

# Conception et développement d'algorithmes asynchrones pour la résolution de l'équation du transport des neutrons sur des architectures massivement parallèles et hétérogènes

A. Calloo<sup>a</sup>, C. Chevalier<sup>b</sup>, R. Le Tellier<sup>c</sup>, M. Perache<sup>b</sup>, Thierry. Gautier<sup>d</sup>

<sup>a</sup>CEA, DES, DM2S/SGLS/LCAN  
F-91191 Gif-sur-Yvette cedex, France

<sup>b</sup>CEA, DAM

F-91680 Bruyères-Le-Châtel cedex, France

<sup>c</sup>CEA, DEN, DTN/SMTA/LMAG, Cadarache

F-13108 Saint Paul-lez-Durance, France

<sup>d</sup>Dept, Equipe

F-38330 Montbonnot-Saint-Martin, France

---

## Résumé

Cette proposition de thèse s'inscrit dans le cadre de la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles par le biais d'une discrétisation des variables. Elle s'intéresse, dans un formalisme d'éléments finis, à travailler sur la conception d'algorithmes au travers de modèles de programmation parallèle et asynchrone pour la résolution de ces équations.

Le cadre industriel applicatif est la résolution de l'équation de Boltzmann appliquée au transport des neutrons dans le cœur d'un réacteur nucléaire. Dans ce contexte, beaucoup de codes modernes de simulation s'appuient sur une discrétisation par éléments finis (plus précisément, un schéma Galerkin discontinu décentré amont) pour des maillages cartésiens ou hexagonaux du domaine spatial. L'intérêt de ce travail de thèse prolonge des travaux précédents pour explorer leur extension dans un cadre d'architecture distribuée qui n'ont pas été abordé jusque-là. Il s'agira de coupler des stratégies algorithmiques et numériques pour la résolution du problème à un modèle de programmation qui expose du parallélisme asynchrone.

Ce sujet s'inscrit dans le cadre de la simulation numérique des réacteurs nucléaires. Ces simulations multiphysiques coûteuses requièrent le calcul du transport des neutrons en cinétique qui peuvent être associées à des transitoires de puissance violents. La stratégie de recherche adopté pour cette thèse permettra de gagner en coût de calcul, et alliée à un modèle massivement parallèle, peut définir les contours d'un solveur neutronique efficace pour ces problèmes multiphysiques.

Un travail réussi dans le cadre de cette thèse permettra à l'étudiant de prétendre à un poste de recherche en simulation et analyse numérique de problèmes physiques complexes, par-delà la seule physique des réacteurs nucléaires.

## Abstract

This PhD thesis work aims at designing an efficient solver for the solution to the neutron transport equation in Cartesian and hexagonal geometries for heterogeneous and massively parallel architectures. This goal can be achieved with the design of optimal algorithms with parallel and asynchronous programming models.

The industrial framework for this work is in solving the Boltzmann equation associated to the transport of neutrons in a nuclear reactor core. At present, more and more modern simulation codes employ an upwind discontinuous Galerkin finite element scheme for Cartesian and hexagonal meshes of the required domain. This work extends previous research which have been carried out recently to explore the solving step on distributed computing architectures which we have not yet tackled in our context. It will require the coupling of algorithmic and numerical strategies along with programming model which allows an asynchronous parallelism framework to solve the transport equation efficiently.

This research work will be part of the numerical simulation of nuclear reactors. These multiphysics computations are very expensive as they require time-dependent neutron transport calculations for the

severe power excursions for instance. The strategy proposed in this research endeavour will decrease the computational burden and time for a given accuracy, and coupled to a massively parallel and asynchronous model, may define an efficient neutronic solver for multiphysics applications.

Through this PhD research work, the candidate will be able to apply for research vacancies in high performance numerical simulation for complex physical problems.

---

## 1. Contexte et objectifs scientifiques

L'enjeu de cette thèse est de travailler sur les modèles de programmation parallèle, notamment dans un cadre distribué (multi-processus) pour résoudre efficacement l'équation de transport des neutrons en géométrie structurée (cartésienne ou hexagonale). Cet enjeu est essentiel dans le contexte des applications multiphysiques où la part de la neutronique domine celle des autres physiques. Ce travail sera mené au sein d'une mini-app **Donut**[1]. **Donut** a été développée en C++ en utilisant la bibliothèque **Kokkos**[2] qui permet de faciliter le portage sur des architectures hétérogènes CPU/GPU.

### 1.1. Cadre numérique

Le contexte pratique pour la thèse place ce travail au niveau de la partie cœur qui fait l'interfaçage avec d'autres physiques. En termes de discrétisation, nous nous plaçons dans le cadre d'un formalisme multigroupe pour la variable énergie [3] et une méthode de collocation, la méthode des ordonnées discrètes ( $S_n$ ) [4] pour la variable angulaire. Du point de vue de la discrétisation spatiale, ce travail utilisera un schéma Galerkin discontinu (DG) décentré amont tel que proposé, initialement dans le cadre du transport de particules, dans [5]. Ce schéma de type éléments finis requiert la définition d'un espace d'interpolation et utilise des bases de fonctions appropriées selon le maillage du domaine d'intérêt.

Dans le cadre cartésien, il existe beaucoup de travaux qui se sont intéressés aux stratégies de portage GPU, ou sur l'utilisation de tâches pour un meilleur ordonnancement des étapes de résolution afin de mieux tirer partie des performances d'une machine[6]. Dans le cas de l'hexagone régulier, nous obtenons un pavage en nid d'abeille d'un domaine qui représente le modèle d'un cœur de réacteur nucléaire à pas hexagonal. Les précédents travaux de David Labeurthre [7] ont défini et implémenté un schéma numérique qui utilise des bases de fonctions généralisées d'ordre élevé au cas d'un élément hexagonal. Ce type de schéma spatial évite un "surmaillage" de l'hexagone en sous-éléments comme c'est souvent le cas dans des schémas actuels, tels que des losanges [8] ou triangles [9]. En alliant ces bases de fonctions d'ordre élevé à une stratégie de raffinement local en ordre ( $p$ -AMR - Adaptive Mesh Refinement [10]), ce schéma améliore significativement le coût du calcul à une précision donnée en diminuant le nombre de degrés de liberté requis.

D'autre part, la résolution du transport des neutrons est un processus itératif à plusieurs niveaux qui a une convergence lente. Pour améliorer cette convergence, le problème en transport est accéléré par un opérateur dégradé, typiquement l'opérateur de diffusion - c'est ce qui est communément appelé *accélération synthétique de diffusion* (DSA) dans le domaine de la neutronique. Cette accélération est efficace si la discrétisation spatiale de la diffusion est cohérente avec celle du transport.

### 1.2. Démarche et plan de travail

Pour ce travail de thèse, nous nous plaçons dans le cadre des supercalculateurs avec une architecture massivement parallèle et de plus en plus hétérogène. Jusqu'au début des années 2000, la puissance de calcul des processeurs suivait la loi de Moore avec la croissance de la fréquence horloge [11]. Néanmoins, ce modèle s'est essouffé pour des raisons physiques et techniques, et les unités de calcul ont intégré des architectures vectorisées pour continuer d'accroître la puissance de calcul. Avec l'explosion du calcul parallèle, l'accès non

---

*Email addresses:* [ansar.calloo@cea.fr](mailto:ansar.calloo@cea.fr) (A. Calloo), [cedric.chevalier@cea.fr](mailto:cedric.chevalier@cea.fr) (C. Chevalier), [romain.le-tellier@cea.fr](mailto:romain.le-tellier@cea.fr) (R. Le Tellier), [marc.perache@cea.fr](mailto:marc.perache@cea.fr) (M. Perache), [thierry.gautier@inrialpes.fr](mailto:thierry.gautier@inrialpes.fr) (Thierry. Gautier)

uniforme à la mémoire (NUMA) est généralement adopté pour les calculateurs, mettant ainsi en évidence l'accès hiérarchique à la mémoire. Le parallélisme sur ce type d'architecture est multiniveaux : unité vectorielle dans chaque cœur, les cœurs au sein de chaque socket, les sockets dans un nœud de calcul, et les nœuds regroupés au sein du supercalculateur. En complément des unités de calculs généralistes, les supercalculateurs disposent d'unités accélératrices tels que les GPU, qui peuvent augmenter les performances de calculs mais nécessitent un changement de paradigme de programmation, et potentiellement algorithmique.

Récemment, les travaux de Gabriel Suau ont grandement contribué à démontrer :

- l'intérêt de la vectorisation pour mieux tirer partie du parallélisme à grain fin [12] en se basant sur les travaux de S. Moustafa[6]
- l'applicabilité des paradigmes de tâches pour permettre une meilleure expressivité de la résolution de l'équation de transport [1]
- l'utilisation de la bibliothèque `Kokkos` pour explorer le portage sur GPU de l'algorithme de résolution du transport radiatif par la méthode du balayage dans le cadre d'un parallélisme intra-nœud.

Les travaux de Gabriel Suau marquent une étape importante dans la compréhension de l'utilisation des machines avec de telles architectures dans la résolution de l'équation de transport, tant sur les gains que sur les limitations. Ses implémentations ont été réalisées au sein d'une maquette `Donut` qui servira de brique de base pour les travaux à venir.

L'intérêt de ce travail de thèse prolonge les travaux de Gabriel Suau pour explorer l'extension avec les aspects d'architecture distribuée qui n'ont pas été abordé dans les travaux précédents.

En effet, les travaux autour de `Donut` ont porté sur la résolution du transport de particules en exploitant au mieux les différents niveaux de parallélisme au sein d'un nœud d'un calculateur, à savoir la vectorisation, le parallélisme en mémoire partagée (shared memory multiprocessor SMP), ou encore un GPU sur le nœud de calcul. Néanmoins, pour des raisons de taille de problème à résoudre<sup>1</sup>, il est souvent essentiel de décomposer les données sur plusieurs nœuds pour effectuer la résolution. Plusieurs stratégies d'implémentation peuvent être envisagées et leurs expressions dépendent fortement des choix des algorithmes de résolution numérique d'une part, ainsi que du choix du modèle de programmation pour aborder le caractère distribué.

Par le passé, les travaux de S. Moustafa[13] ont démontré l'intérêt de l'utilisation d'un framework comme `PaRSEC` pour ordonnancer le graphe de tâches qui s'obtient naturellement dans l'expression du problème de transport des particules. D'autre part, `Kokkos` est à ce jour limité au parallélisme intra-nœud mais des efforts de recherche sont en cours pour permettre une transition du modèle classique de *bulk synchronous parallelism* vers un parallélisme par tâche asynchrone des opérations, notamment en intégrant les avancées de la proposition "*P2300 std::execution*"<sup>2</sup> du standard C++. Cette approche est explorée dans la thèse de Gabriel Dos Santos et est mise en application dans la bibliothèque `KokkosComm` qui ajoute également la gestion de bibliothèques de communication pour le passage en multi-GPU et multi-nœuds.

Cette thèse comportera quelques axes de travail qui sont les suivants. Dans un premier temps, l'étudiant devra s'approprier le processus de balayage qui intervient dans l'algorithme de la source itérée propre aux solveurs de neutronique et le code `Donut`. Il faudra développer ou adapter les structures de données à un contexte distribué, notamment les aspects de découpage d'un domaine spatial dans le cadre hexagonal pour réduire les dépendances entre domaines. Dans cette première étape, il faudra aussi évaluer comment agencer les différentes accélérations (préconditionnements) qui interviennent dans la résolution du problème de transport. Par exemple, la DSA nécessite l'assemblage d'une matrice globale sur le domaine spatial et que cela peut être désavantageux dans le contexte de calculs parallèles. Il serait intéressant d'évaluer l'apport d'une DSA par morceau telle que définie par Fevotte2018 pour nos applications.

Une fois ces étapes mises en place, il s'agira ensuite de travailler autour de `KokkosComm` pour évaluer les solutions qui seront disponibles à date, et à défaut d'évaluer d'autres voies à mettre en place dans le cadre d'un modèle asynchrone sur architecture mixte CPU/GPU comme `std::execution` précédemment mentionné ou des approches plus spécifiques comme le composant `KokkosGraph` de la bibliothèque qui généralise la gestion des dépendances complexes pour les noyaux de calculs GPU.

---

1. La résolution d'un problème pour la physique des réacteurs fait intervenir des problèmes qui ont une taille d'une dizaine de To.

2. <https://www.open-std.org/jtc1/sc22/wg21/docs/papers/2024/p2300r10.html>

Le candidat recevra par cette thèse une formation approfondie dans différents domaines :

- les modèles de programmation hétérogène dans un cadre d’informatique scientifique ;
- les méthodes de résolution de l’équation du transport des neutrons ;
- l’analyse numérique (théorie de l’approximation) ;
- la physique des réacteurs (neutronique, accidents graves).

Un travail réussi dans le cadre de cette thèse permettra à l’étudiant de prétendre à un poste de recherche en modélisation et analyse numérique de problèmes physiques complexes, par-delà la seule physique des réacteurs. De plus, les nouvelles possibilités de modélisations apportées par ce travail de thèse seront évaluées sur des problèmes de neutronique des réacteurs à neutrons rapides garantissant à l’étudiant une visibilité au sein de la communauté des physiciens des réacteurs.

## 2. Objectifs applicatifs

Ce sujet s’inscrit dans le cadre de la simulation numérique des accidents graves (AG) des réacteurs nucléaires refroidis au sodium (RNR-Na). Contrairement aux réacteurs à eau légère, ces simulations multiphysiques coûteuses requièrent le calcul du transport des neutrons en cinétique dans ces phases accidentelles qui peuvent être associées à des transitoires de puissance violents. Le CEA de Cadarache participe au développement du code SIMMER pour la simulation de ces transitoires et a initié depuis quelques années le développement d’une plateforme logicielle appelée SEASON dont l’une des finalités est de pouvoir permettre le couplage des modules thermohydraulique et dégradation de SIMMER avec des codes externes de neutronique. En particulier, pour la phase primaire de l’accident (*i.e.* avant la rupture des boîtiers hexagonaux des assemblages), une approche dite multi-canal peut être employée afin de réduire drastiquement le coût de calcul associé aux composantes thermohydraulique et dégradation [14]. Par contre, le coût associé à la résolution de la neutronique reste dans tous les cas très important et domine le temps de calcul dans cette approche multi-canal. Les méthodes de discrétisation et le parallélisme sont des axes importants de gain en performances pour cette résolution du problème de neutronique.

Dans ce cadre multiphysique, l’autre physique<sup>3</sup> telle que la thermohydraulique limite la représentation des grandeurs dont dépend la neutronique (e.g. densité et température des phases en présence) à des valeurs moyennées radialement par assemblages. Les travaux de thèse de David Labeurthre sont intéressants dans ce cadre numérique pour éviter une surdiscrétisation de la neutronique pour une précision souhaitée. Cette étape étant acquise, nous nous sommes consacrés à la deuxième phase qui est l’optimisation algorithmique et les modèles de programmation parallèle au travers de la thèse de Gabriel Suau qui fortement contribué en ce sens, et notamment sur un travail significatif pour la portabilité de performance sur GPU.

L’accent sera mis sur une résolution du problème neutronique sur un maillage spatial relativement homogénéisé (échelle assemblage), de même que la discrétisation en énergie et en angle, et on souhaite une restitution rapide des résultats avec une précision acceptable à des fins d’études paramétriques pour les accidents graves. Les axes de recherche visés pour cette thèse permettront d’explorer d’une part la pertinence d’un solveur de neutronique dédié pour le cadre des simulations multiphysiques, et d’autre part, dans un cadre plus général que la neutronique, l’intérêt des algorithmes et modèles de programmation mis en œuvre pour utiliser de manière plus efficace les architectures massivement parallèles.

Si le cadre des RNR-Na offre un cadre applicatif privilégié, les applications des résultats de cette thèse alimenteront sans aucun doute la R&D autour des codes déterministes pour la simulation des réacteurs à eaux pressurisés comme les EPR<sup>TM</sup> ou encore les VVER.

## Références

- [1] G. Suau, A. Calloo, R. Baron, R. Le Tellier, T. Gautier, Efficient sweep kernels on shared-memory architectures for the discrete ordinates neutron transport equation on Cartesian and hexagonal geometries, in : To be published, Paris, France, 2024.

---

3. autre que la neutronique

- [2] H. C. Edwards, C. R. Trott, D. Sunderland, Kokkos: Enabling manycore performance portability through polymorphic memory access patterns, *Journal of Parallel and Distributed Computing* 74 (12) (2014) 3202 – 3216, domain-Specific Languages and High-Level Frameworks for High-Performance Computing. doi:<https://doi.org/10.1016/j.jpdc.2014.07.003>.  
URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0743731514001257>
- [3] E. E. Lewis, W. F. J. Miller, *Computational Methods of Neutron Transport*, ANS, La Grange Park, 1993.
- [4] B. G. Carlson, Tables of equal weight quadrature  $EQ_n$  over the unit sphere, Technical Report LA-4734, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos (1971).
- [5] W. H. Reed, T. R. Hill, Triangular mesh methods for neutron transport equation, Technical Report LA-UR-73-479, Los Alamos National Laboratory (1973).
- [6] S. Moustafa, Massively parallel cartesian discrete ordinates method for neutron transport simulation, Ph.D. thesis, thèse de doctorat de l'Université de Bordeaux 2015 (2015).  
URL <http://www.theses.fr/2015BORD0408>
- [7] D. Labeurthre, A. Calloo, R. L. Tellier, Extending gout's wachspres finite elements on regular hexagons to higher orders, in : Proc. of International Conference on Mathematics and Computational methods Applied to Nuclear Science and Engineering., Raleigh, USA, 2021.
- [8] R. Le Tellier, D. Fournier, C. Suteau, Reactivity perturbation formulation for a discontinuous Galerkin based transport solver and its use with adaptive mesh refinement, *Nuclear Science and Engineering* 167 (2011) 209–220.
- [9] J. Y. Moller, J. J. Lautard, MINARET, a deterministic neutron transport solver for nuclear core calculations, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering M&C 2011, Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- [10] D. Fournier, R. Le Tellier, Adaptive algorithms for a self-shielding treatment using a wavelet-based Galerkin method, in : Proc. of Int. Conf. on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics M&C 2009, ANS, Saratoga Springs, USA, 2009.
- [11] G. E. Moore, Cramming more components onto integrated circuits, *Electronics* 38 (8) (April 1965).
- [12] G. Suau, A. Calloo, R. Baron and R. Le Tellier, Efficient and portable vectorized sweep kernels for the transport equation on 3d cartesian grids using the kokkos framework, *Nuclear Science and Engineering* 0 (0) (2024) 1–17. arXiv:<https://doi.org/10.1080/00295639.2024.2340173>, doi:10.1080/00295639.2024.2340173.  
URL <https://doi.org/10.1080/00295639.2024.2340173>
- [13] S. Moustafa, M. Faverge, L. Plagne, P. Ramet, 3D Cartesian Transport Sweep for Massively Parallel Architectures with PARSEC, in : IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS 2015), Hyderabad, India, 2015, pp. 581–590. doi:10.1109/IPDPS.2015.75.  
URL <https://hal.inria.fr/hal-01078362>
- [14] M. Guyot, P. Gubernatis, R. Le Tellier, Space–time effects in the initiating phase of sodium fast reactors and their evaluation using a three-dimensional neutron kinetics model, *Annals of Nuclear Energy* 85 (2015) 115–126.