



Le calcul haute performance à l'Andra : quelques exemples de réalisations à ce jour

GNR Momas / GDR Calcul – 05 mai 2010

M. Leconte – B. Vialay

Direction Scientifique – Service Evaluation et Analyse de Performance

Le « pourquoi » du calcul haute performance à l'Andra

Les aspects matériels

- ▮ Moyens classiques : cluster (laboratoire), stations de travail
- ▮ Moyens supplémentaires : grille de calcul, centres nationaux
- ▮ Nouveaux matériels : GPU...

Les aspects logiciels

- ▮ GPU
- ▮ Tough2-MP
- ▮ Porflow

Les applications

- ▮ Désaturation de la zone de stockage
- ▮ Modélisation d'ensemble du stockage
- ▮ Modélisation hydrogéologique



1. Le « pourquoi » du calcul haute performance à l'Andra

Contexte

■ Des centres de stockage existants :

- CSM (Manche) : surveillance
- CSFMA et CSTFA (Aube) : en exploitation

*FA : Faible Activité
MA : Moyenne Activité
HA : Haute Activité
VL : Vie Longue*

■ Des projets :

- **HA-MAVL** : laboratoire de recherche souterrain de Meuse Haute-Marne à Bure + espace technologique de Saudron
- FAVL : groupe de réflexion créé par le HCTISN

■ Un cadre législatif fixant des échéances 2012, 2014 ... 2025

- 1996, 2001, 2005, 2009...
- 2012 : débat public
- 2014 : demande d'autorisation de création du stockage
- ...
- 2025 : mise en service

Evaluer la sûreté et les performances des installations de stockage → La quantification fine espace temps des processus physiques et chimiques

- ▮ La complexité de la physique mise en jeu
- ▮ La multiplicité des échelles de temps et d'espace

La simulation numérique en tant qu'outil

- ▮ Préparer/mettre au point des expérimentations
- ▮ Aider à l'interprétation des expérimentations
- ▮ Simuler des situations inaccessibles à l'expérimentation

→ Le calcul haute performance en tant que moyen

- ▮ Les aspects matériels
- ▮ Les aspects logiciels
- ▮ Les applications



2. Les aspects matériels

Cluster (de type « laboratoire »)

- Solution retenue depuis 2000 (précédemment logique : « super calculateur »)
- Cluster actuel mis en exploitation en 2008 (→2012)
 - Linux 64 bits
 - 128 cœurs au sein de 16 nœuds bi-processeurs quadri-cœurs avec 32 Go ram / nœud de calcul
 - Réseau Infiniband pour l'accès aux données (système de fichiers Lustre) et les communications mpi
 - Un volume de données de 30 To avec système de sauvegarde
 - Haute disponibilité

Stations de travail

- Matériel « boosté » en processeur, mémoire, carte graphique/de calcul
- Calcul + Visualisations de résultats sous Windows
- Machines virtuelles linux pouvant accéder aux données et code de calcul du cluster

Grille de calcul

- ▮ Solution « interne » s'appuyant sur les ressources bureautiques de l'Andra
- ▮ Basée sur ComputeMode
 - Projet IGGI (RNTL) : Brgm, Icatis, Inria, Mandriva
 - Linux 32 bits → prototype 64 bits
 - Tests 32/64 bits sur des applications séquentielles et parallèles

Centres nationaux / Calcul à la demande

- ▮ « Une » réponse aux calculs très gourmands (plusieurs semaines)
- ▮ « A tester » pour étudier :
 - La scalabilité des algorithmes
 - Les adaptations ou optimisations à réaliser
 - Les aspects pratiques : modalités d'accès, transfert de données, sécurité ...

GPU

▮ Une solution matérielle dès 2007

- ☐ Précision calcul insuffisante

▮ Configuration d'une solution de test en 2009

- ☐ Calcul double précision
- ☐ Configuration système Cuda
- ☐ Taille mémoire « faible » (4 Go) vis-à-vis des problèmes à résoudre
- ☐ Tests PGI à mener

▮ Constante évolution

- ☐ Précision (norme IEEE)
- ☐ Configurations multi-GPU sur une même carte mère ?
- ☐ Commutateurs réseau pour GPU ?
- ☐ Cuda / OpenCL (OpenGPU) / Stream, HMPP, PGI ?



3. Les aspects logiciels

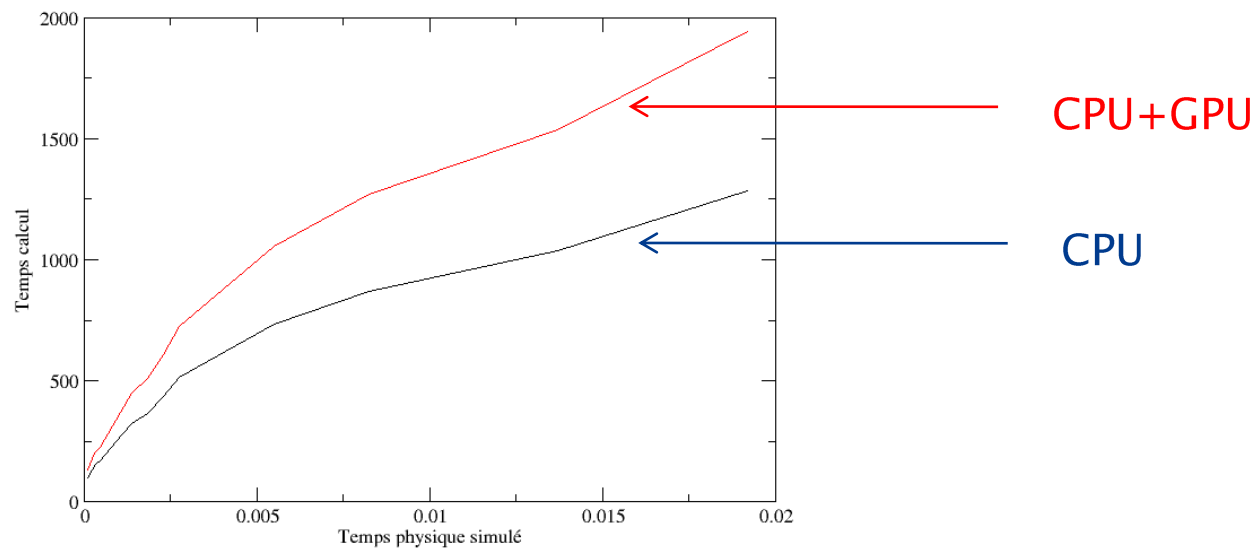
Adaptabilité de code

■ Tough2-MP (parallèle MPI) : transfert multiphasique en milieu poreux

□ Structures de données

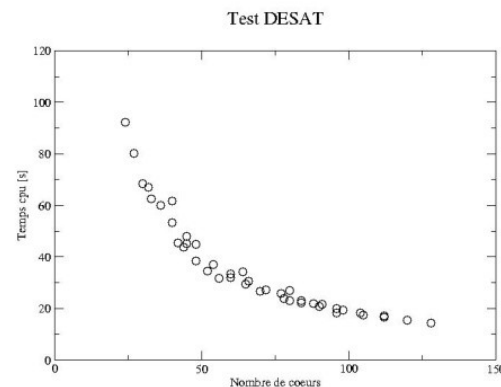
□ Optimisation d'algorithmes

+ *Taille des problèmes à résoudre*



Code multiphasique multi-composant gaz en milieux poreux

- ▮ Code Open Source
- ▮ Code volumes finis, version parallèle du code Tough2
- ▮ Bibliothèque de solveurs d'Aztec
 - BiGCStab
 - GMRES
 - ...
- ▮ Trois méthodes de partitionnement issues de METIS
 - KWAY
 - VKWAY
 - Recursive
- ▮ Le parallélisme repose sur MPI
 - Bonne scalabilité jusqu'à 128 cœurs



Code hydraulique et transport

▮ éprouvé

- ☐ développé depuis presque 30 ans
- ☐ utilisé par de nombreux organismes (USGS, Exxon, Gaz De France...)

▮ Souplesse d'utilisation

- ☐ Nombreux solveurs
- ☐ Nombreuses phénoménologies prises en comptes
- ☐ Variation spatio-temporelle des paramètres physiques

Calcul parallèle

▮ OpenMP

- ☐ Implémentation opérationnelle
- ☐ Pas idéale pour les plus « gros » calculs

▮ MPI

- ☐ Branchement de la bibliothèque Hypre
 - + *performant en utilisation séquentielle*
 - + *pas optimale en utilisation parallèle*



4. Les applications

Objectif

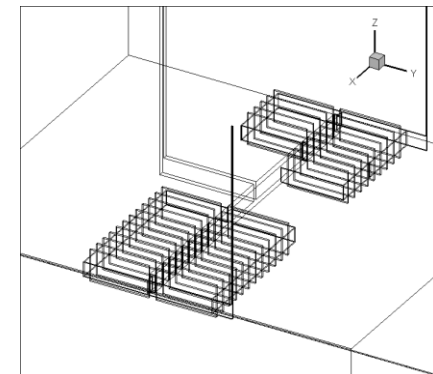
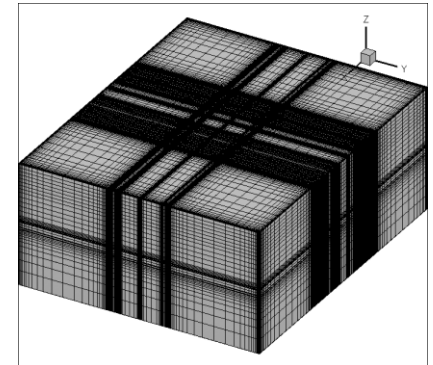
- » Étude de faisabilité de simulations pour l'évaluation de la cinétique et de l'extension de la désaturation des composants de la zone de stockage pendant l'exploitation

Description physique du modèle

- » Écoulement diphasique eau-gaz (EOS 3)
- » Dimensions du domaine : 4800 m x 4000 m x 128 m
- » Durée simulée : 8 ans

Caractéristiques numériques

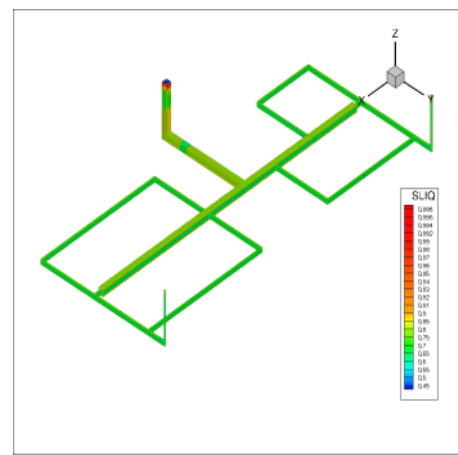
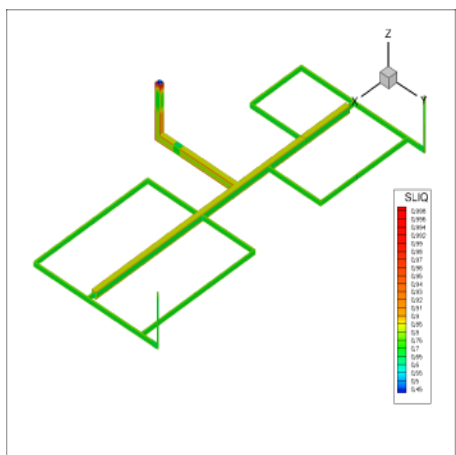
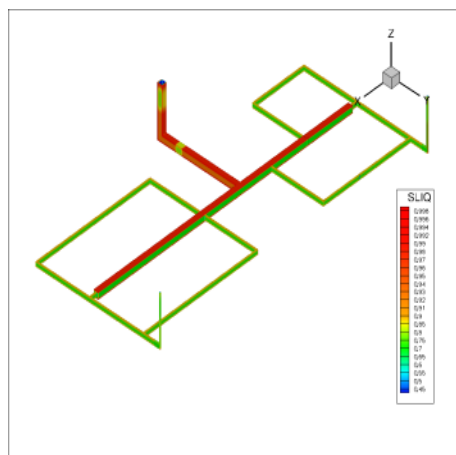
- » 2.8 millions d'éléments
- » Solveur BiCGStab, préconditionneur Schwarz additif
- » Maillage structuré, taille des mailles : du mètre jusqu'à la centaine de mètres suivant l'axe
- » Partitionnement KWAY (minimisation des connexions)
- » 10000 pas de temps (de 0.055 s. à 25 jours)
- » 27 cœurs répartis sur 9 nœuds
- » Temps de calcul : 4 jours



Résultats

- ▣ Confirmation de la faisabilité de simulations sur l'ensemble du stockage
- ▣ Test de scalabilité concluant jusqu'à 128 cœurs
 - Accélération supra-linéaire jusqu'à 100 cœurs
 - Pas d'asymptote de l'accélération jusqu'à 128 cœurs

humidité relative constante (50%) sur les parois externes
des matériaux en contact avec l'air de ventilation



Degré de saturation en eau dans l'EDZ fracturé 1 semaine, 6 mois et 1 an après le début de la ventilation

Objectifs

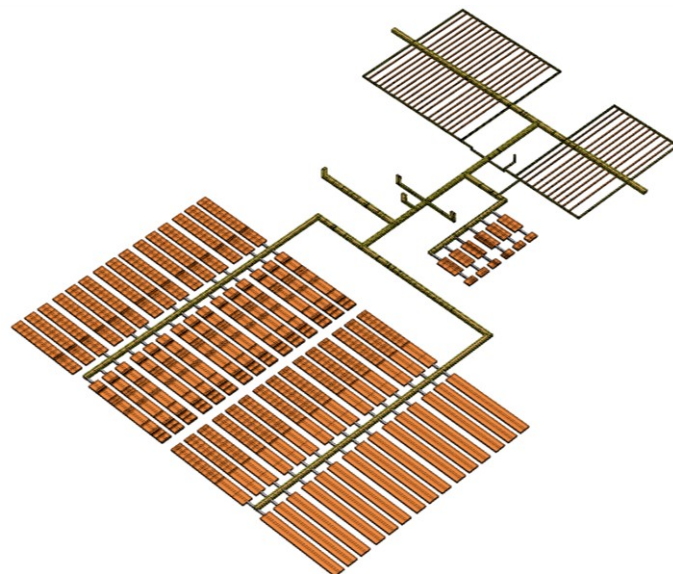
- Représenter simultanément de l'ensemble des zones de stockage, des galeries de liaison et des ouvrages d'accès
- Modéliser toutes les interactions hydrauliques susceptibles de se produire en fonction des gradients hydrauliques imposés
- Renforcer la confiance accordée aux calculs en confirmant le caractère enveloppe des évaluations séparées

Description physique du modèle

- Modélisation hydraulique et transport
- Dimension du domaine 6500 m x 5000 m x 130 m
- Durée simulée : 1 million d'années

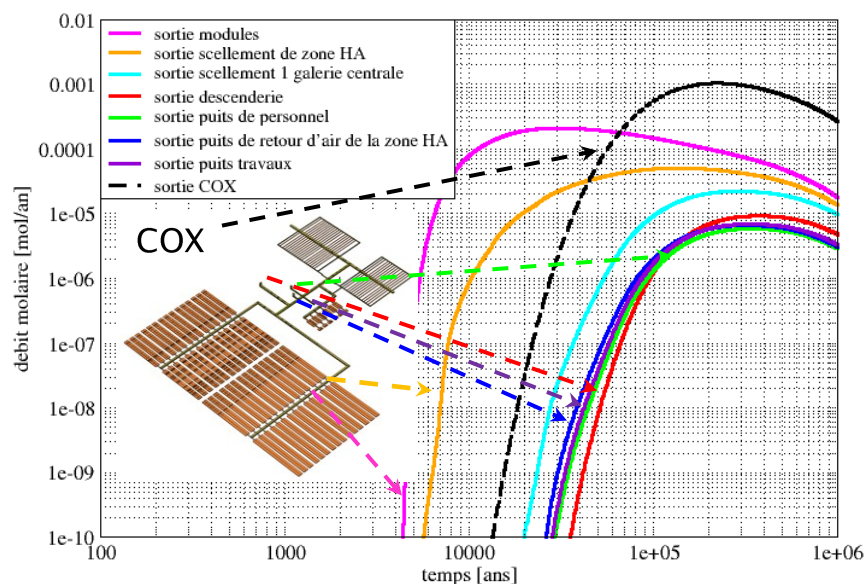
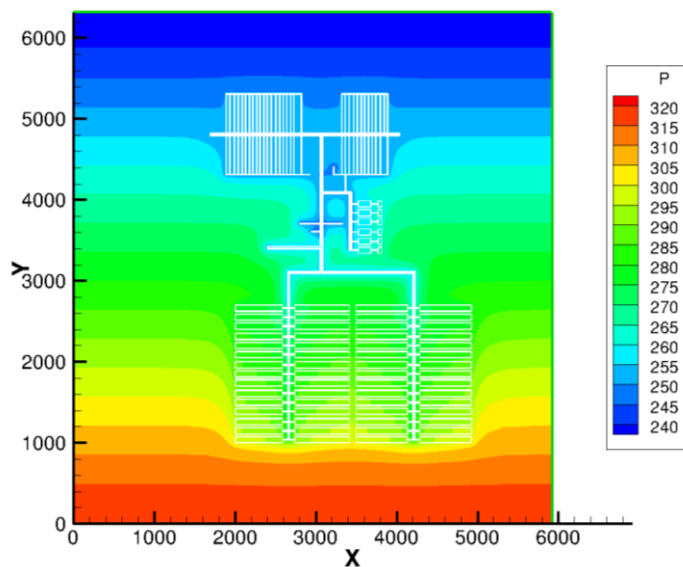
Caractéristiques numériques

- 10 millions d'éléments
- Solveur BiCGStab, préconditionneur Neumann
- Maillage structuré
- 3000 pas de temps de durée maximale 500 ans
- 4 cœurs à mémoire partagée (1 processeur)
- Temps de calcul 5 jours

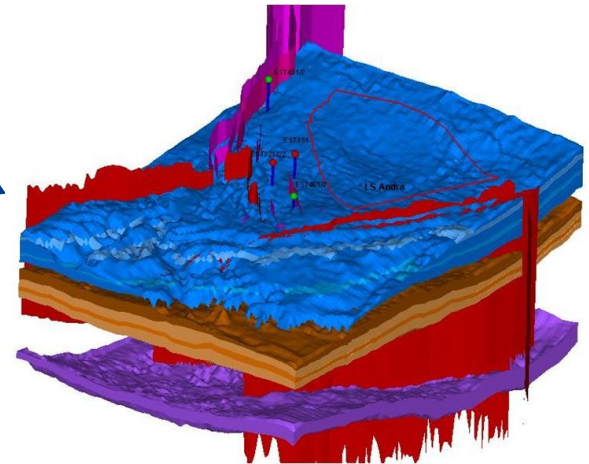
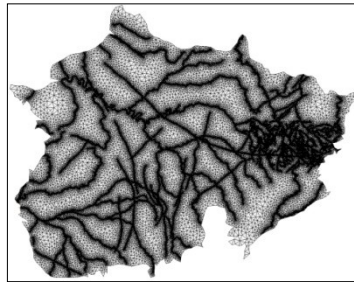


Résultats

- Quantification des débits d'eau, des débits molaire, des charges, etc. sur un « grand » maillage. Fonctionnement d'ensemble très robuste.
- Résultats en accord avec ceux obtenus par des calculs « par boîtes »



Précision accrue au niveau du secteur de Bure



		# of students	Notes	Notes/Comments/Significant results or other	Grade
MATHS		22	Mathematics		1
SCIENCE		22	Science		1
ENGLISH		22	English		1
		22	English		2
		22	English		3
		22	English		4
		22	English		5
		22	English		6
		22	English		7
		22	English		8
		22	English		9
		22	English		10
		22	English		11
		22	English		12
		22	English		13
		22	English		14
		22	English		15
		22	English		16
		22	English		17
		22	English		18
		22	English		19
		22	English		20
		22	English		21
		22	English		22
		22	English		23
		22	English		24
		22	English		25
		22	English		26
		22	English		27
		22	English		28
		22	English		29
		22	English		30
		22	English		31
		22	English		32
		22	English		33
		22	English		34
		22	English		35
		22	English		36
		22	English		37
		22	English		38
		22	English		39
		22	English		40
		22	English		41
		22	English		42
		22	English		43
		22	English		44
		22	English		45
		22	English		46
		22	English		47
		22	English		48
		22	English		49
		22	English		50
		22	English		51
		22	English		52
		22	English		53
		22	English		54
		22	English		55
		22	English		56
		22	English		57
		22	English		58
		22	English		59
		22	English		60
		22	English		61
		22	English		62
		22	English		63
		22	English		64
		22	English		65
		22	English		66
		22	English		67
		22	English		68
		22	English		69
		22	English		70
		22	English		71
		22	English		72
		22	English		73
		22	English		74
		22	English		75
		22	English		76
		22	English		77
		22	English		78
		22	English		79
		22	English		80
		22	English		81
		22	English		82
		22	English		83
		22	English		84
		22	English		85
		22	English		86
		22	English		87
		22	English		88
		22	English		89
		22	English		90
		22	English		91
		22	English		

- ❑ Sur des extensions horizontales et verticales réduites : environ 150 km² avec une douzaine de couches

□ → Calculs d'hydraulique et de transport

Optimisation de code pour exploiter du parallélisme

- ▮ PhreeqC (USGS, Open Source) pour le transport réactif
- ▮ Traces (IMFS) en hydraulique et transport
 - OpenMp, MPI, GPU
 - Adaptation de la structure de données
- ▮ Porflow
 - Bibliothèque HYPRE
 - + *Modification du code pour basculer d'une utilisation séquentielle à une utilisation parallèle*
 - Portage sur GPU
 - + *Étude de faisabilité*

Mise en service d'un nouveau cluster en 2012

- ▮ Quelle architecture ? CPU, GPU, CPU/GPU...

A paraître très prochainement dans *Applied Numerical Mathematics* :

- ▮ *Parallel solution of Mixed Finite Element/Spectral Element systems for convection–diffusion equations on non-matching grids.*
- ▮ **Isabelle Boursier** (thèse Andra), Damien Tromeur–Dervout, and Yuri Vassilevski