



Calcul haute performance pour l'évaluation de performance et de sûreté des stockages de déchet radioactif

C2S@Exa : Développement du code Traces

13 janvier 2015

Laurent LOTH
Direction Recherche et Développement
Service Evaluation et Analyse de Performance

1. La simulation numérique à l'Andra
 - a. Contexte et enjeux
 - b. Exemples
2. Le code Traces
 - a. Domaines s'application
 - b. Positionnement
3. Bilan des actions réalisées dans le cadre de C2S@Exa
 - a) Parallélisation du code
 - b) Méthodes numériques
4. Conclusion et perspectives

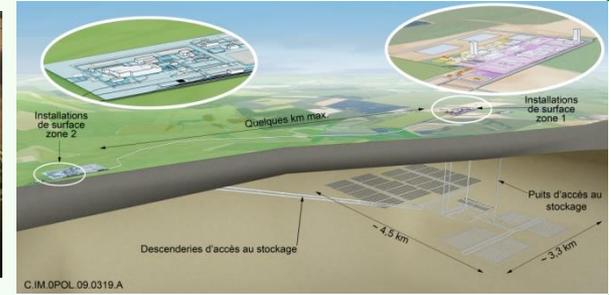


La simulation numérique à l'Andra

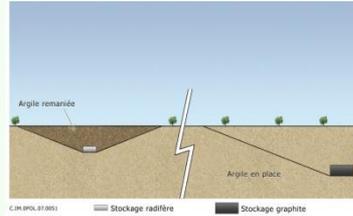
- a. Contexte et enjeux
- b. Exemples

- ◆◆ Un moyen indispensable pour évaluer le comportement aux échelles en espace et en temps des stockages de déchet radioactif
- ◆◆ Un outil d'intégration de la connaissance phénoménologique
- ◆◆ Un domaine d'application très large :
 - Simulations phénoménologiques
 - Représentation et évaluation du stockage et de son environnement, prise en compte et analyse des incertitudes, phénomènes couplés: thermique, hydraulique, chimie, mécanique
 - Aide à la conception des expérimentations
 - Evaluation de performance
 - Quantification du comportement des composants du stockage :
→ analyse fonctionnelle, aide à la conception du stockage
 - Contribuer à la définition des modèles physiques et numériques pour l'évaluation de sûreté
 - Evaluation de sûreté
 - Impact des stockages sur l'homme et son environnement

Projet Cigéo
 Déchet à Haute et Moyenne Activité
 et Vie Longue
 Stockage en couche géologique
 profonde



Projet FAVL
 Déchet à Faible Activité et Vie
 Longue
 Stockage en surface et à faible
 profondeur



Centre de stockage en surface
 Déchet à Faible et très Faible
 Activité
 CSTFA - centre Manche



La modélisation et simulation numérique : un moyen privilégié contribuant à

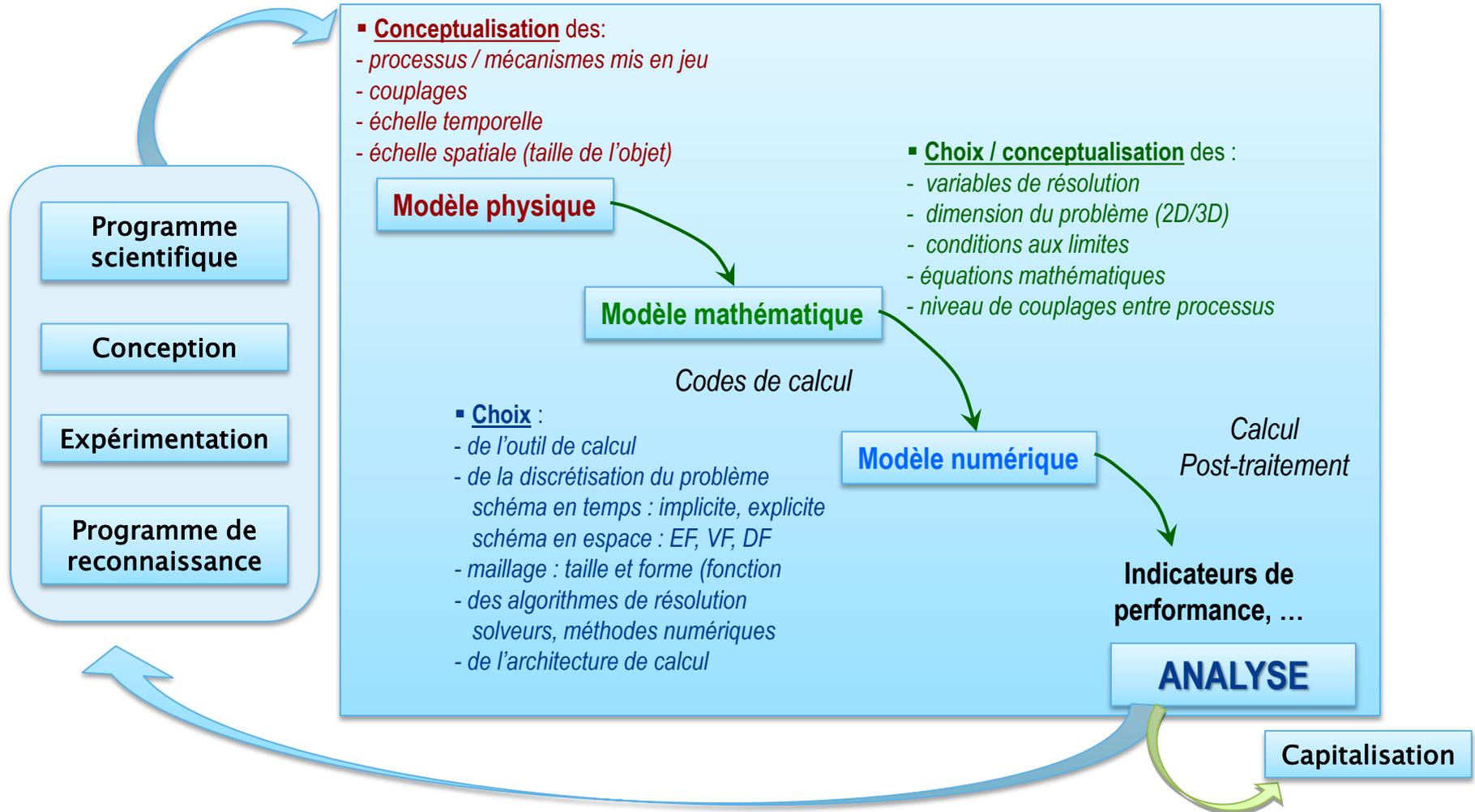
la représentation de
 l'évolution phénoménologique

La conception, l'interprétation
 des expérimentations

la conception des
 composants du stockage

l'évaluation de
 performance et de sûreté

◆ Lien étroit avec tous les programmes de l'agence



- ◆ Pour les outils de calcul, la stratégie consiste à sélectionner, enrichir et exploiter des outils disponibles :
 - Veille scientifique et technique sur les outils de simulation dans les domaines d'application de l'Andra
 - Développement et implémentation :
 - des fonctionnalités physiques et modèles de comportement
 - des méthodes numériques
 - des outils de calcul haute performance
 - Phases de qualification systématiques et continues
 - Pour chaque thématique, choix:
 - d'un code « référent »
 - de codes « vérificateur »
 - d'un code « académique » pour tester/intégrer les nouvelles méthodes numériques

Disposer d'une capacité de représentation multi-physique de l'évolution du stockage sur de grandes échelles d'espace et de temps



Besoins phénoménologiques

Socle de connaissances sur les composants, les processus physiques et chimiques

- données expérimentales, bibliographiques
- Modèles conceptuels

Besoins numériques

Outils et méthodes numériques performantes et robustes pour la simulation des processus



⇒ Gestion efficace

- Des couplages et leur évolutions
- De fortes non linéarités, des fronts de propagation
- De forts contrastes de paramètres
- De géométries contrastées et évolutives
- Des moyens de calcul (clusters, grille, hétérogénéité des matériels)

⇒ Assurer

- La convergence physiques et numériques de calculs
- La traçabilité des données et des sorties

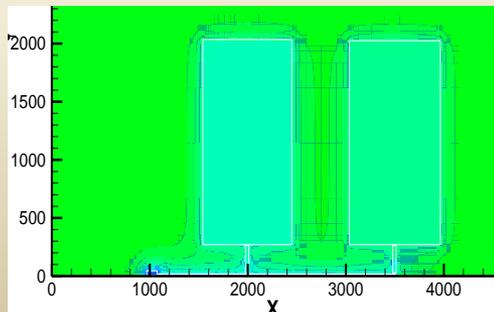
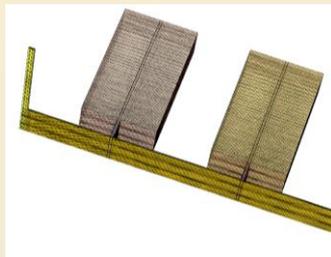
◆ Écoulement et transfert de solutés

2005 *Dossier 2005*

Représentation simplifiée des zones de stockage

Maillage : 600.000 mailles

Temps calcul : 5 jours

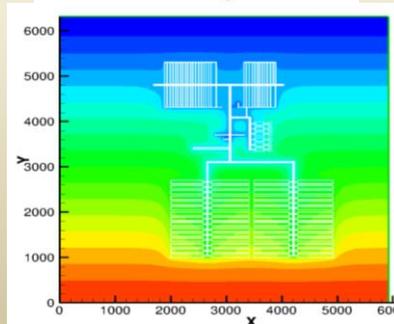
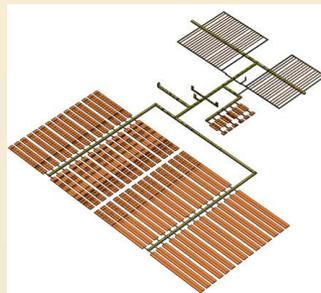


2009 *Choix d'une zone géologique*

Représentation simplifiée de tout le stockage

Maillage : 8.000.000 mailles

Temps calcul : 5 jours

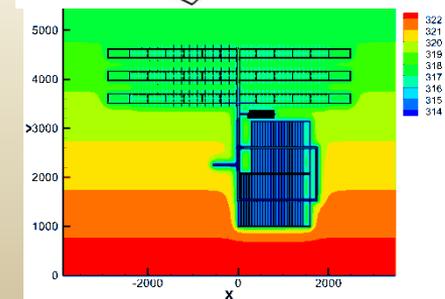
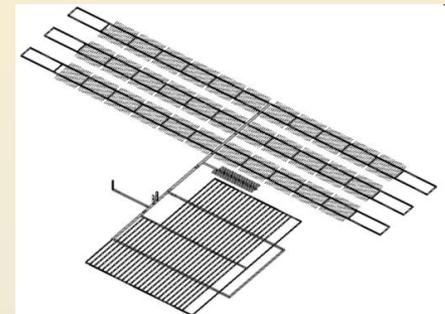


2012 *Comparaison d'architectures*

Représentation détaillée de tout le stockage (alvéoles, scellements, galeries)

Maillage : 12.000.000 mailles

Temps calcul : 3 jours



◆ Transitoire thermo-hydraulique gaz

2005 *Dossier 2005*

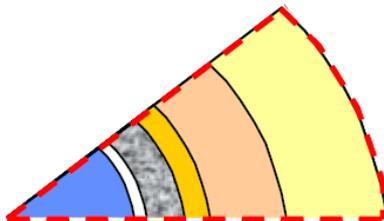
Représentation simplifiée et gestion de flux

Maillage 1D/2D : 10^2 à 10^3 mailles

Temps calcul : 5 jours

-  Zone de stockage
-  Vides résiduels
-  Béton
-  Zone fracturée
-  Zone micro fissurée
-  Cox sain

Alvéole MAVL 1D/2D



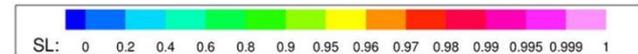
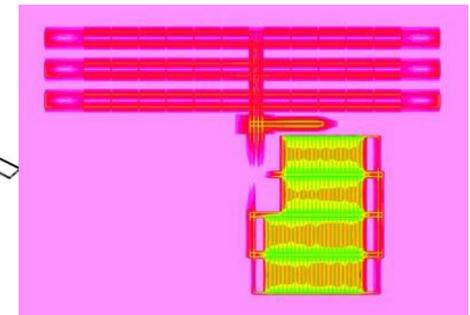
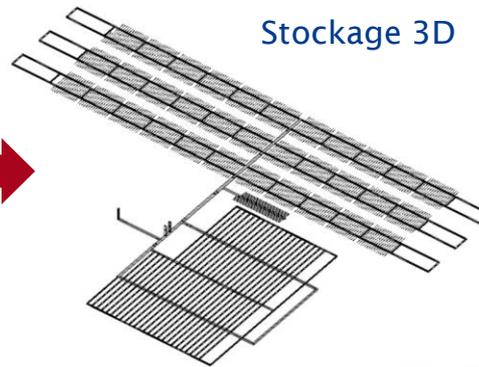
2012 *comparaison d'architectures*

Représentation détaillée du stockage

Maillage 3D : 300.000 mailles

Temps calcul : 15 jours

Stockage 3D



Cartographie de saturation en eau des ouvrages à 1000 ans



Le code Traces

- a. Domaines d'application
- b. Positionnement

- ◆ Traces : Transport RéActif de Contaminant dans les Eaux Souterraines
 - 2003, version 1.0, développée par l'IMFS à Strasbourg (équipe de Ph. Ackerer), milieu saturé en eau
 - Intégration dans la plateforme de simulation de l'Andra comme composant de calcul en hydraulique, transport et transport réactif
 - 2013, version 2.1, intégrant de nouvelles fonctionnalités :
 - Écoulement et transport insaturé monophasique
 - Schéma implicite, bibliothèque de solveurs itératifs
- ◆ Écoulement en milieu poreux
 - Loi de Darcy
 - En milieu insaturé, phase gaz passive (approximation de Richard)
- ◆ Transport de solutés
 - Diffusion, dispersion-convection
 - Sorption, précipitation/dissolution
 - Décroissance, filiation
- ◆ Exploité notamment comme code « vérificateur » pour les évaluations de sûreté

- ◆ Code « vérificateur » pour les évaluations de performance et de sûreté
- ◆ Code « référent » pour les calculs d'écoulement monophasique et transport de soluté en milieu insaturé
- ◆ Code « académique » :
 - Intégration et de validation de nouvelles méthodes numériques
 - Méthodes de discrétisation spatiales et temporelles
 - Calcul haute performance
 - Estimation d'erreur
 - Développement des capacités de modélisations
 - Ecoulements diphasiques pour l'évaluation des transitoires thermo-hydraulique gaz

Un outil «de référence», non commercial, pouvant intégrer « aisément » toutes les méthodes numériques pertinentes
Un outil puissant susceptible d'être exploité pour les problèmes de très grande taille au service des projets de l'Andra



Bilan des actions réalisées dans le cadre de C2S@Exa

- a. Parallélisation du code
- b. Méthodes numériques

- ◆ Objectif : parallélisation du code Traces et optimisation des ses performances sur plateformes de calcul parallèle multi-cœurs
Problème couplé, fortement non linéaire
 1. Parallélisation MIMD (grain grossier) s'appuyant sur une stratégie SPMD (Single Program Multiple Data)
 2. Exploitation du parallélisme SIMD (grain fin) sur les nœuds de calcul
- ◆ Etapes de réalisation
 - Parallélisation du code
 - Partitionnement du maillage
 - Chaque processeur ne voit que le sous domaine de calcul qui lui est propre et ses interfaces avec les sous domaines voisins
 - Exploitation de la bibliothèque de solveurs parallèles Hypre
 - Ecoulement permanent en milieu saturé : octobre 2013
 - Transport de soluté en milieu saturé en eau : décembre 2013
 - Intégration des solveurs de la bibliothèque Maphys : août 2014

◆ Résultats :

● octobre 2013 : écoulement en milieu saturé en eau

Nombre de mailles	!	1 095 276	!	2 506 140	!
Nombre de faces	!	3 328 877	!	7 591 723	!
-----!					
Temps calcul (secondes)	!	Total - Hypre	!	Total - Hypre	!
NSPCG CG/IC o séquentiel	!	7 385 -	!	-	!
HYPRE PCG/AMG o séquentiel	!	295 - 252	!	587 - 492	!
o 8 nœuds/1 cœurs	!	63 - 32	!	154 - 85	!
o 4 nœuds/2 cœurs	!	136 - 104	!	-	!
o 2 nœuds/4 cœurs	!	194 - 158	!	-	!

● septembre 2014 : écoulement en milieu saturé en eau

- Maillage 428.400 mailles, 1.305.230 faces, Hypre/Pcg/Amg
» *amélioration des performances*

Version	!	Séq.	!	2 Nds	!	4 Nds	!	4 Nds/2 Cœurs	!
-----!									
2013	!	89 s	!	79 s	!	53 s	!	65 s	!
2014	!	57 s	!	53 s	!	45 s	!	66 s	!

◆ Résultats (suite) :

● Septembre 2014 : transport Hypre

```

Nb de mailles ! 61920 : 178020 : 428.400 ! 61920 : 178020 : 428400 !
-----!-----:-----:-----!-----:-----:-----!
Slap/bcg/ilu ! 412 s : 1173 s : 10766 s !
-----!-----:-----:-----!-----:-----:-----!
          Solveur !      Hypre/bicgstab/amg      !      Hypre/gmres/amg      !
séquentiel      ! 397 s : 839 s : 2053 s ! 638 s : 1504 s :
2 nœuds         ! 273 s : 790 s : 2166 s ! 324 s : 942 s : 5006 s !
4 nœuds         ! 163 s : 448 s : 1242 s ! 190 s : 500 s : 1302 s !
    
```

● Ecoulement en milieu saturé en eau, bibliothèque Maphys

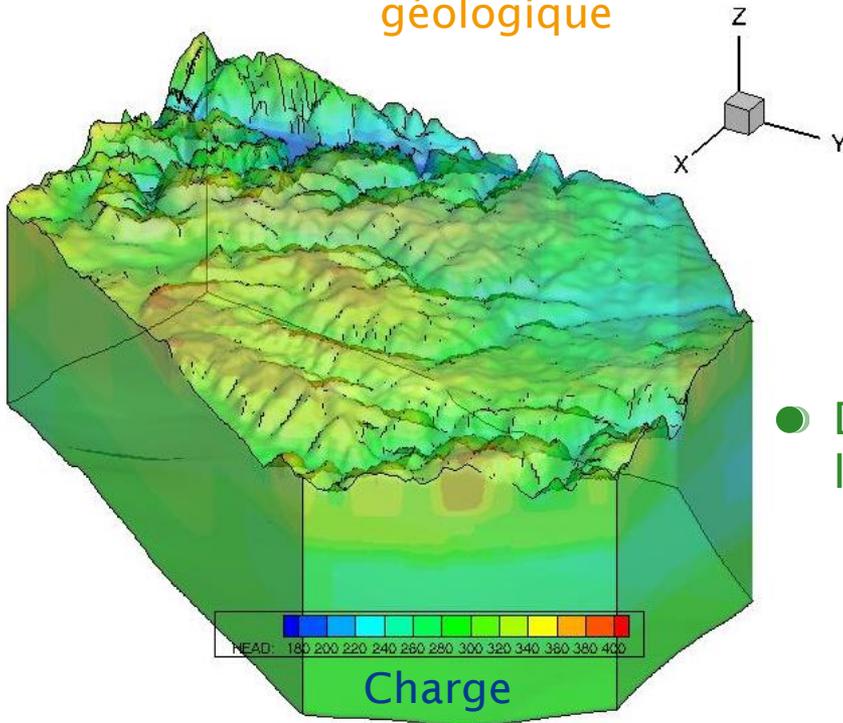
■ Temps en secondes, maillage 428.400 mailles, 1.305.230 faces

```

Nb de processeurs ! 8   ! 16   ! 32   ! 64   ! 128  ! 256  !
-----!-----!-----!-----!-----!-----!
HYPRE PCG/AMG     ! 37 s ! 18 s ! 9.2 s ! 5.0 s ! 6.7 s ! 9.0 s !
Maphys LU creux  !      !      !      ! 39.3 s ! 17 s ! 9.1 s !
    
```

◆ Résultats (suite) :

- Novembre 2014 : première mise en exploitation à l'Andra
 - Version 2.2.0.0 du code Traces intégrant l'ensemble des travaux réalisés par l'INRIA pour la bibliothèque Hype
 - Accessibilité de cette version dans la plateforme Cassandra
 - Exploitation pour le calcul des écoulements dans le milieu géologique



- » *Domaine de calcul : 1000 km² sur 700 m*
- » *Maillage : 5944891 mailles, 17626096 faces*
- » *Temps calcul : 28 minutes sur 2 processeurs*

- Début des travaux pour intégration dans la plateforme Num3sis

◆ Objectifs

- Définir un élément fini mixte traitant les mailles non régulières et/ou à faces non plane (élément composite)
- Intégrer cet élément finis dans le code Traces
- Définir et intégrer un évaluation a posteriori de l'erreur de discrétisation
- Exploiter le calcul haute performance

◆ Principaux Résultats

- Amélioration de la qualité des résultats sur les mailles déformées
- Méthode transparente pour l'utilisateur, il ne « voit » conserve qu'une pression par maille et qu'un flux par face
- Traitement des types de maille « incompatibles avec les éléments finis mixtes hybrides « standards » comme les pyramides

◆ Principaux Résultats (suite)

● Estimation de l'erreur

Nombre de mailles	!	9 900	:	61 920	:	178 020	!	

Maximum	!	18.37	:	11.09	:	6.52	!	
soit	!	22.42 %	:	15.76 %	:	10.69 %	!	de l'erreur en norme L2
	!	1.36 %	:	0.43 %	:	0.17 %	!	de la somme des erreurs
Minimum	!	1.5e-4	:	4.4e-5	:	1.0e-5	!	
Moyenne	!	0.136	:	0.0417	:	0.0212	!	
Pourcent du max	!	1.359	:	0.429	:	0.252	!	

Pour représenter 90 % de la somme des erreurs								
Nombre de mailles	!	679	:	5476	:	2676	!	
% d'éléments	!	6.86 %	:	8.84 %	:	1.50 %	!	des éléments

Pour représenter 80 % de la somme des erreurs								
Nombre d'éléments	!	365	:	2126	:	1886	!	
soit	!	3.69 %	:	3.43 %	:	1.05%	!	% des éléments

- Quand croit le nombre d'éléments, l'erreur diminue et la répartition des erreurs « s'uniformise »



Conclusion et perspectives

◆ Conclusion

- Première version d'un code de calcul haute performance qui permet d'élargir la palette des outils capables de répondre aux besoins de simulation pour les évaluation de performance et de sûreté
- Une avancée importante dans le développement d'un d'outil de calcul de référence:
 - susceptible d'être exploité pour les problèmes de très grande taille au service de tous les projets de l'agence
 - pouvant intégrer les méthodes numériques pertinentes
 - non commercial
- Maîtrise de l'outil en interne par l'Andra

◆ Perspectives

● Pour le code :

- Exploitation des solveurs développés dans C2S@Exa
- Intégration de l'élément fini composite et mise en œuvre d'un critère de sélection des mailles où il est utilisée leur exploitation
- Décomposition de domaine en espace et en temps et estimation d'erreur a posteriori

» *Thèse en cours au sein du projet POMDAPI*

● Pour les applications :

- 50 millions de mailles et plus
- Validation du calcul haute performance aux écoulements transitoires (milieu saturé ou non) et au couplage avec le transport
- Extension au diphasique

» *Projet ANR DEDALES*

Modification de la date et de la référence en pied de page de toutes les diapositives

◆ Onglet [Insertion] | En-tête et pied de page

- dans le champ "Fixe", remplacez "jj mmmm aaaa" par la date
- dans le champ "Pied de page", modifiez la référence
 - cliquez sur le bouton [Appliquer partout]