

Application du calcul haute performance et de la simulation numérique à l'IFP

Roland Masson
Thomas Guignon, Christian Angelberger

IFP





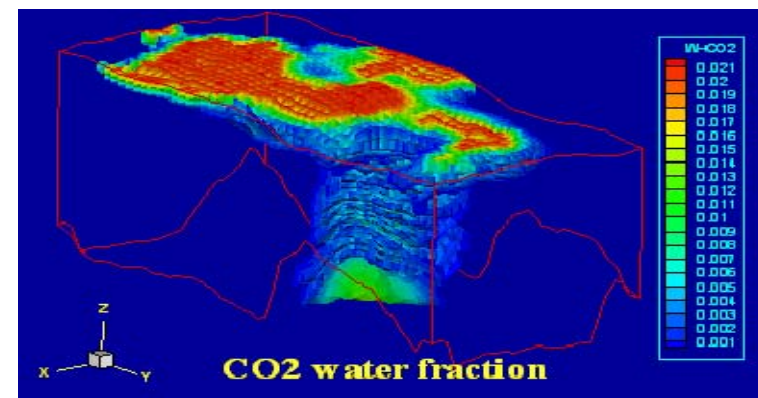
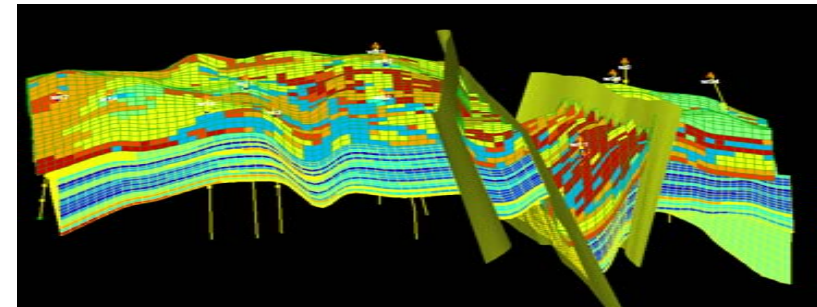
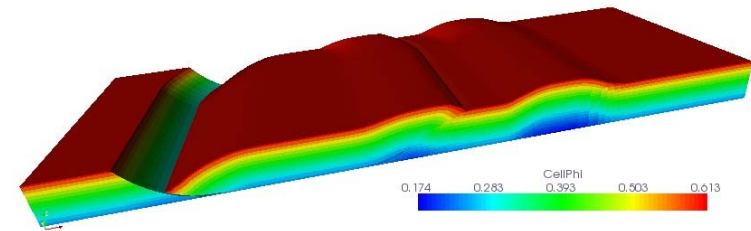
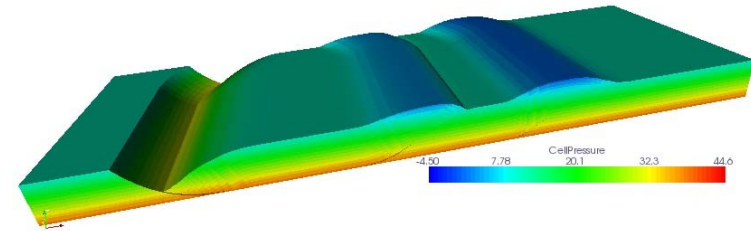
Plan

- Exemples de deux applications IFP
 - Simulation des écoulements en milieux poreux
 - Solveurs linéaires: état de l'art et perspectives
 - Plateformes Arcane et ArcGeoSim
 - Simulation de la combustion moteur

Ecoulements Polyphasiques en Milieux Poreux

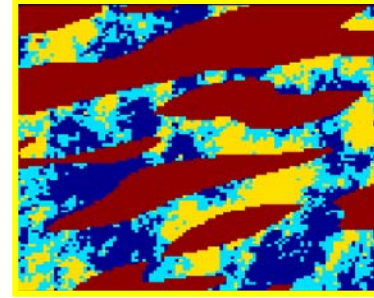
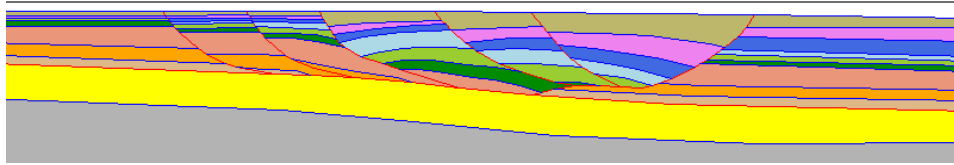
Applications

- Simulation de bassin
- Simulation de réservoir
- Simulation du stockage géologique du CO₂

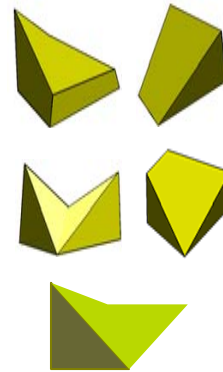
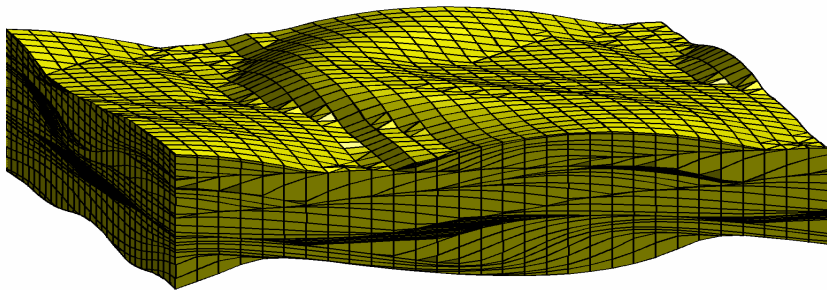


Géométries-Maillages

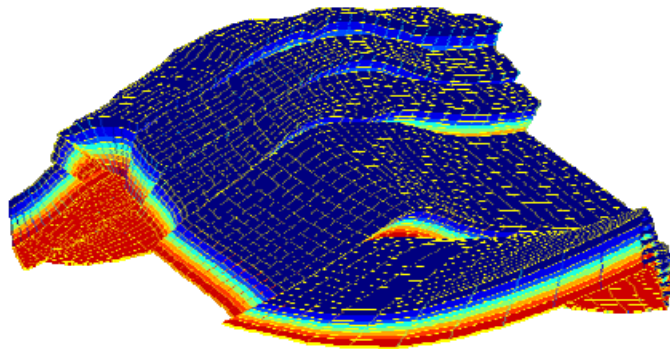
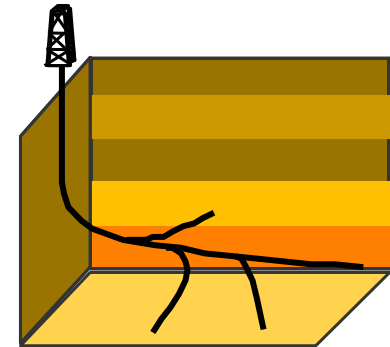
Milieux stratifiés hétérogènes
anisotropes



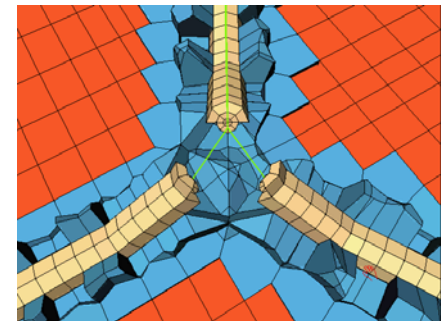
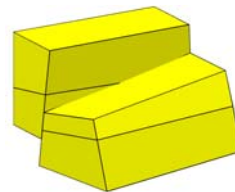
Erosions



Puits



Failles



Modèles Compositionnels

Phases: $\alpha = 1, \dots, N_p$ (eau, huile, gaz, ...)

Composants $i=1, \dots, N_c$ (H_2O , HCs, CO_2 , ...)

Inconnues

$$P, T \text{ (fixed)}, C_i^\alpha = \frac{m_i^\alpha}{m^\alpha}, S_\alpha = \frac{Vol_\alpha}{Vol_{Pore}}$$

Lois thermodynamiques:

$$\rho_\alpha(P, T, C^\alpha), \mu_\alpha(P, T, C^\alpha), f_\alpha(P, T, C^\alpha)$$

Lois hydrodynamiques: $k_{r,\alpha}(S, \sigma, x), P_{c,\alpha}(S, \sigma, x)$

Loi de Darcy

$$V_\alpha = -\rho_\alpha \frac{k_{r,\alpha}}{\mu_\alpha} K \left(\nabla(P + P_{c,\alpha}) - \rho_\alpha \vec{g} \right)$$

$$\partial_t \sum_\alpha \left(\rho_\alpha \phi S_\alpha C_i^\alpha \right) + \text{div} \left(\sum_\alpha C_i^\alpha V_\alpha \right) = Q_i$$

Conservation de la
masse

$$\sum_\alpha S_\alpha = 1$$

Conservation du volume
de pore

+ Equilibre thermodynamique

Discrétisation Volumes Finis collocalisés

$$X = (X_K)_{K \in T} = (P_K, S_K^\alpha, C_K^\alpha)_{K \in T}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} M_K (X_K^{n+1}) + \sum_{\sigma \in \Sigma_K} F_{K,\sigma} (P^{n+1}, S^*, C^*) = 0 \\ C_K (X_K^{n+1}) = 0 \end{array} \right. \quad * = n, n + 1$$

■ Système non linéaire

- Algorithme de type Newton
- Gestion des changements de phase par le Flash thermodynamique

■ Système linéaire

- Réduction du système par élimination des lois de fermeture et des inconnues explicites

Systeme linéaire



$$\begin{pmatrix} J_{pp} & J_{pc} \\ J_{cp} & J_{cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_p \\ X_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_p \\ b_c \end{pmatrix}$$

- Systeme couplant des inconnues de nature elliptique (P) et hyperboliques (C)=Saturations, Compositions
 - De grande taille
 - De 3 à 10 inconnues par maille
 - 10^5 à 10^7 mailles
 - Non symétrique
 - Couplages des inconnues P et C
 - Lois de fermetures non linéaires en pression
 - Mal conditionné
 - Inconnue elliptique, hétérogénéités, anisotropies

Méthode Combinative-AMG



- Motivation = exploiter les préconditionneurs existants efficaces pour chaque bloc du système pris séparément
 - Bloc elliptique en pression: Algebraic MultiGrid (AMG)
 - Bloc saturations/compositions: préconditionneurs plus locaux de type ILU
- Difficultés
 - Couplage des inconnues
 - Définition d'un bloc pression adapté au préconditionneur AMG

Méthode Combinative-AMG

$$\begin{pmatrix} J_{pp} & J_{pc} \\ J_{cp} & J_{cc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_p \\ Y_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_p \\ b_c \end{pmatrix}$$

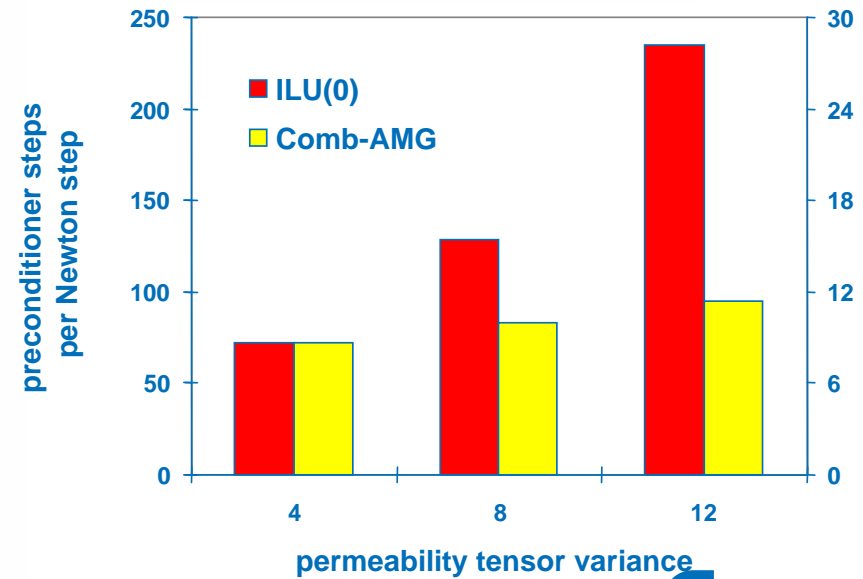
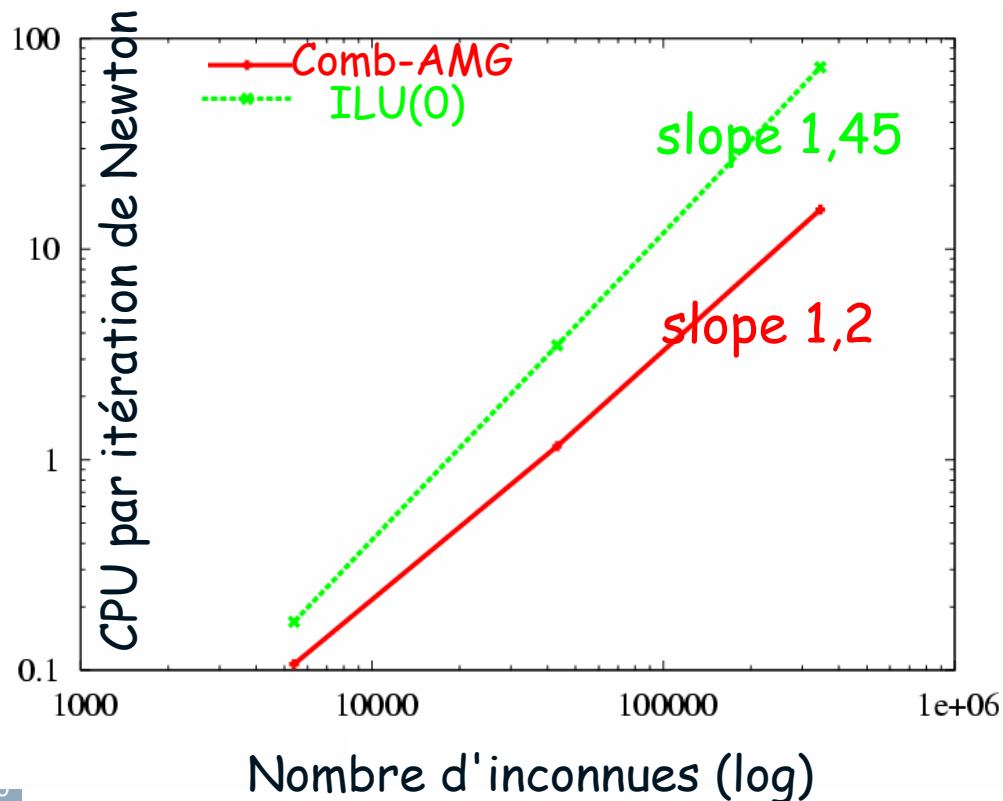
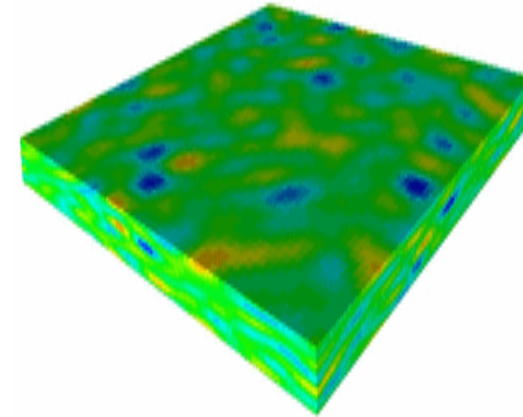
$$\begin{pmatrix} Y_p^{(1)} \\ Y_c^{(1)} \end{pmatrix} = C_{ILU(0)}^{-1} \begin{pmatrix} b_p \\ b_c \end{pmatrix} \quad \text{Préconditionnement ILU(0) du système}$$

$$Y_p^{(2)} = C_{AMG}^{-1} \left(b_p - J_{pp} Y_p^{(1)} - J_{cp} Y_c^{(1)} \right) \quad \text{Vcycle(s) AMG sur le bloc pression}$$

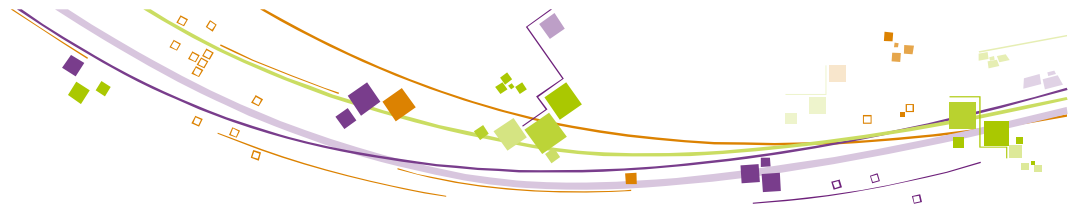
$$\begin{pmatrix} Y_p \\ Y_c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_p^{(1)} + Y_p^{(2)} \\ Y_c^{(1)} \end{pmatrix} = \left[C_{ILU(0)}^{-1} + \begin{pmatrix} C_{AMG}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \left(I - J C_{ILU(0)}^{-1} \right) \right] b$$

Cas test synthétiques Black Oil en simulation de réservoir

- Modèle Black Oil (3 inconnues par maille)
- Champ de perméabilité log-normal
- Maillage Cartésien



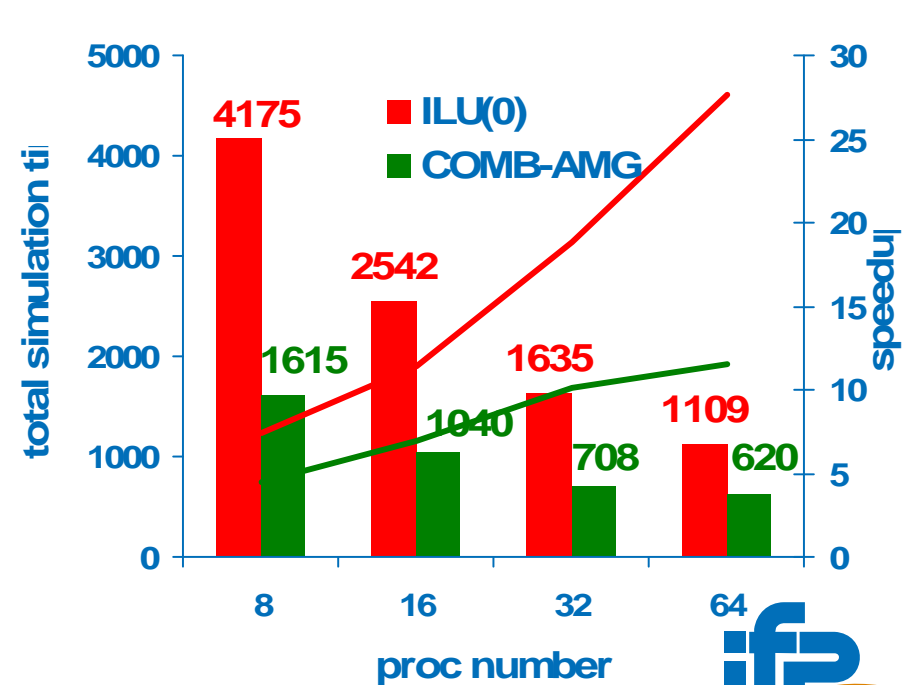
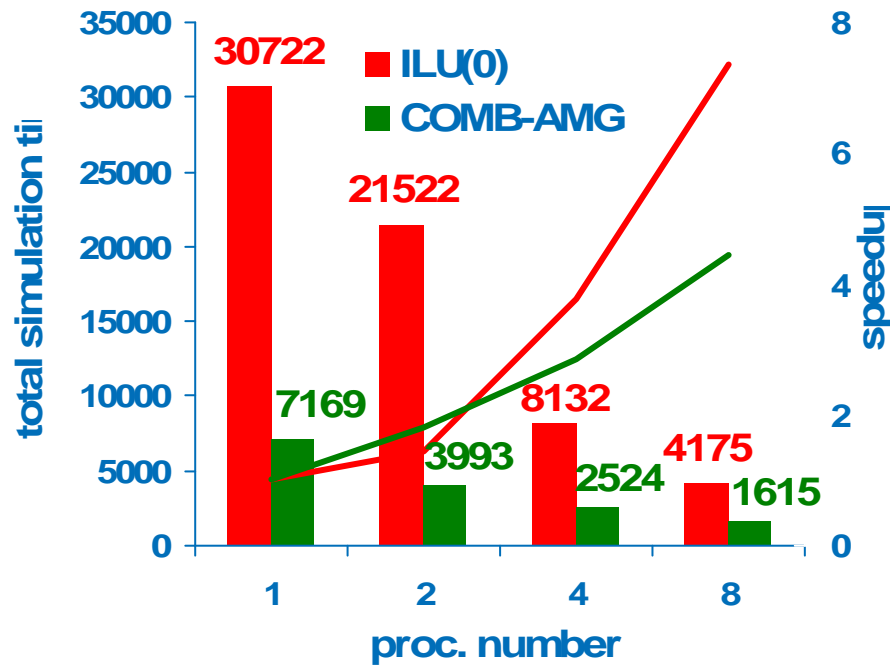
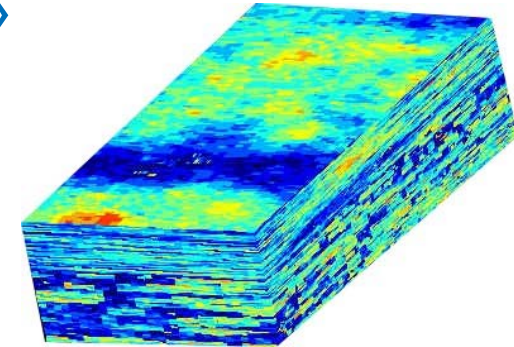
Cas test SPE10



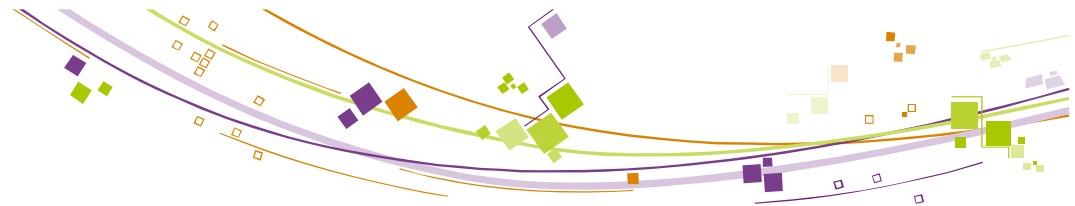
■ « SPE10 comparative solution project »

<http://www.spe.org/csp/datasets/set02.htm>

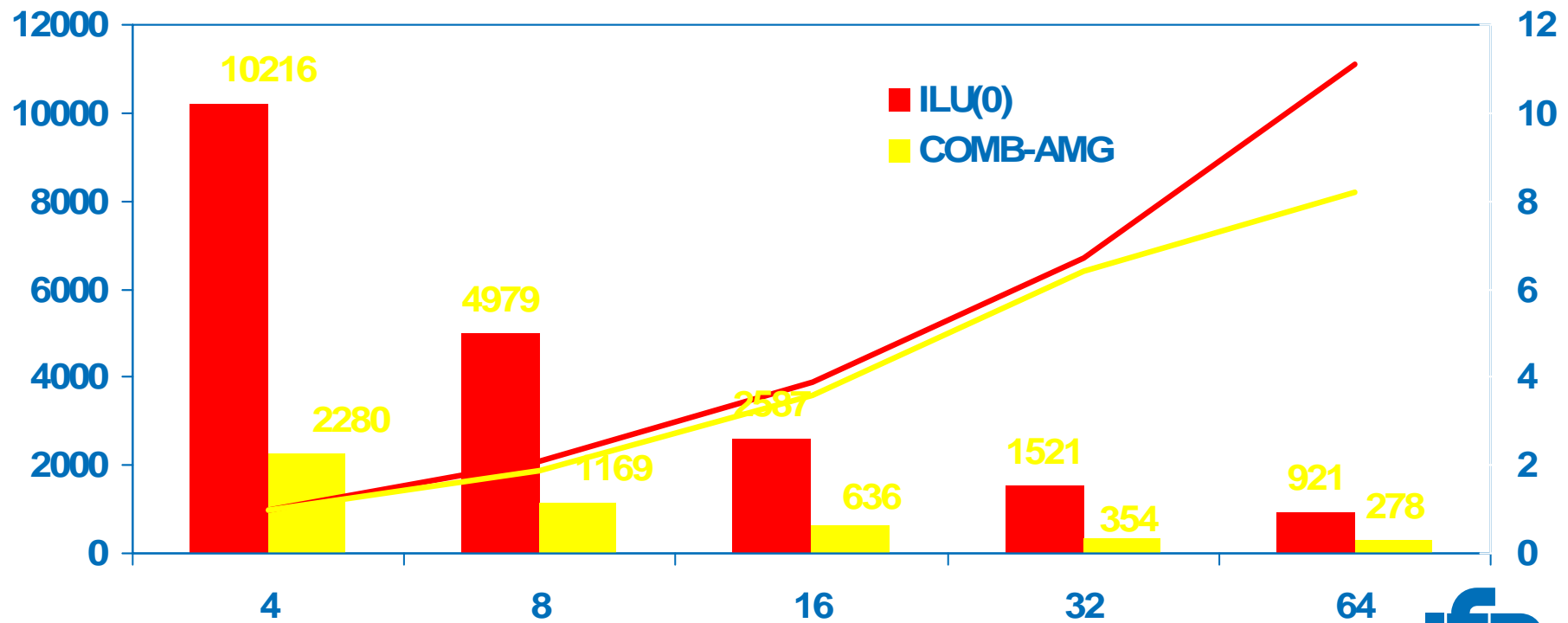
- 2 phases (water and oil)
- 1 Million de mailles, 2000 jours de simulation



Cas test PAB



- Black Oil
- 3 inconnues par maille
- 4.200.000 mailles

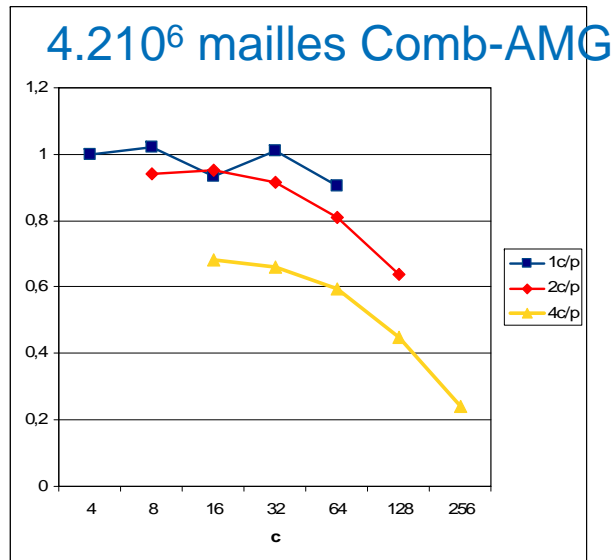
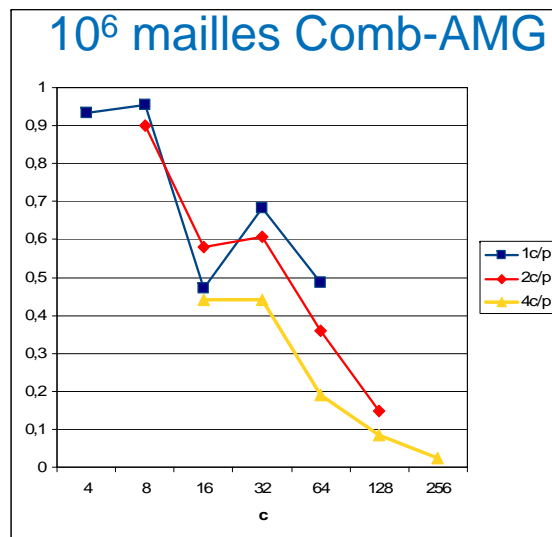
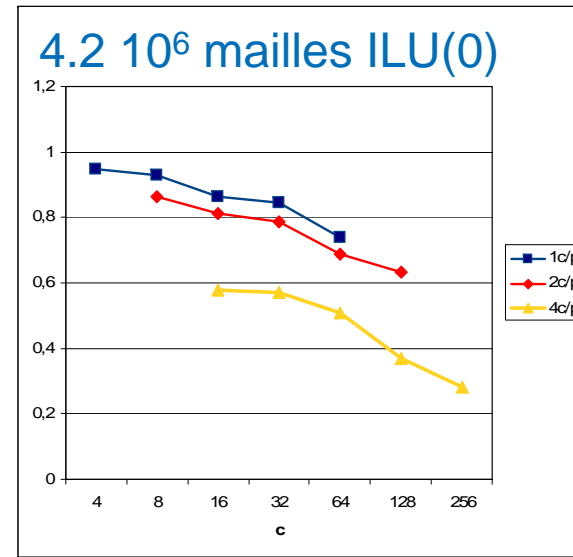
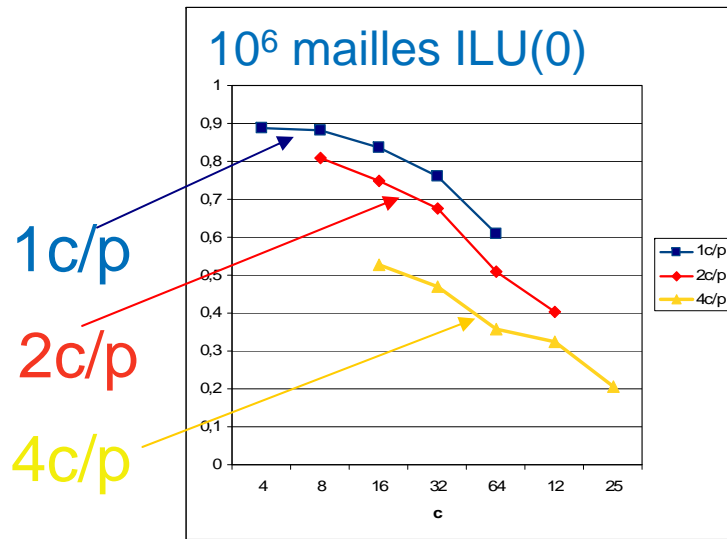


Limites de l'approche actuelle

- Difficulté à exploiter le nombre croissants de coeurs à taille de problème fixé
- Besoin actuel: diminuer le CPU à taille de pb fixé
 - Pour faire plus de simulations (calage, incertitudes)
 - Pour complexifier la physique
- Verrou principal: solveur linéaire
 - Limitation de la scalabilité des solveurs avec Comb-AMG:
 - ~ 50000 mailles par processeur
 - Objectifs: Réduire le nombre de maille / coeur en maintenant une bonne scalabilité
 - Nouveaux algorithmes mieux adaptés aux architectures de type multi-coeurs ou hybrides GPU-CPU

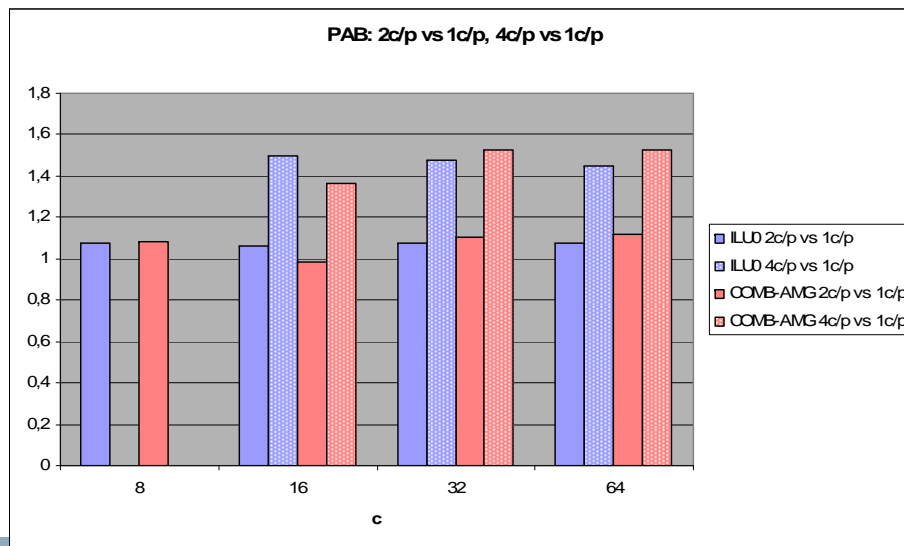
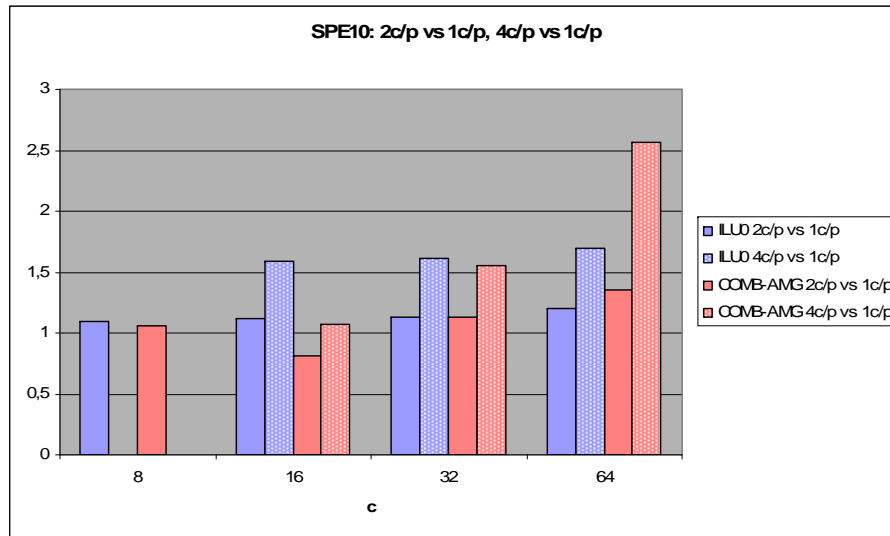
Efficacité en fonction du nombre de coeurs et du nombre de coeurs / processeur

Cluster 116 noeuds 4px4c opteron



Effet du nombre de coeurs par processeur

Comparaison 1c/p et 2c/p puis 2c/p et 4c/p



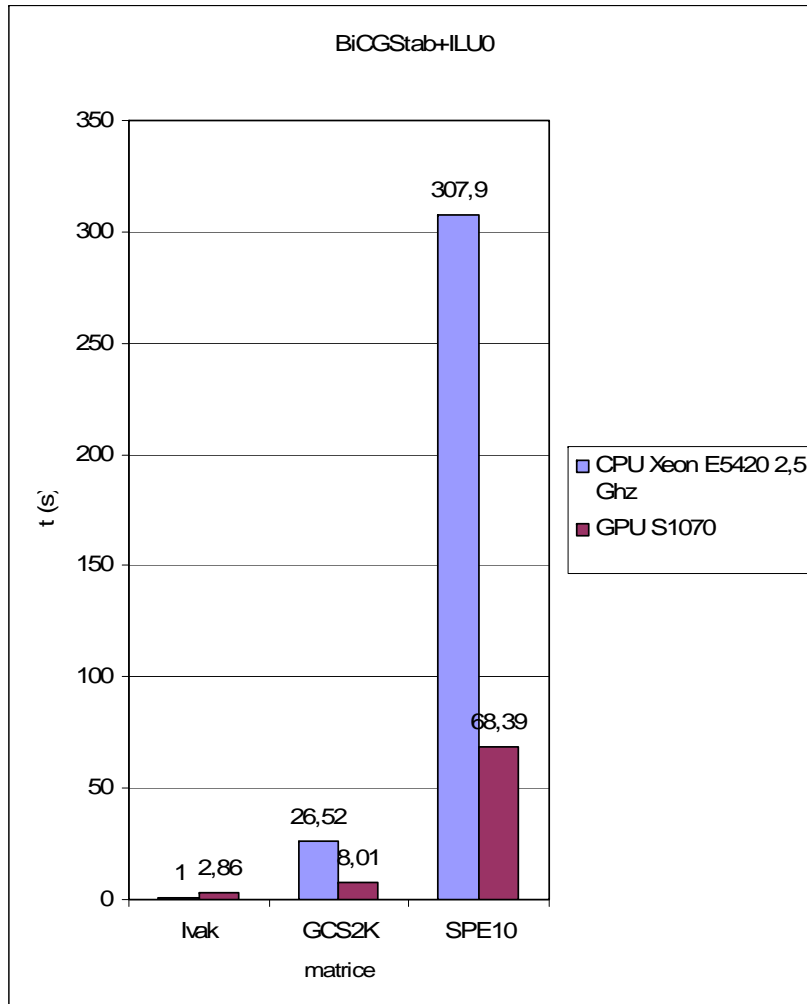
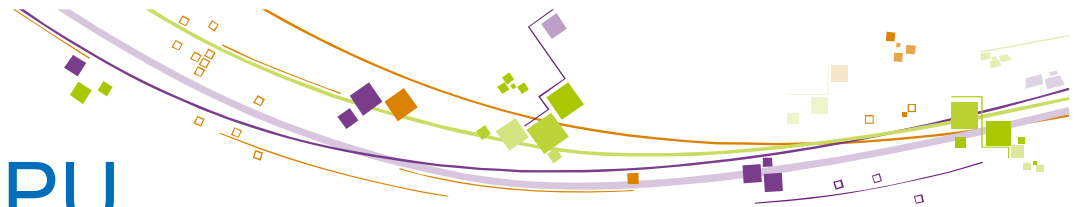
- Passage de 1 à 2 coeurs: facteur ~ 1.1
- Passage de 2 à 4 coeurs: facteur $\sim 1,4$



Perspectives

- Algorithmes mieux adaptés aux architectures
 - Multi-coeurs: préconditionneurs de type ILU
 - Projet ANR PETAL (INRIA, LABRI, LJLL, CEA, IFP)
 - CPU/GPU

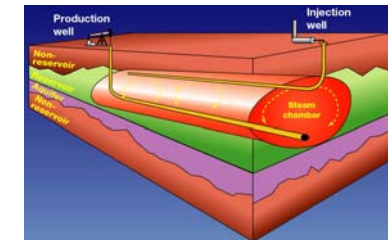
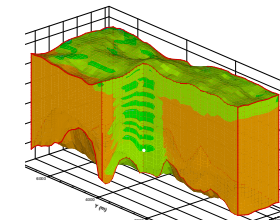
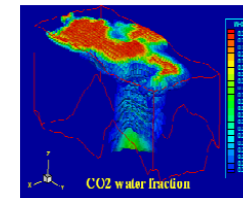
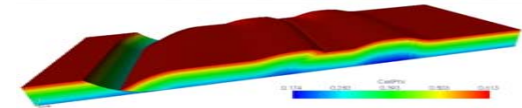
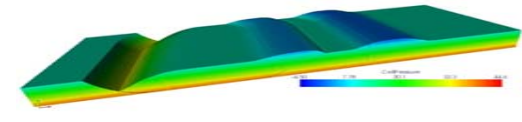
Solveur linéaire GPU

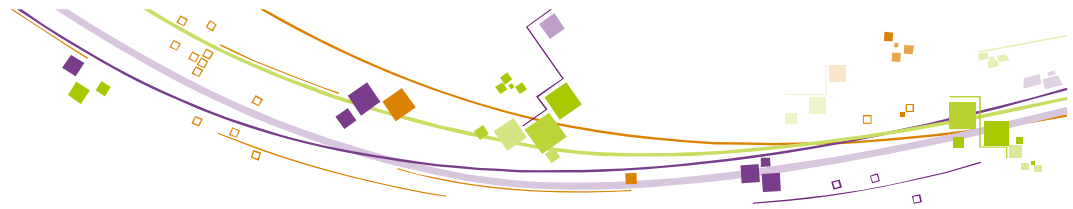


- Solveur BiCGStab + ILU(0) (non structuré)
- ILU(0) GPU
 - Coloriage de graphe: forte dégradation de la convergence
- Comparaison GPU/CPU: gain d'un facteur 4 sauf sur les petites matrices (coût du coloriage, permutation, transfert...)
- Pistes possibles d'amélioration
 - Remplissage (ILUT)

Plateforme logicielle: motivations

- Complexification des applications en terme de physique, de méthodes numériques et d'architecture informatique
- Exemples d'applications
 - Modélisation de bassin (géométrie 4D non structurée)
 - Couplage écoulement – transport réactif (CO2)
 - Suivi de front dans les procédés thermiques
- Plus de modularité et de partage de services
- Découplage des niveaux de complexité



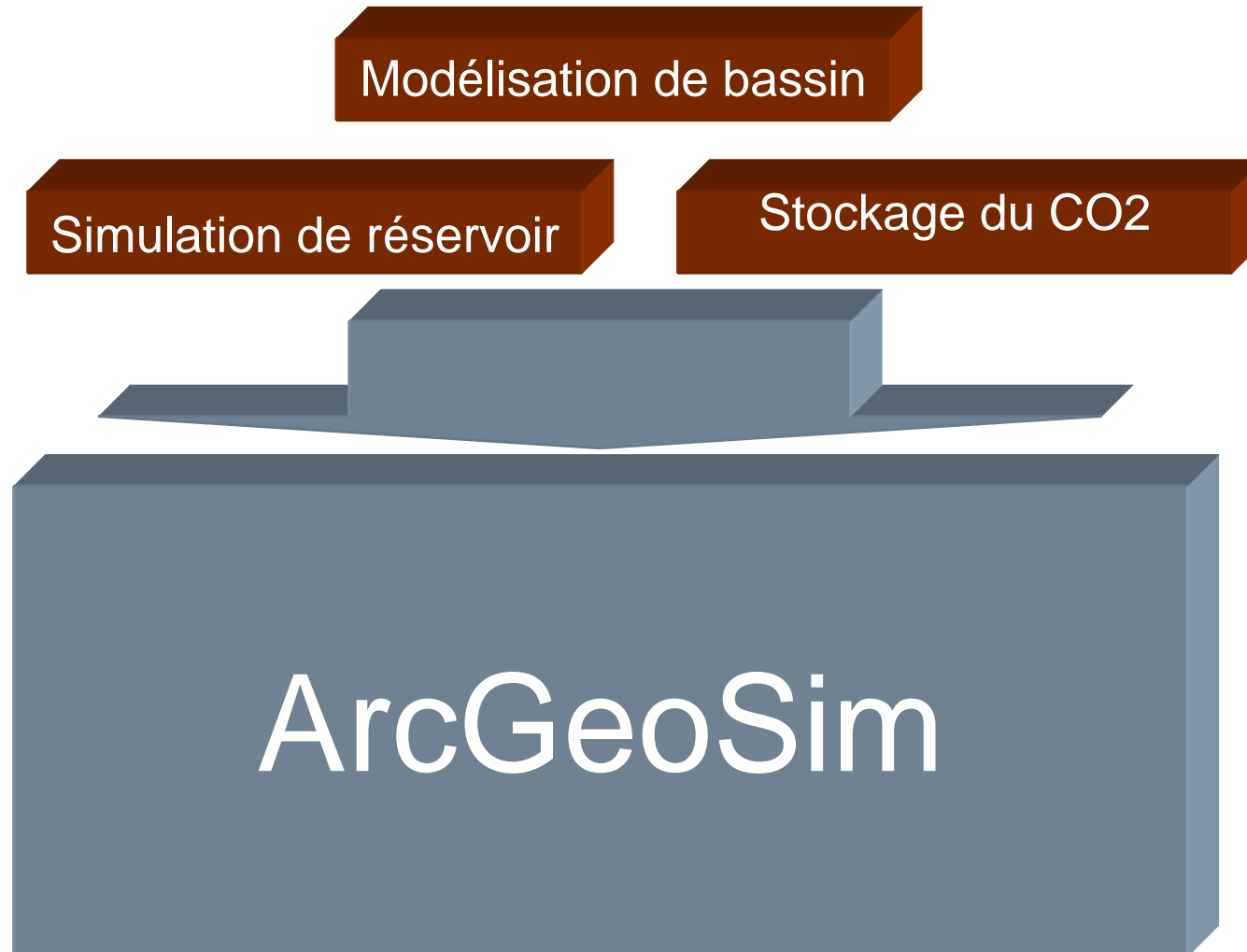


Plateforme Arcane

- Plateforme orientée objet pour le développement de codes de calculs parallèles sur maillages non structurés
 - Développé par le CEA-DAM depuis 2000
 - Collaboration CEA-IFP de co-développement depuis 2007
- Adaptée au HPC
- Objectif de modularité et de partage de services

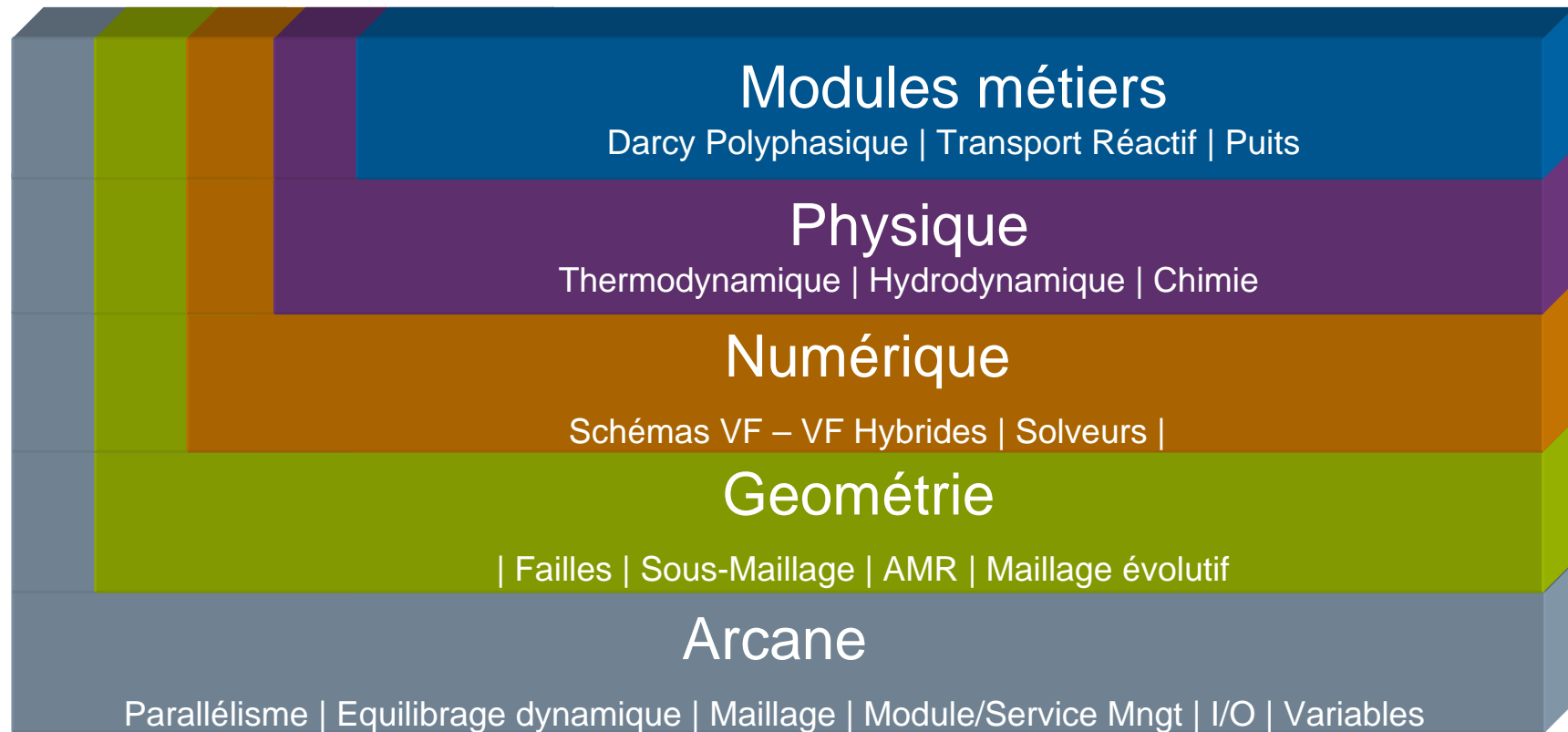


Plateforme ArcGeoSim



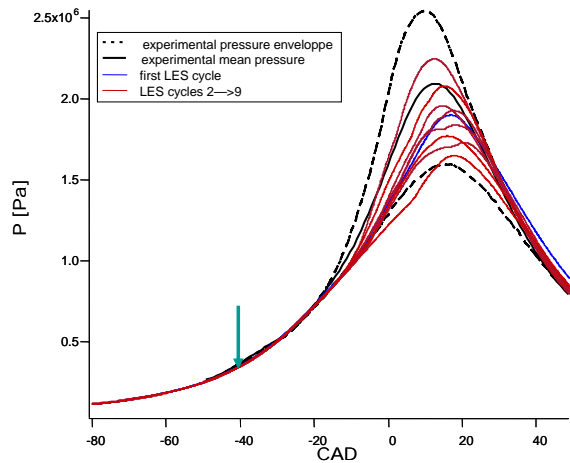


Arcane et ArcGeoSim

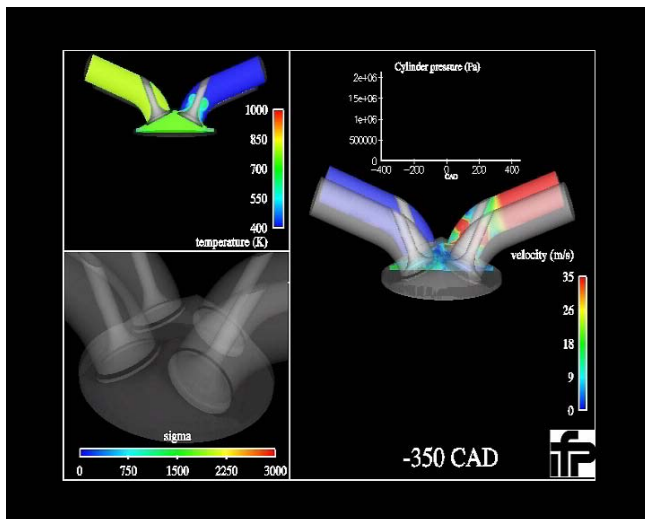
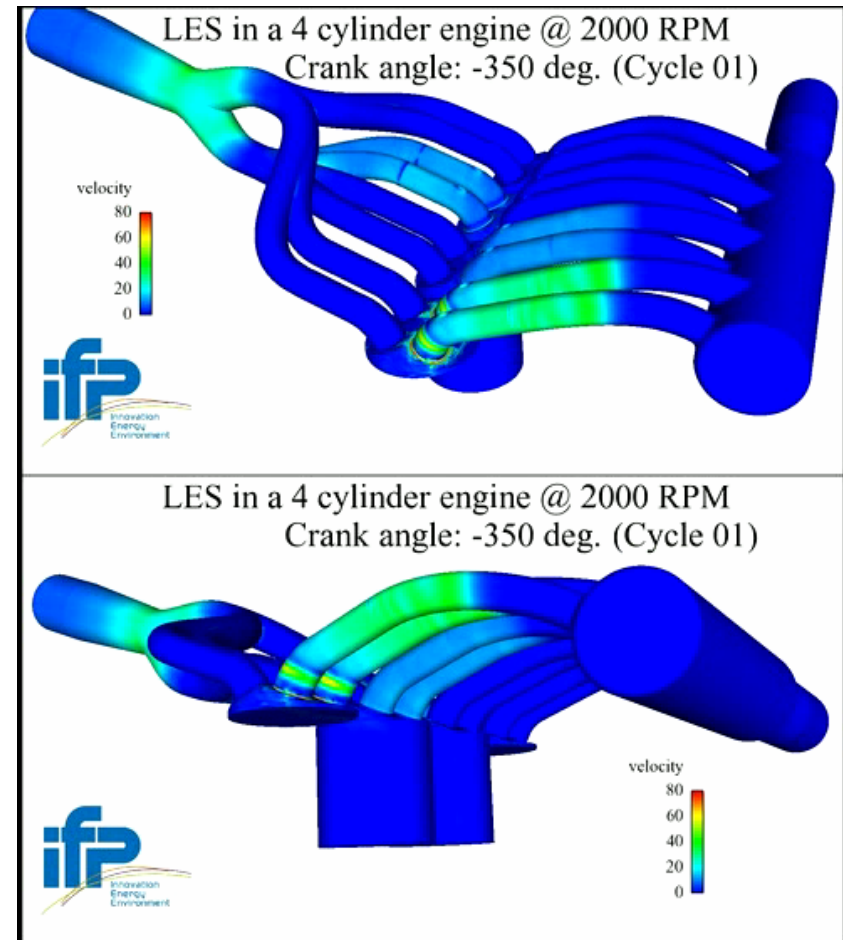


Large-Eddy Simulation (LES) appliquée aux moteurs avec le code AVBP: 2 premières mondiales

Étude LES de variabilités cycliques dans un monocylindre (LESSCO2, 2006)



LES multi-cycle d'un multicylindre (ANR Campas, 2009)





2,5j/cycle sur 256 procs SGI Xeon JADE (CINES)

5j/cycle sur 32 procs Xeon



R&D of piston engine LES @ IFP: A highly collaborative approach supported by

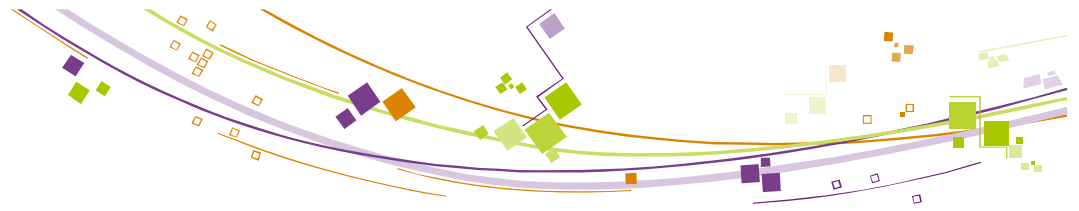
<i>Project</i>	<i>Funding</i>	<i>Partners: IFP +</i>	<i>Objectives</i>
LESSCO2	EC FP5 '02-'06	Renault, PSA, BMW, RWTH, IMFT, QUB, LTH	<ul style="list-style-type: none"> • numerical methods • premixed combustion modelling • mesh management 
SGEmac	ANR '07-'10	Renault, PSA, Cerfacs	<ul style="list-style-type: none"> • acquire a dedicated engine database • develop and validate methodologies for predicting cyclic variability
CamPaS	ANR '07-'10	Cerfacs, CINES, EM2c	<ul style="list-style-type: none"> • tools for pre- and post-processing on massively parallel machines • demonstrate LES of a multi-cylinder engine
SIGLE	ANR '08-'11	Renault, PSA, Coria, IMFT	<ul style="list-style-type: none"> • develop E/E and E/L models for liquid injection • validate on experimental data 
LESSCCV	EC FP7 '09-'12	LMS, PoliMi, AVL, FEV, Ricardo, LAT, CTU.	<ul style="list-style-type: none"> • 1D/3D coupling for BCs of aerodynamics and liquid injection • study CCV and capitalise in form of models for system simulation

Quelques enjeux pour le HPC



- **Caractéristiques des LES de moteurs à piston**
 - Maillages de taille inférieure à $20 \cdot 10^6$ mailles
 - Temps de simulation longs
 - Plusieurs secondes pour réaliser des simulations couvrant plusieurs dizaines de cycles

- **Implications**
 - La parallélisation massive seule ne peut pas répondre au besoin de temps de retour court (objectif: $\ll 1j$ de calcul par cycle)
 - Il faut des calculs plus rapides:
 - processeurs puissants (ex: SGI Xeon JADE du CINES)
 - exploiter les accélérateurs matériels (GPU)
 - méthodes numériques performantes, précises et stables



Conclusions

- Objectif dans ces deux applications = scalabilité à nombre de maille fixé
- Limitation actuelle liée au nombre critique de mailles par coeur
 - 5000 en explicite pour la LES dans AVBP
 - 50 000 en implicite pour AMG
- Recherches sur les algorithmes et leur adaptation aux nouvelles architectures
- Mieux maîtriser la complexité des applications à l'échelle industrielle
 - Méthodes numériques plus performantes