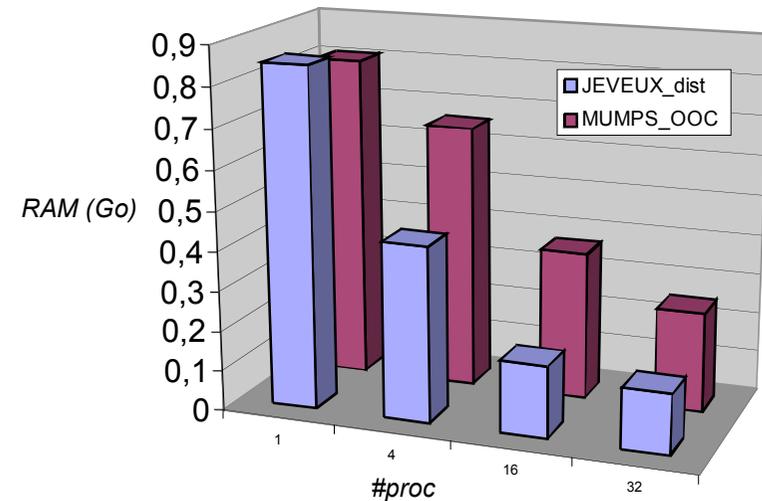
- MPI
- Solveurs MUMPS, PETSc

Solveurs linéaires

▪ MUMPS (Enseeiht-Cerfacs)

- ✓ Solveur linéaire direct s'appuyant sur une multifrontale parallélisée en mémoire distribuée
- ✓ Méthode la plus utilisée dans Côté Aster

- Méthode préconisée : parallèle distribué – OOC (gestion de mémoire RAM)
- Parallélisme presse-boutons
- Facile à mettre en œuvre
40% de charge en 1 an



Test Internes de Cuve : 6,7 Mddl

1 proc : 3h30
4 procs : 1h10

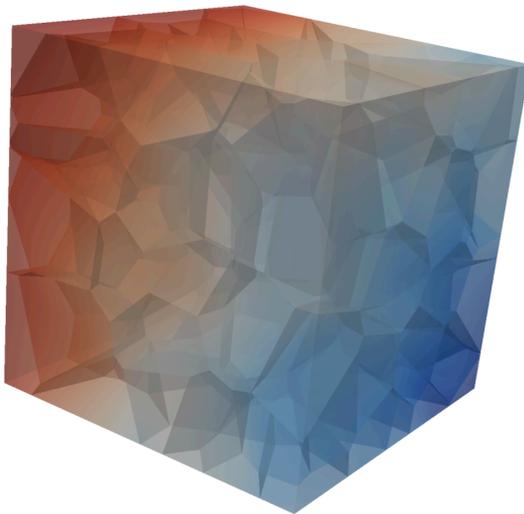
Test Epicure : 800 000 ddis

1 proc : 40 min
32 procs : 4 min

Solveurs linéaires

▪Bibliothèque PETSc (Argonne)

- ✓ Parallèle
- ✓ Grande variété de méthodes de résolution itératives (GC, BCGS, GemRes ...)
- ✓ Efficaces pour problèmes 3D massifs
- ✓ A explorer en THM (perspectives)

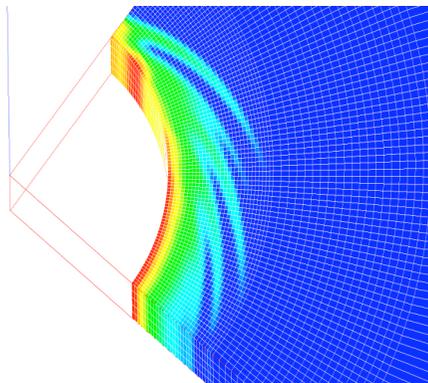


Agrégat : 3.3 Mddl
MULT_FRONT : 11h
PETSC 1proc : 55 min
4 proc : 13 min

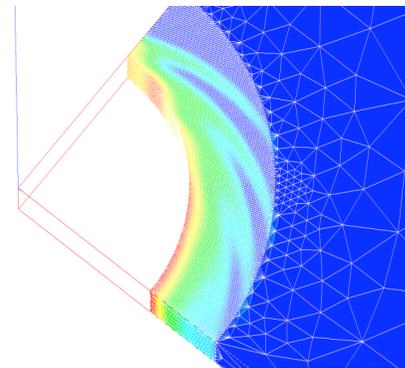
Un exemple de calcul second gradient traité en parallèle (mumps)

Variation de porosité après 15 mois de consolidation

27.450 hexaèdres



111.712 tétraèdres



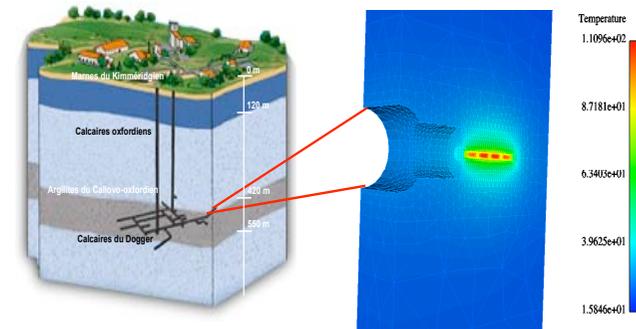
Indépendance des solutions à la discrétisation spatiale

Calcul 3d : 1 semaine sur 4 procs avec second gradient (gain de 2 par rapport à un calcul séquentiel)

La modélisation thermique avec SYRTHES

La modélisation thermique d'un ouvrage de stockage permet :

- Le dimensionnement par rapport au respect du critère thermique de 90°C
- L'optimisation des installation



Code utilisé : **SYRTHES**

Logiciel de thermique pour la simulation des transferts conductifs et radiatifs

➤ Principales caractéristiques de SYRTHES (distribué sous licence GPL):

- Géométries complexes en 2D, 2D axisymétrique ou 3D
- Prise en compte de l'anisotropie des matériaux
- Les propriétés physiques, conditions aux limites et termes sources sont variables en temps, espace, température,...
- Prise en compte du rayonnement de paroi à paroi avec traitement des ombrages, en 2D, 2D axi et 3D. Emissivité variable en fonction de la longueur d'onde
- Peut être couplé à un code CFD (actuellement *Code-Saturne* et NEPTUNE-CFD)
- Possibilité de transfert des champs de température vers la mécanique (Code_Aster)

SYRTHES 4 : caractéristiques numériques

➤ Méthodes de résolution

- Conduction : éléments finis basés sur des triangles à 3 nœuds en 2D, des tétraèdres à 4 nœuds en 3D
- Rayonnement thermique en milieu transparent : méthode de radiosit 
- R solution du syst me conductif : gradient conjugu 
- R solution du syst me radiatif : r sidu conjugu 

➤ Int gration de nouveaux mod les physiques

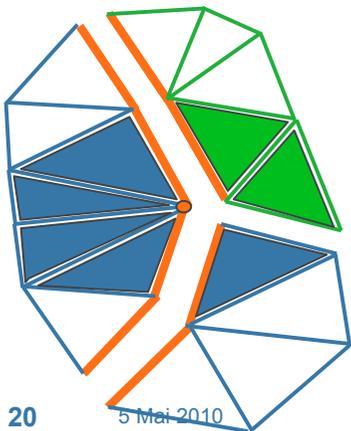
- Transferts coupl s de masse et de temp rature
- Rayonnement solaire
- Couplage volumique avec la CFD (il existait d j la possibilit  d'un couplage surfacique)

➤ Parall lisation de l'ensemble du code

- Bas  sur le principe du partitionnement de domaine

Le parallélisme dans SYRTHES 4

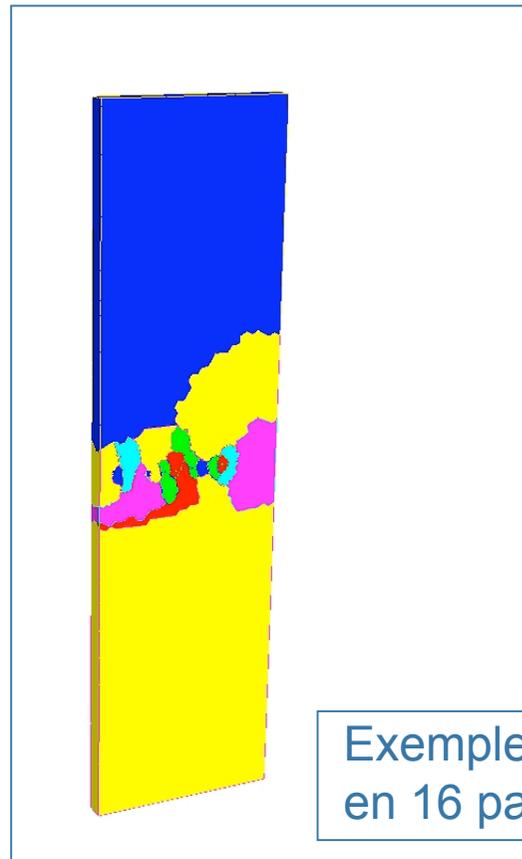
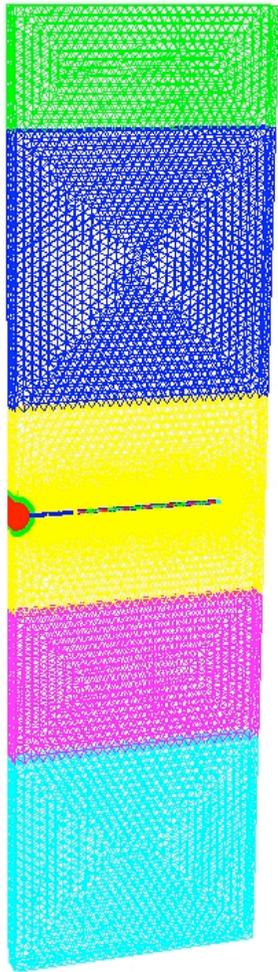
- Basé sur MPI
- Conduction et rayonnement répartis respectivement sur n et p processeurs
- Un pré-processeur génère des fichiers de maillages partitionnés et enrichis en vue des communications entre processeurs
- Chaque processeur communique avec les processeurs avec qui il possède des interfaces
- Au moment de l'exécution, chaque processeur ne « voit » qu'un problème réduit à une partition.
 - ✓ La phase d'initialisation est réalisée en parallèle et de façon autonome sur chaque processeur.
 - ✓ La phase de résolution fait intervenir des communications pour la résolution du problème global
- Lors de la résolution, les communications sont nécessaires lors :



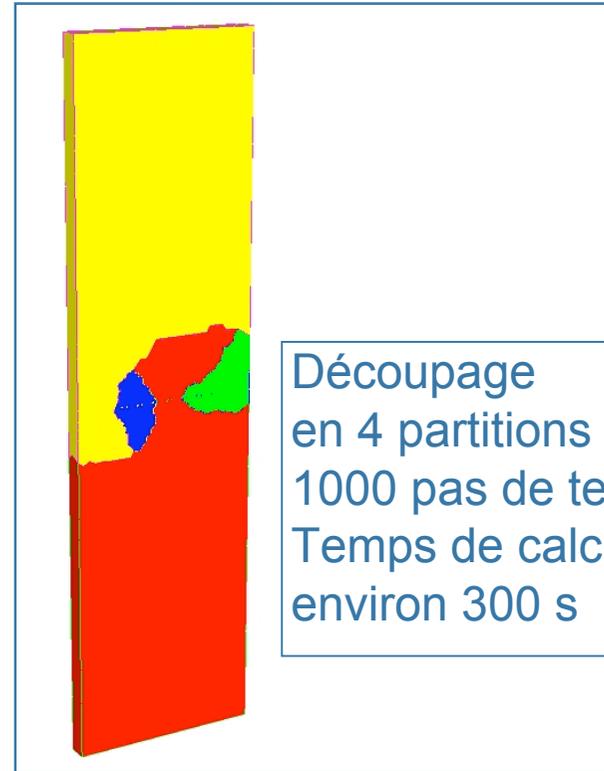
- des produits scalaires (communications collectives)
- des produits matrice/vecteur (communications point à point non bloquantes)
 - au moment de l'assemblage, les contributions sont complétées par celles provenant des autres processeurs
- de la prise en compte des Dirichlet

Cas du stockage : premiers tests avec SYRTHES 4

Maillage d'environ 600 000 mailles

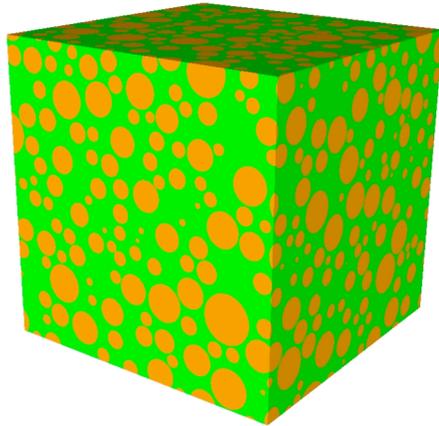


Exemple de découpage
en 16 partitions

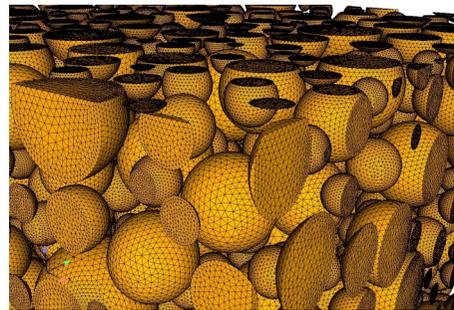
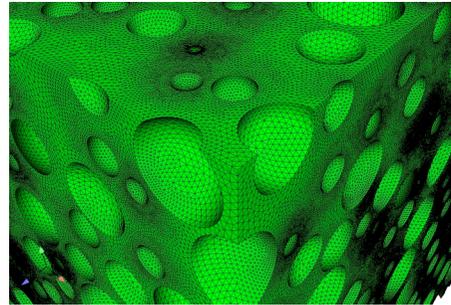


Découpage
en 4 partitions
1000 pas de temps
Temps de calcul :
environ 300 s

Modélisation d'un échantillon de béton (ex SYRTHES 4)



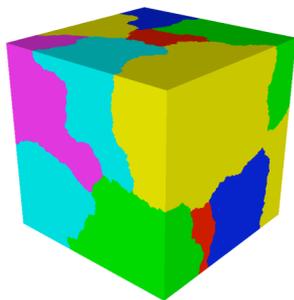
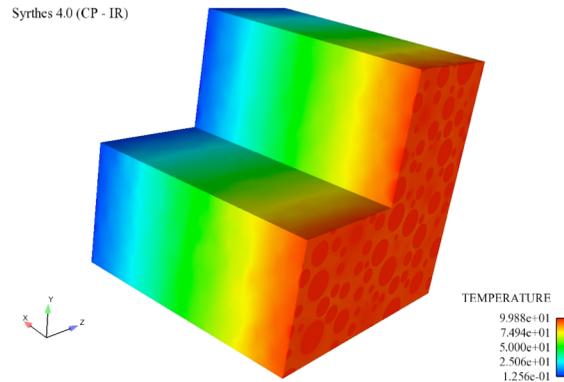
Modélisation thermique d'un cube de béton avec prise en compte explicite des inclusions



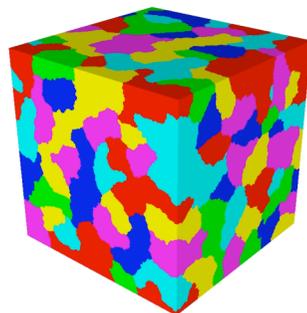
Maillages générés par B. Bary sous Salomé

Maillage de 23 Millions d'éléments
Calcul des propriétés thermiques équivalentes avec contraste de 100 entre inclusions et liant

Syrthes 4.0 (CP - IR)



Exemple de découpage en 16 sous-domaines

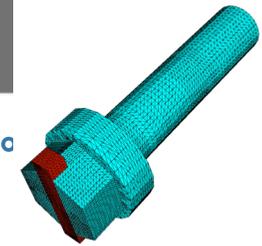


Exemple de découpage en 256 sous-domaines

Temps CPU/nbre Proc (sur CCRT)

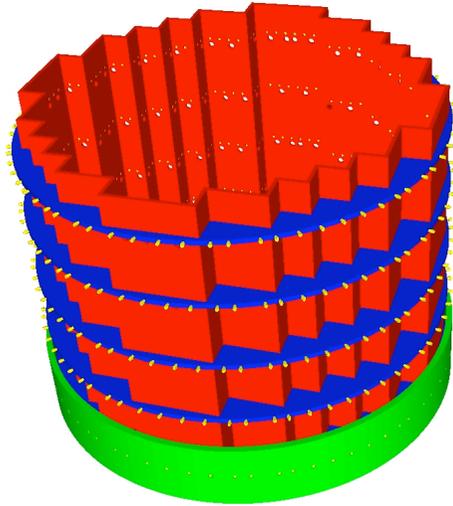
Nbre proc	initialisation (secondes)	total (en secondes)
1	404	47866
2	155	18468
4	74	8860
8	34	3098
16	17	1290
32	8	579
64	6	301
128	3	161
256	1,5	96

SYRTHES 4 : la simulation haute performance

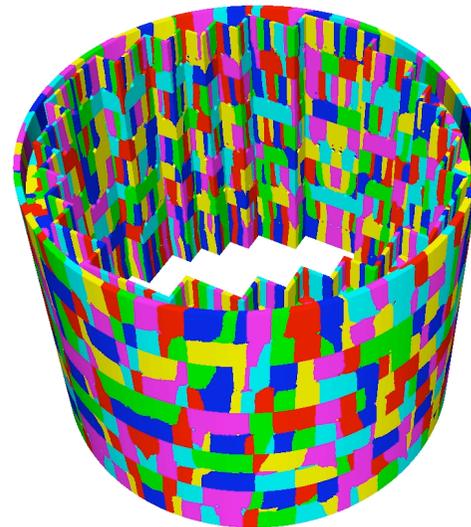


Calcul de la thermique des internes CPY sur 360°
6 renforts centraux – 1128 vis

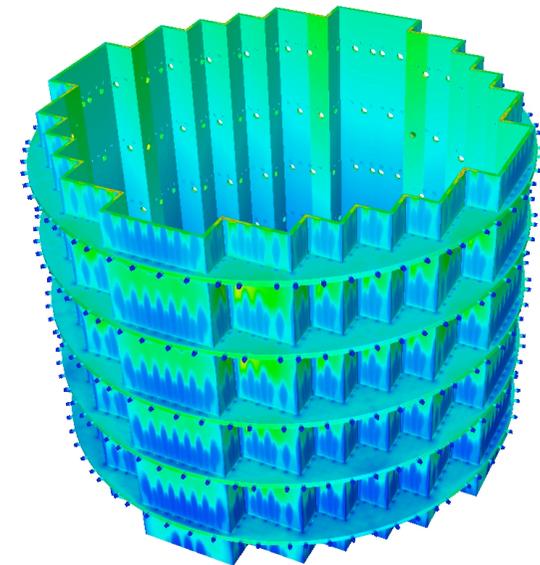
1.1 milliard
de tétraèdres



Décomposition
en 2048 partitions



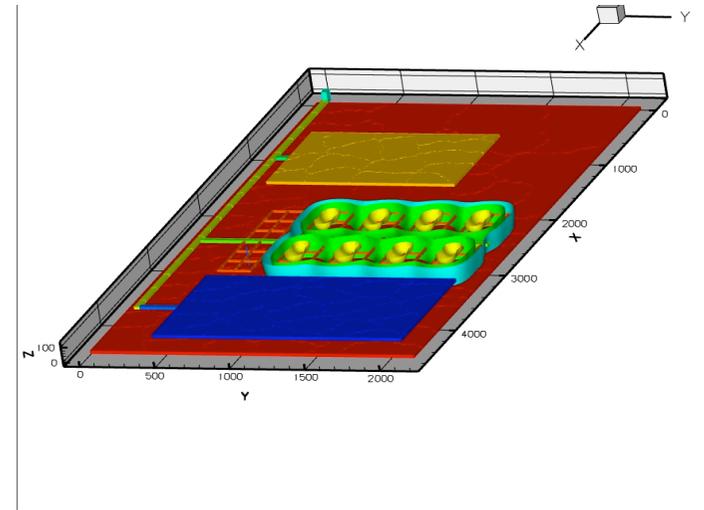
SYRTHES 4 sur ordinateur Blue Gene L
2048 processeurs
Temps de calcul : 1h30



La migration des RN avec ESTEL

La modélisation du transport des RN permet :

D'évaluer la sûreté long terme d'un stockage (et ses variantes) pour différents scénarii d'évolution du stockage



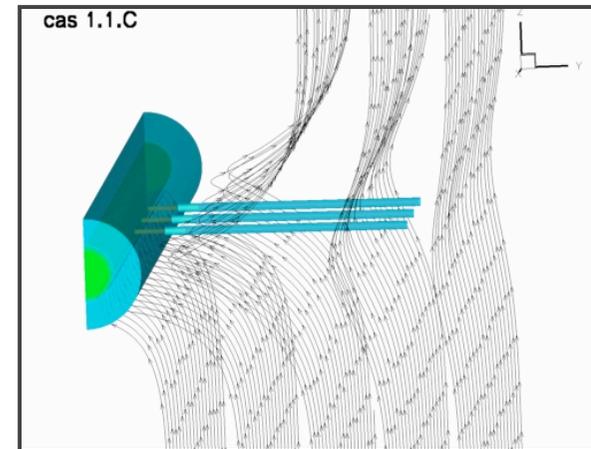
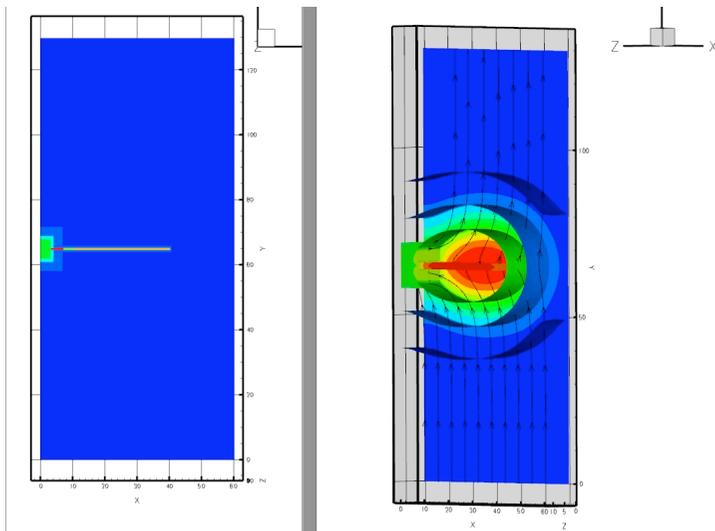
Code utilisé : **ESTEL** (Écoulements Souterrains **TELE**mac)

- Principales caractéristiques de ESTEL (voué à terme à être sous licence LGPL):
 - Géométries complexes en 2D et 3D
 - Prise en compte de l'anisotropie des matériaux
 - Prise en compte des phénomènes de : convection, dispersion, sorption, précipitation, décroissance et filiation radioactive

ESTEL2D/3D (système TELEMAC)

□ HYDROGEOLOGIE

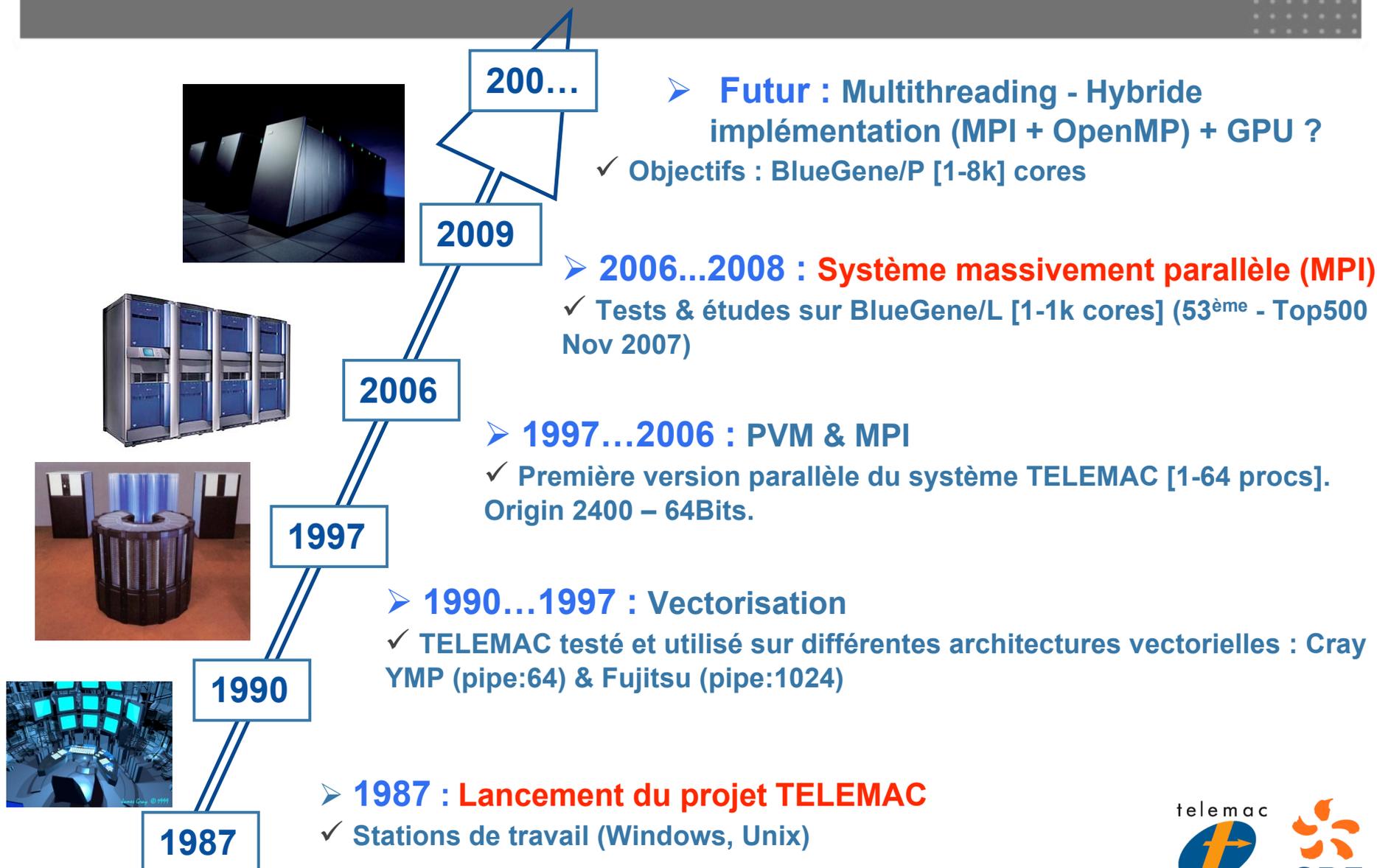
- Monophasique saturé/non saturé
- Solveur non linéaire type point fixe
- Discrétisations EF [P0/P1/P1-DISC]



□ TRANSPORT

- Phénomènes de convection, dispersion, sorption, précipitation, décroissance et filiation radioactive
- Solveur symétrique/non symétrique
- SUPG (EF) / CVFE 2D (EF sur maillage dual)

BIEF – Librairie Eléments Finis : chronologie



Parallélisme dans TELEMAC

❑ Principes de parallélisme dans la librairie EF de TELEMAC (BIEF) :

- Maillage distribué (interface sur frontières entre éléments) en pré-processing :

Métis et à venir Scotch & Paramétis

- Schéma de communication MPI **asynchrone non bloquant**

- Contributions lors de l'étape d'assemblage

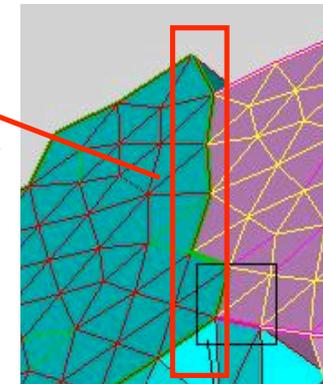
Pour le 2d membre du SL, on attend l'appel au solveur pour calculer sa décomposition aux interfaces entre SD -> - de communications

- Préconditionnement diagonal, Crout ...

- Solveurs symétriques / non symétriques parallèles

- I/O **distribuées** (possibilité agglomération en post-processing)

➔ **Augmentation du GC en parallèle ~ > 1%**



❑ Opportunités de développement HPC

- Parallélisation de la méthode des caractéristiques finalisée

- Implémentation en cours de finalisation du **solveur direct MUMPS**

- A venir : tests d'implémentation de solveurs hybrides :

- **CNC (Concurrent Number Cruncher) : technologie GPU**

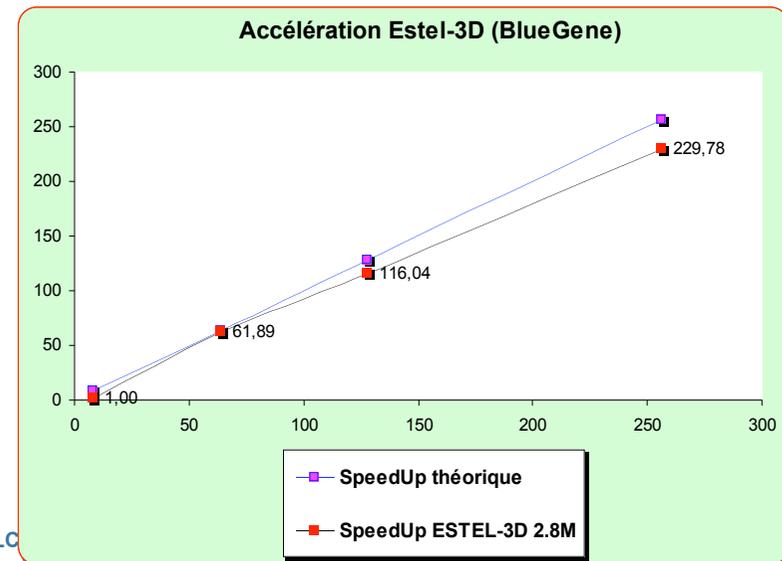
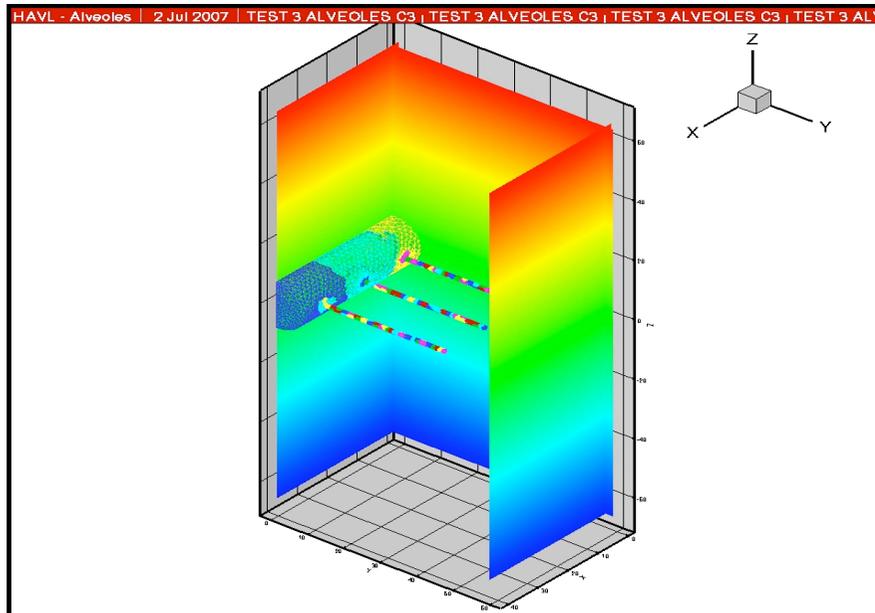
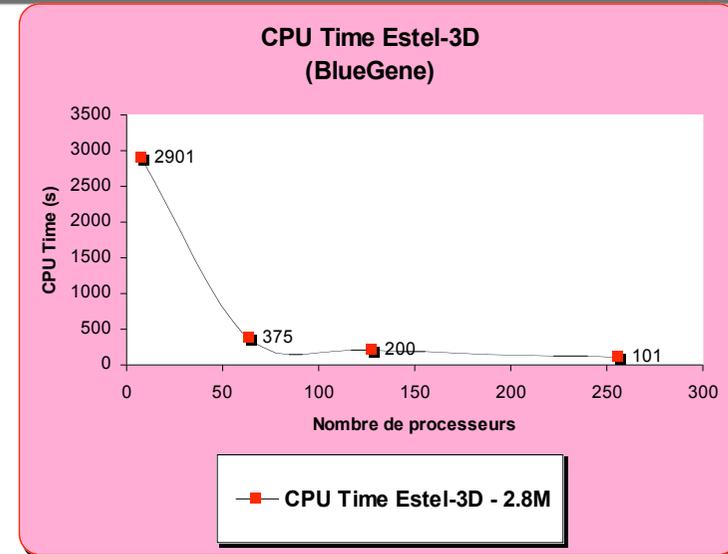
- Hybrides : MPI + multithreads...

- Réflexion sur **solveurs/préconditionneurs multigrilles** pour l'hydrogéologie

- Distribution de calculs paramétriques ...

Parallélisme (LNHE/IBM/SINETICS)

- ❑ Partitionnement de maillage domaine pour la modélisation en hydrogéologie
- ❑ NDDL $\sim 10^6$ (2007) $\rightarrow > 10^7$ (2009)
- ❑ 10^2 CPU (2007) $\rightarrow 10^3$ CPU (2009)
- ❑ Implémentation parallèle portable (clusters « locaux », CCRT, BlueGene)
- ❑ Bonne scalabilité générale, gain mémoire fort



Conclusions

- **Les problèmes à étudier se sont complexifiés, les codes aussi**
- **Des méthodes et des besoins différents selon les problèmes abordés : difficultés (nombre de ddl, schémas, physique etc.) variant avec les codes**
- **Des avancées substantielles obtenues sur le parallélisme ces dernières années sur les différents codes**
- **Un besoin assez générique d'études paramétriques**
- **Chantier encore en cours ...**