

Quelle adéquation possible entre la puissance des supercalculateurs Tier0 et une formulation éléments finis implicite adaptative?

H. Digonnet, L. Silva et T. Coupez

École Centrale de Nantes (ECN)

Institut du Calcul Intensif (ICI)

Email : hugues.digonnet@ec-nantes.fr

Calculateurs Tier0 (top continental supercomputer)

Curie :

- 80 640 cœurs Intel Xeon 2.7 GHz pour 322To de mémoire RAM
- construit en 2012
- puissance de **1,359 PFlops** soit $1,359 \cdot 10^{15}$ Flops!

JuQUEEN :

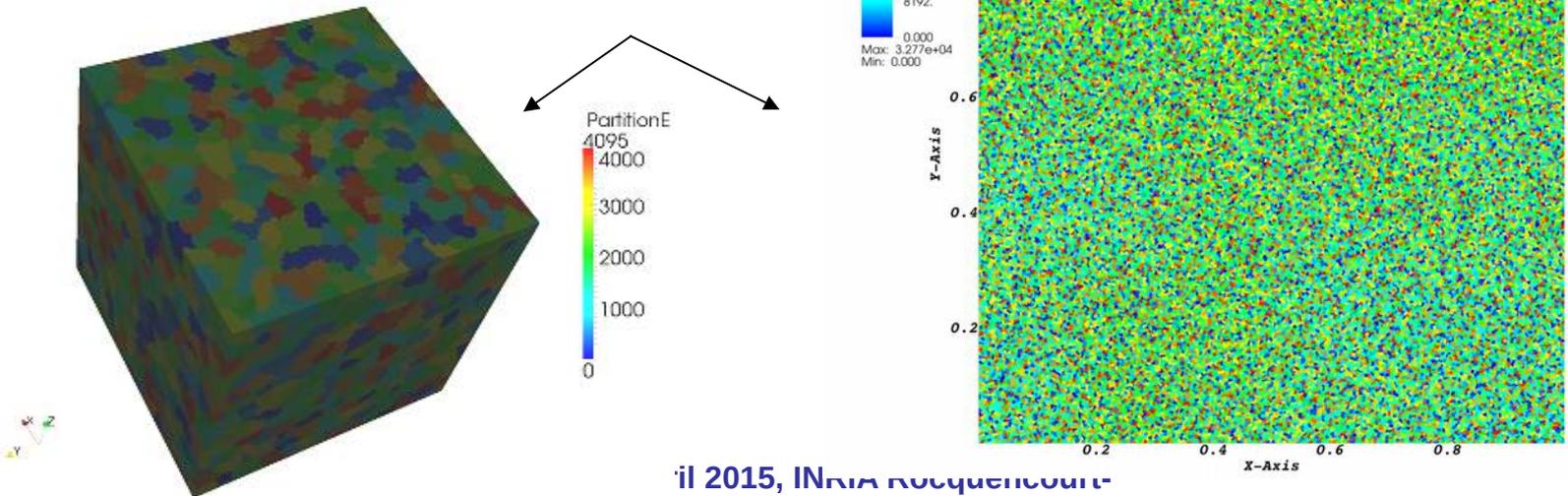
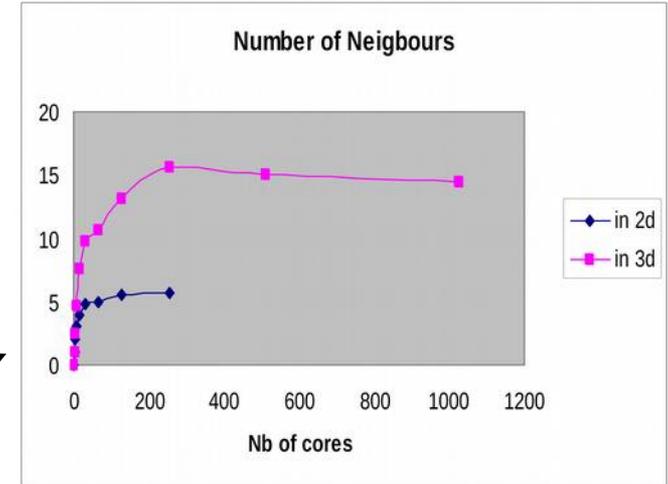
- 458 752 cœurs PowerPC 1.6 Ghz pour 448To de mémoire RAM
- construit en 2012
- puissance de **5,0 PFlops** soit $5,0 \cdot 10^{15}$ Flops!

A titre de comparaison : un cœur standard : **40 GFlops**, et le supercalculateur le plus puissant : **33,8 PFlops**.



Qu'est que le massivement parallèle ?

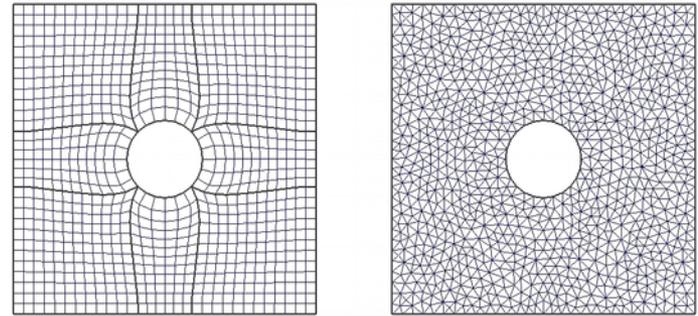
- Hardware : avec un grand nombre de cœurs
 Curie : 80 640 cœurs 2.7 GHz avec 4GB/cœur
 JuQUEEN : 458 752 cœurs 1.6 GHz avec 1GB/cœur
- Software 1 : quand le nombre de voisins d'un domaine ne varie plus.
- Software 2 : quand le nombre de cœurs est du même ordre de grandeur que le nombre de données locale à a un cœur



FEM implicite adaptative ?

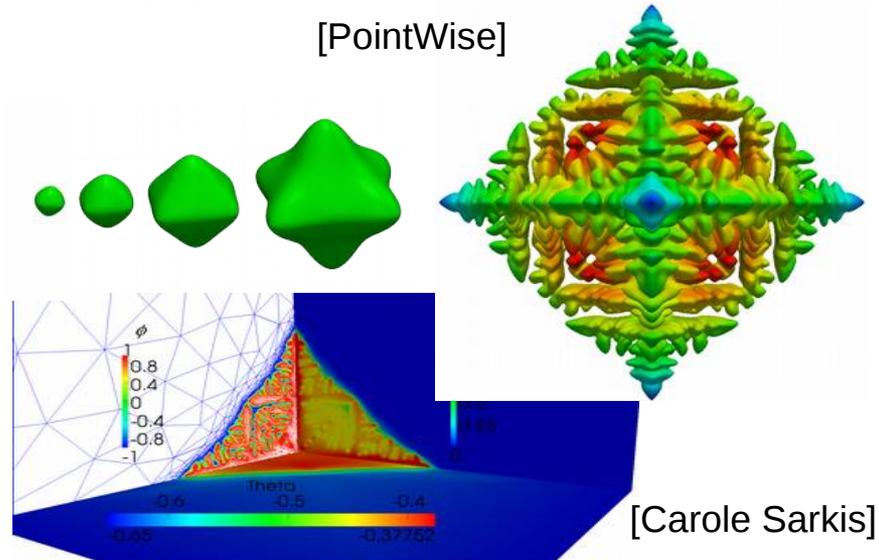
- Schéma implicite : résolution d'un système linéaire ou linéarisé
 - bien adapté aux formulations stationnaires
 - permet de conserver un pas de temps assez grand (instationnaire)

- Maillage non structuré :
 - adapté aux formes complexes
 - automatique
 - souvent plus léger



[PointWise]

- Maillage adaptatif :
 - utilise un estimateur d'erreur
 - maillage minimal
 - évolue durant le calcul



[Carole Sarkis]

Des données réelles massives

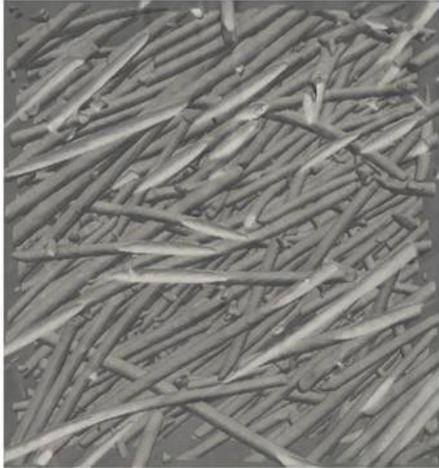
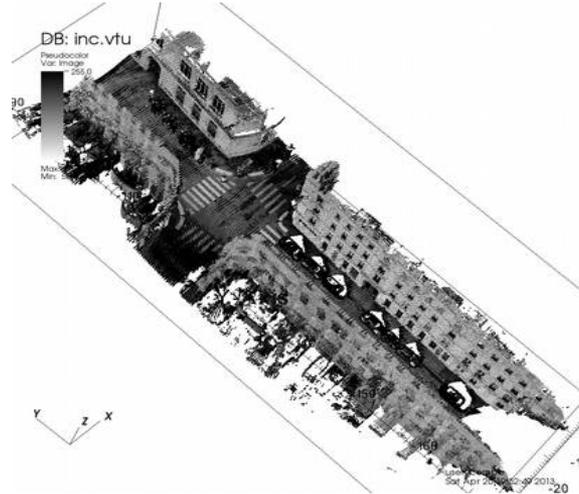


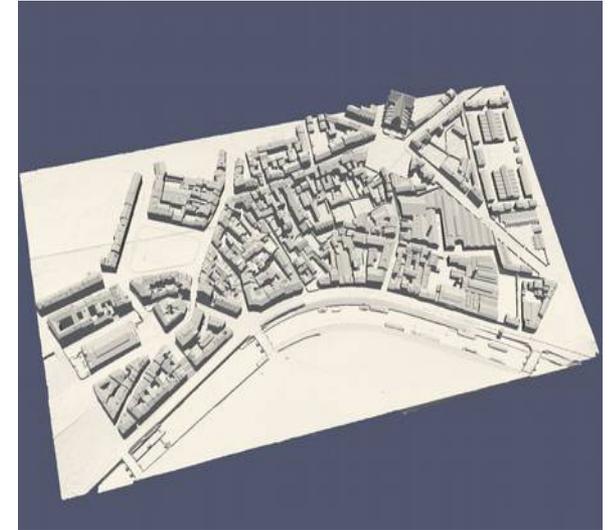
Image tomographique
3d à plusieurs millions
de voxels

[Solvay]



Nuage de points 3d
avec plusieurs millions
de points

[EMP-CAOR]



Triangulation surfacique
avec plusieurs millions de
triangles

[ECN-CERMA]

Plan :

- Le contexte

- Adaptation de maillage en parallèle

- Implémentation parallèle d'une méthode multigrille

- Performances obtenues sur des supercalculateurs Tier0

- Exemples de simulations réalisées.

Remaillage : le contexte et la stratégie de parallélisation

Le moteur de remaillage :

- un mailleur séquentiel qui reste en cours de développement
- mailleur tétraédrique non structuré et non hiérarchique
- taille de maille isotrope ou anisotrope

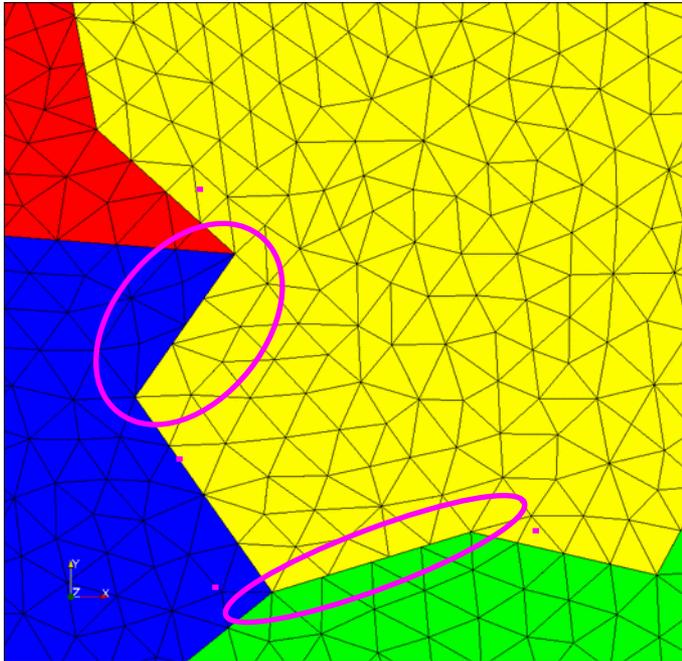
Parallélisation :

- une parallélisation directe est très intrusive
- nous avons un repartitionneur parallèle
- le repartitionneur et le remailleur utilisent tout les deux une stratégie d'amélioration itérative

Stratégie : Pas de parallélisation directe du mailleur mais utilisation de ce dernier dans un contexte parallèle.

Remaillage : ajout d'une contrainte aux interfaces

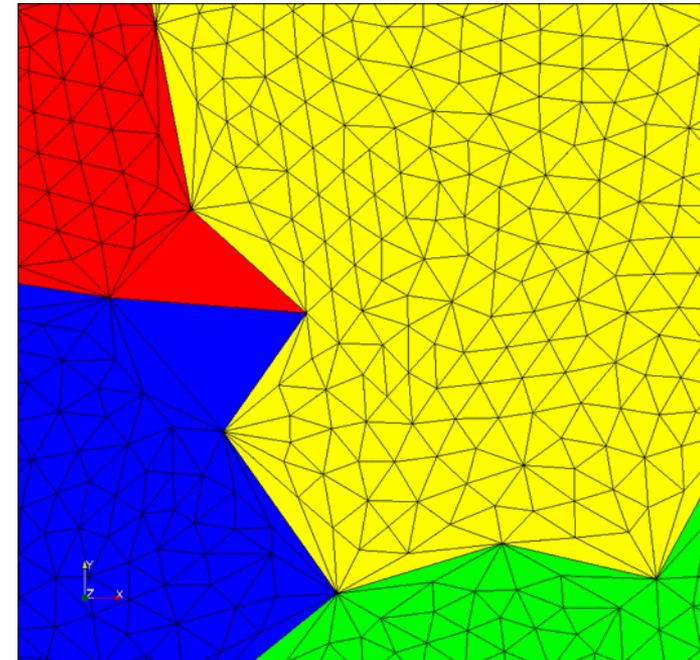
1) Remaillage indépendant des sous domaines



Sans contrainte : nous n'obtenons pas un maillage globale conforme !

2) Repartitionnement et itérer

Avec la contrainte de bloquer les interfaces : nous obtenons un maillage globale conforme mais de bonne qualité.



Partition initiale du
domaine sur 7 processeurs

Illustration dans un cas 2d :

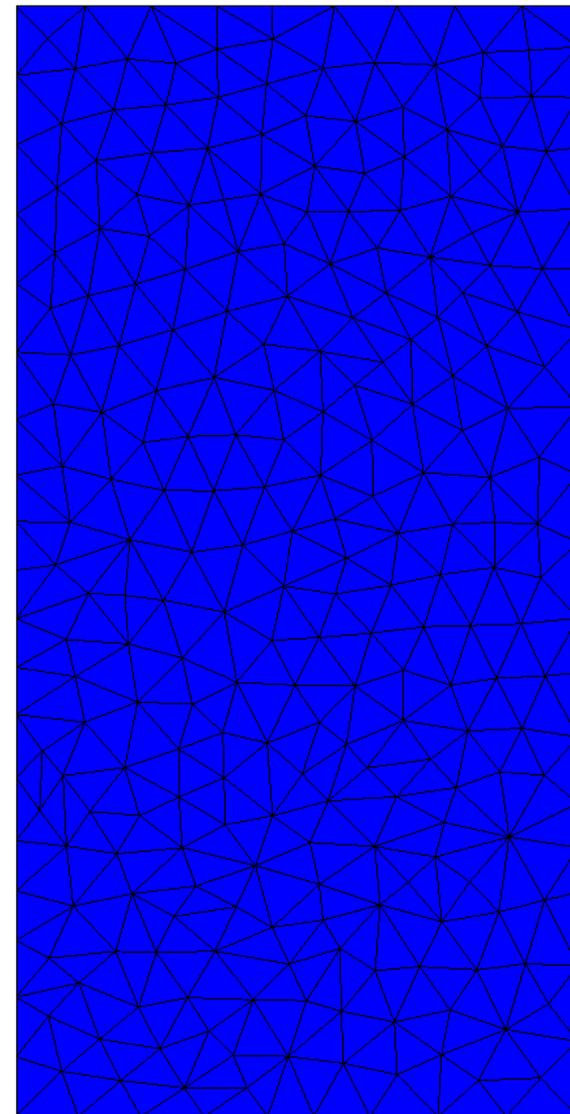
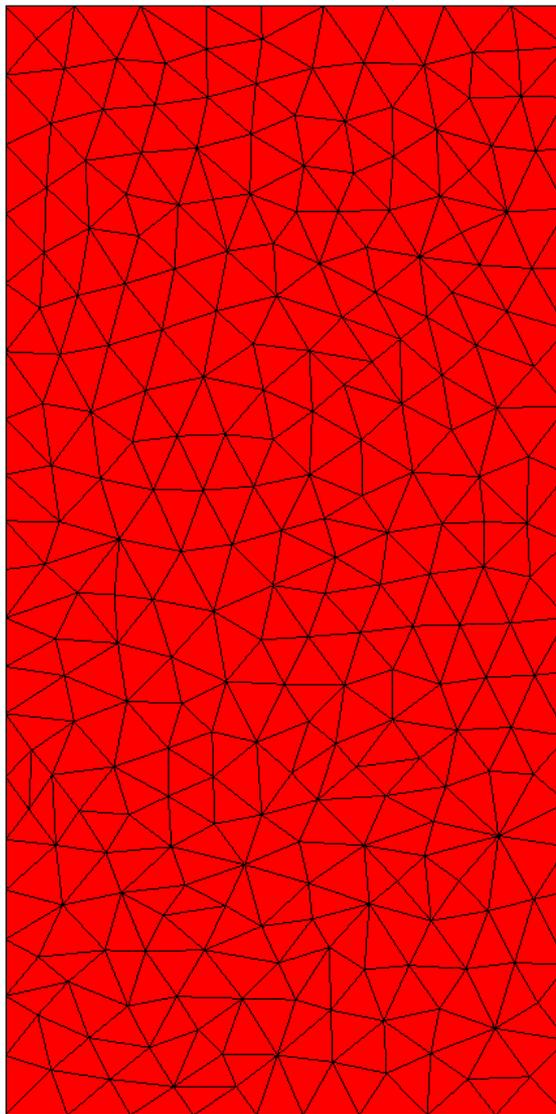
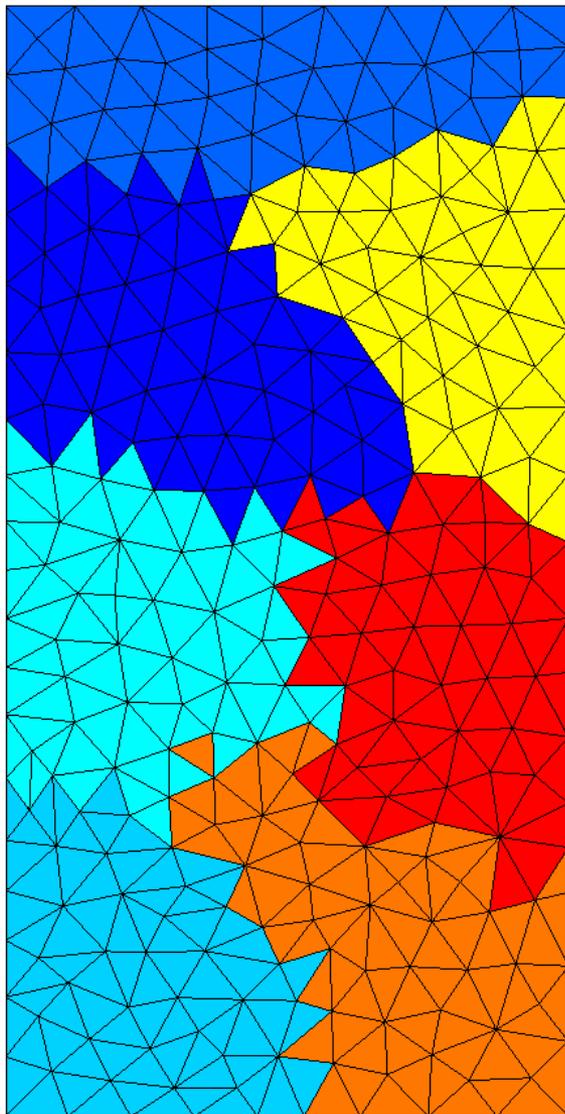


Illustration dans un cas 2d :

1er remaillage avec
interfaces bloquées

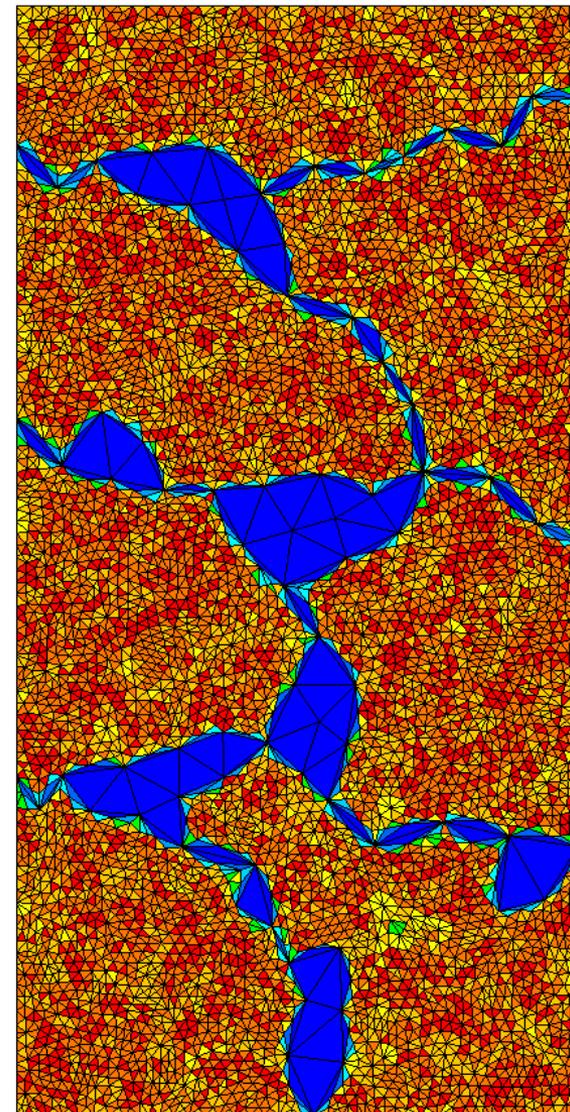
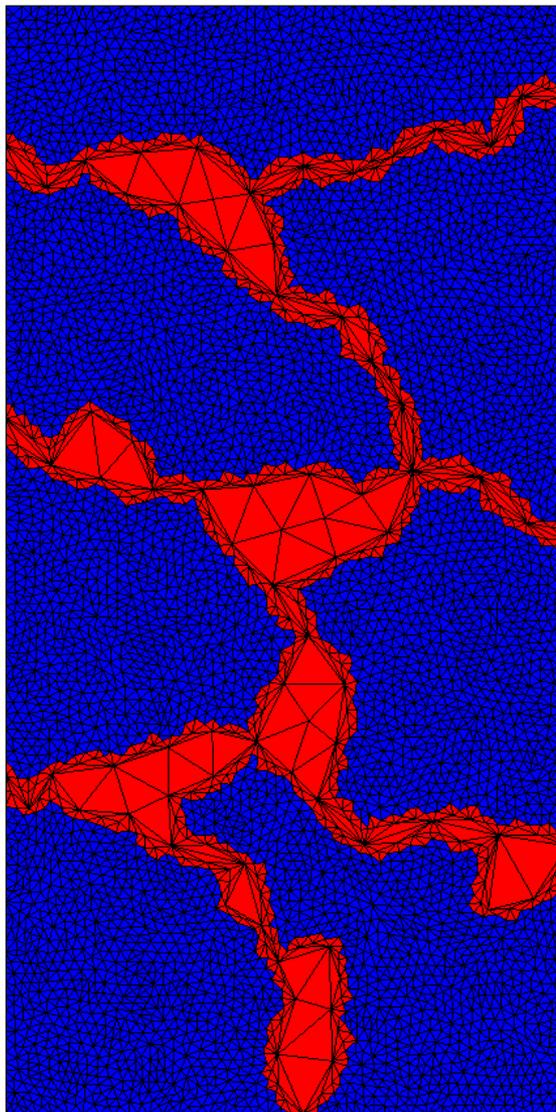
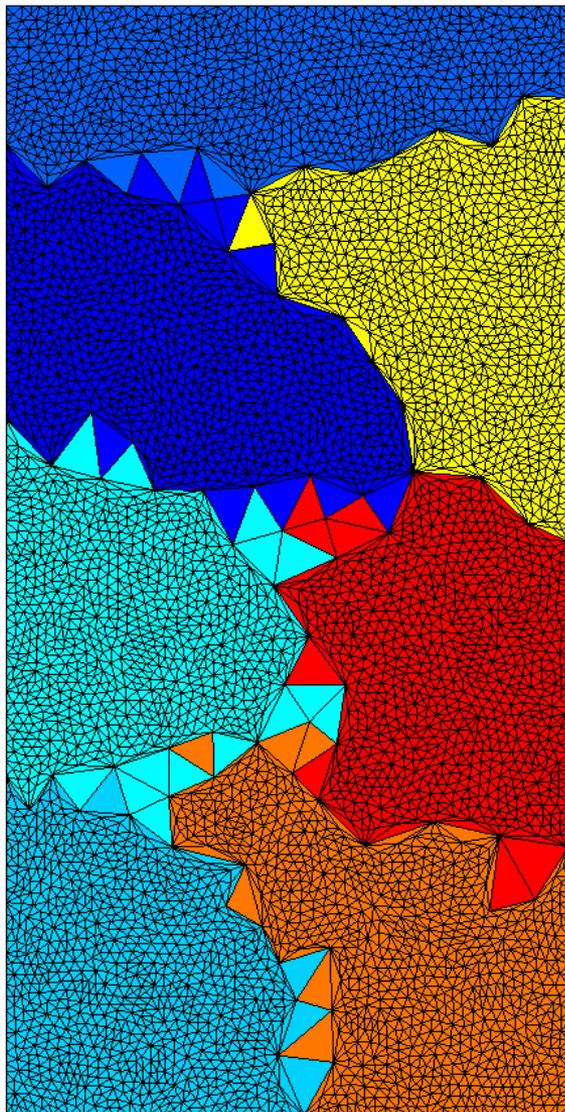


Illustration dans un cas 2d :

1er repartitionnement
pour déplacer les
interfaces à l'intérieur

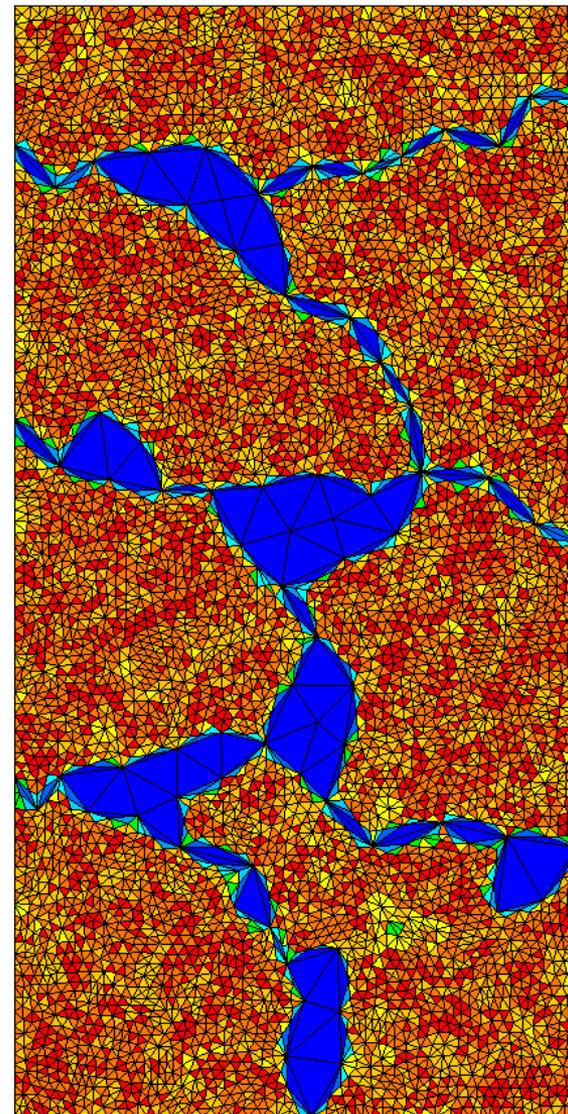
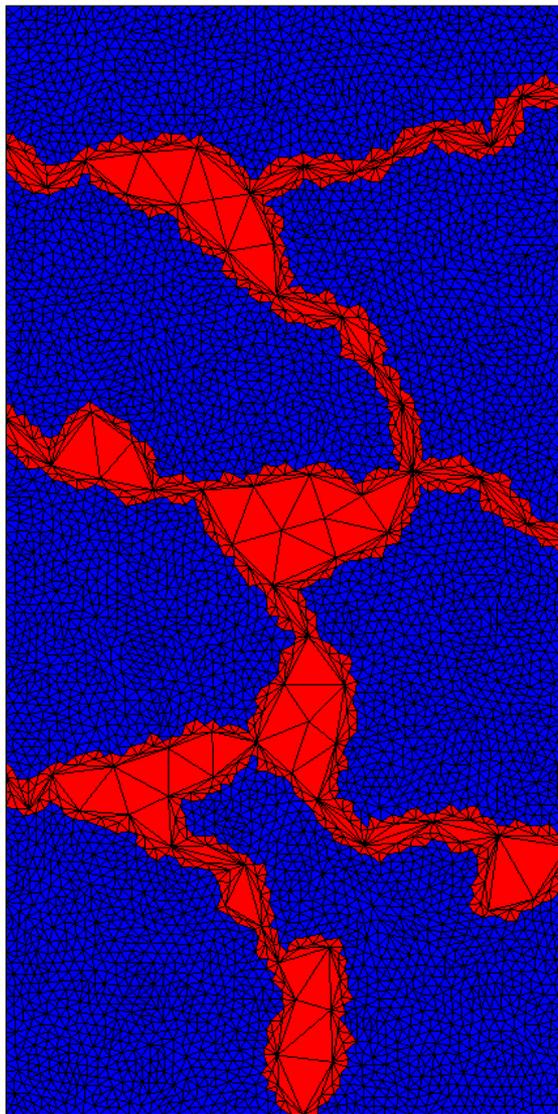
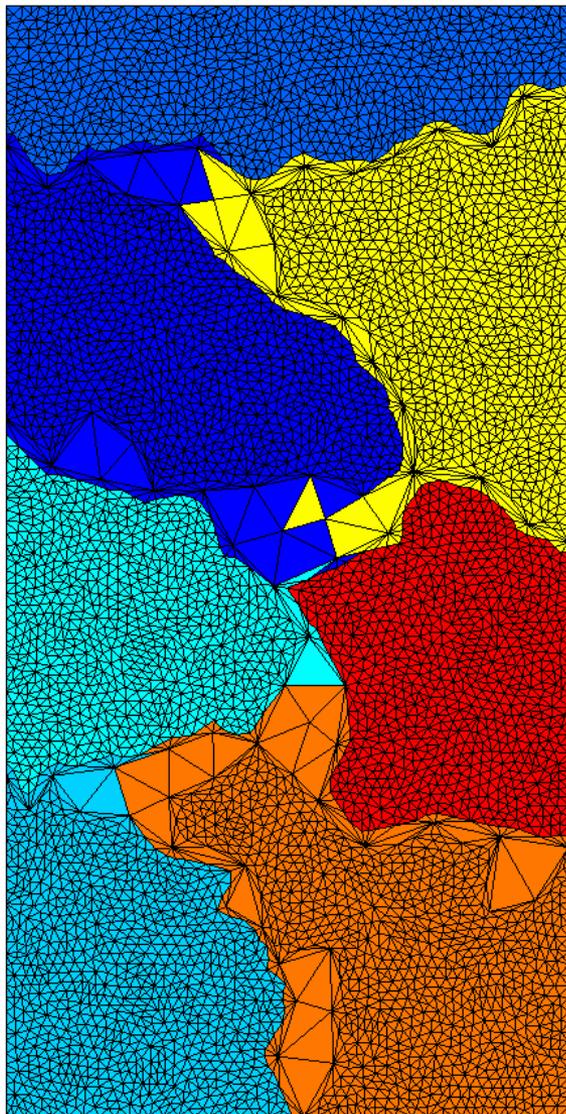


Illustration dans un cas 2d :

2ème remaillage

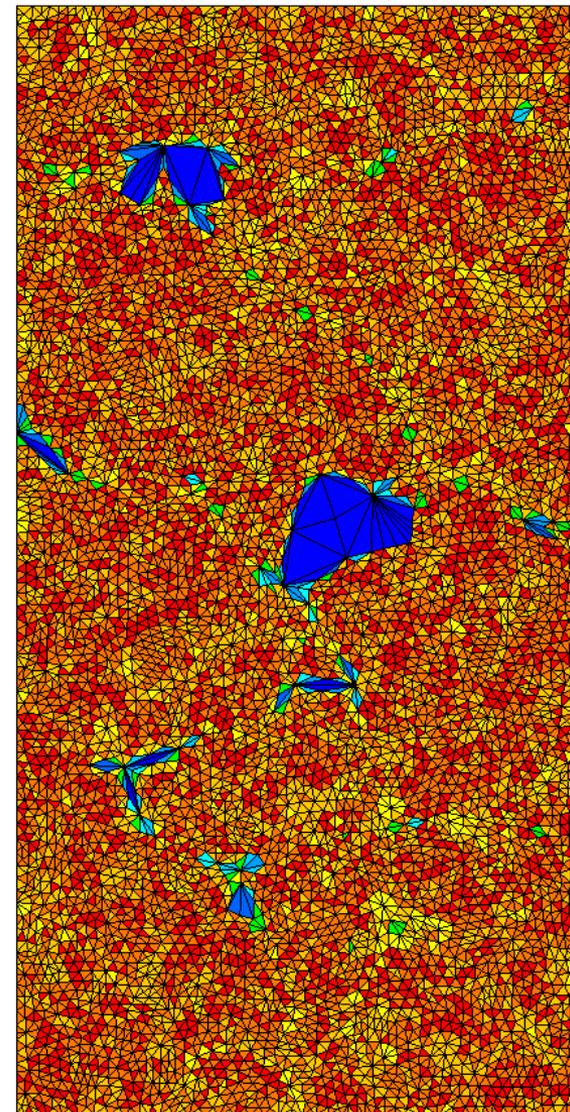
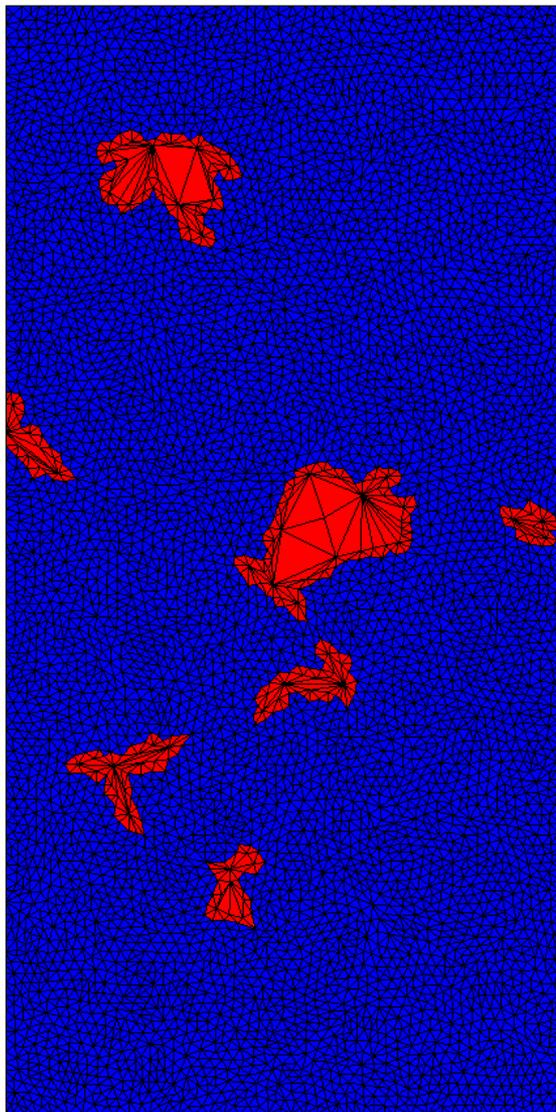
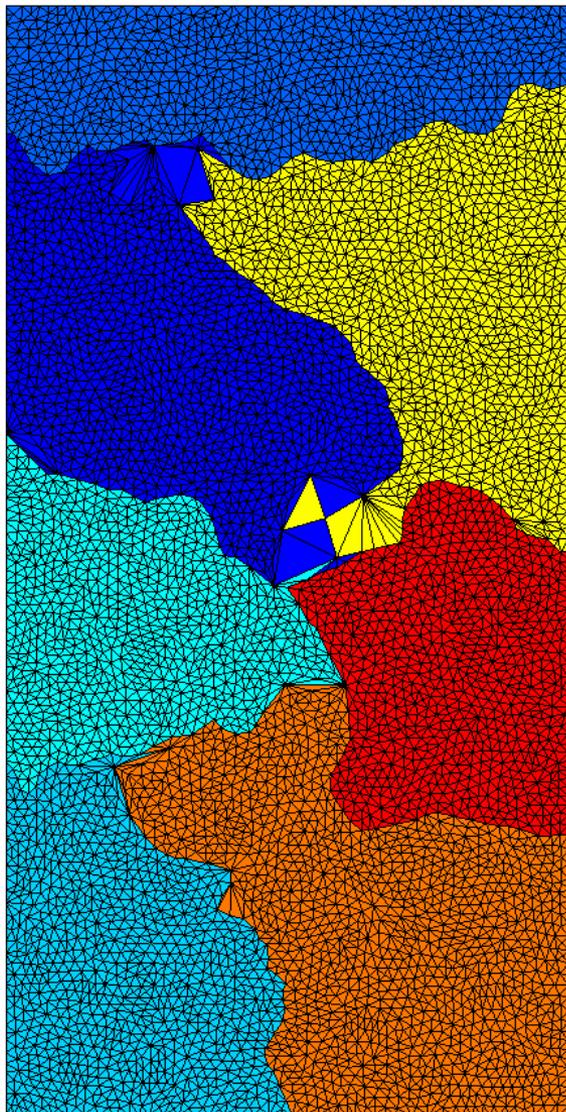


Illustration dans un cas 2d :

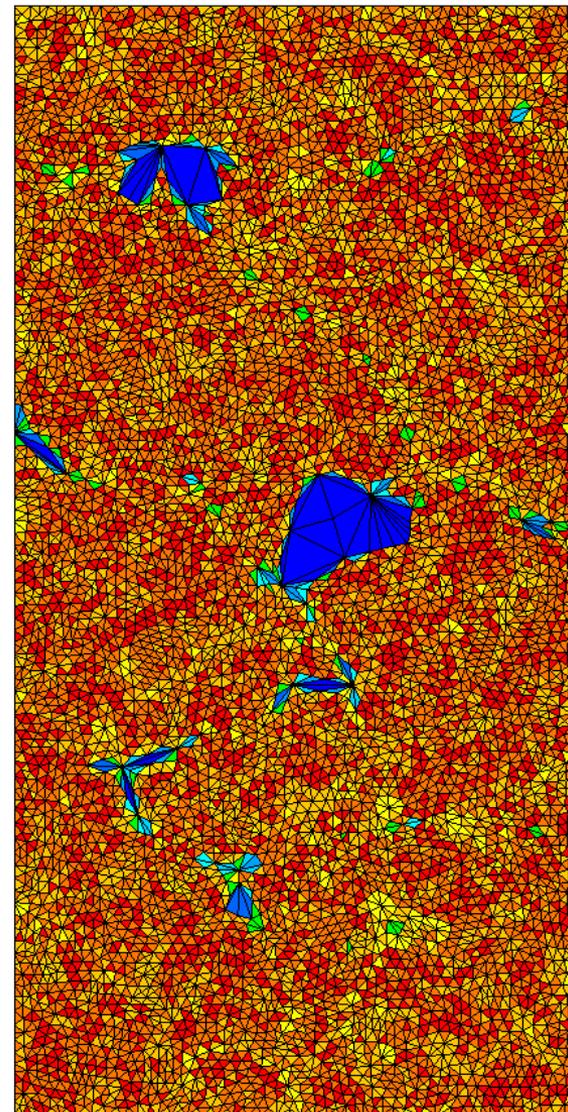
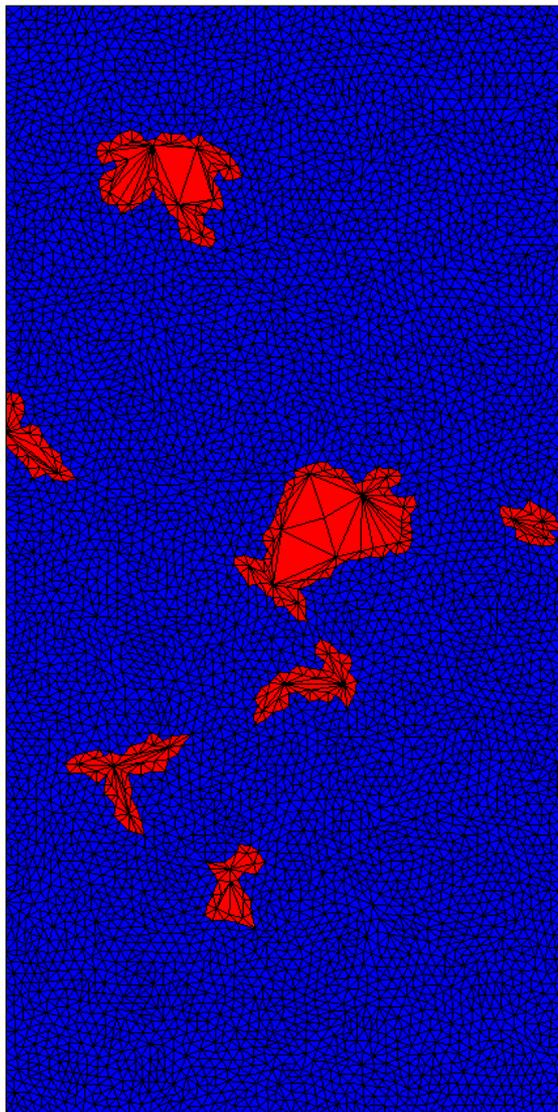
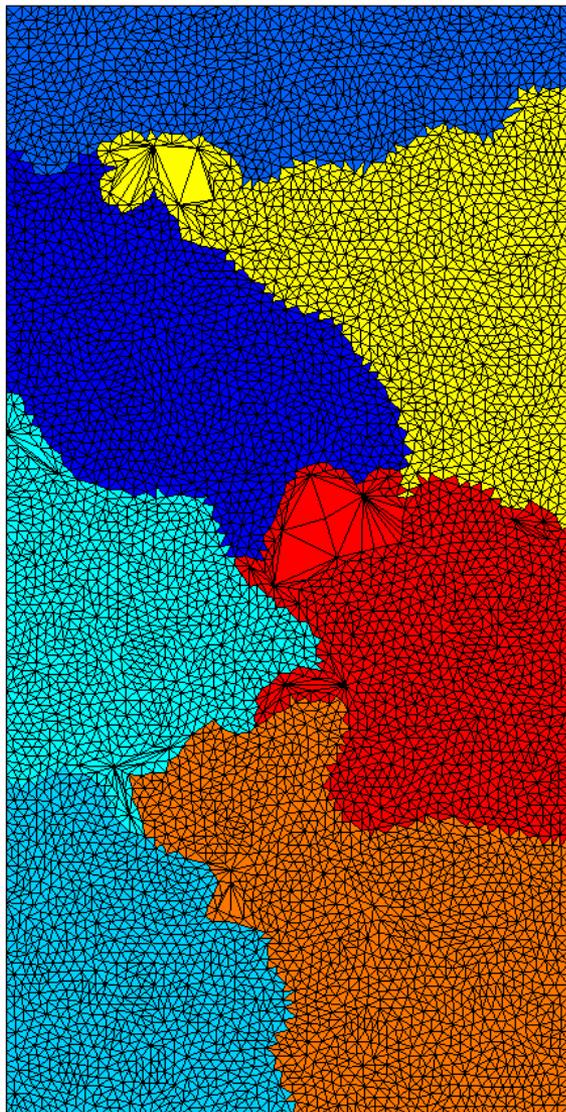
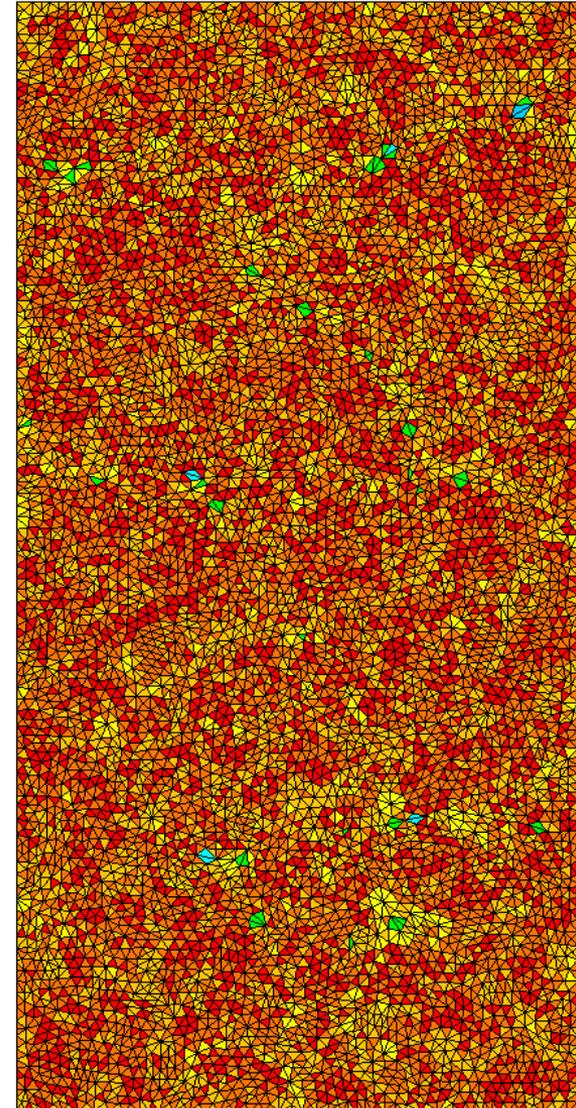
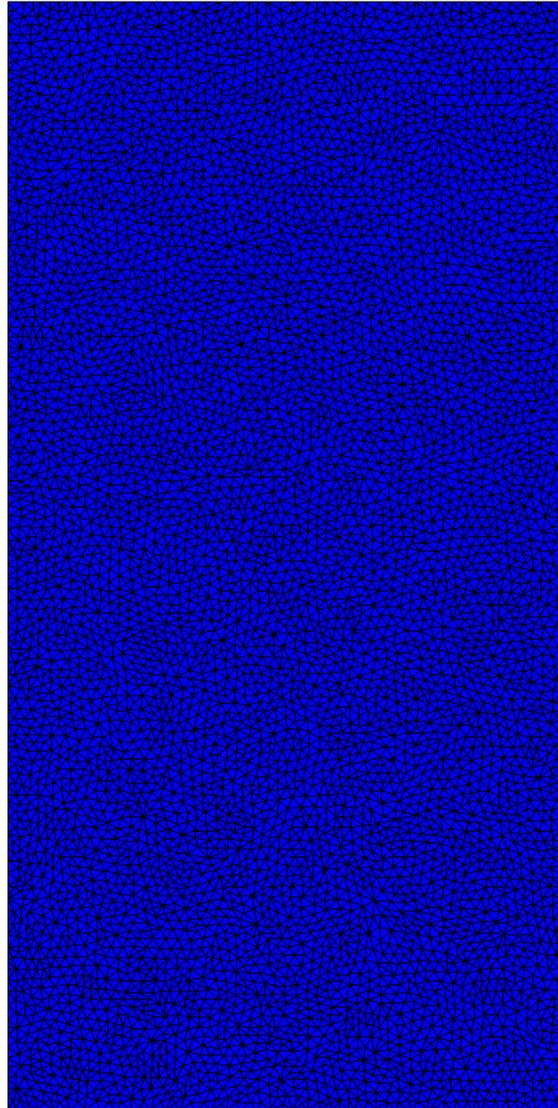
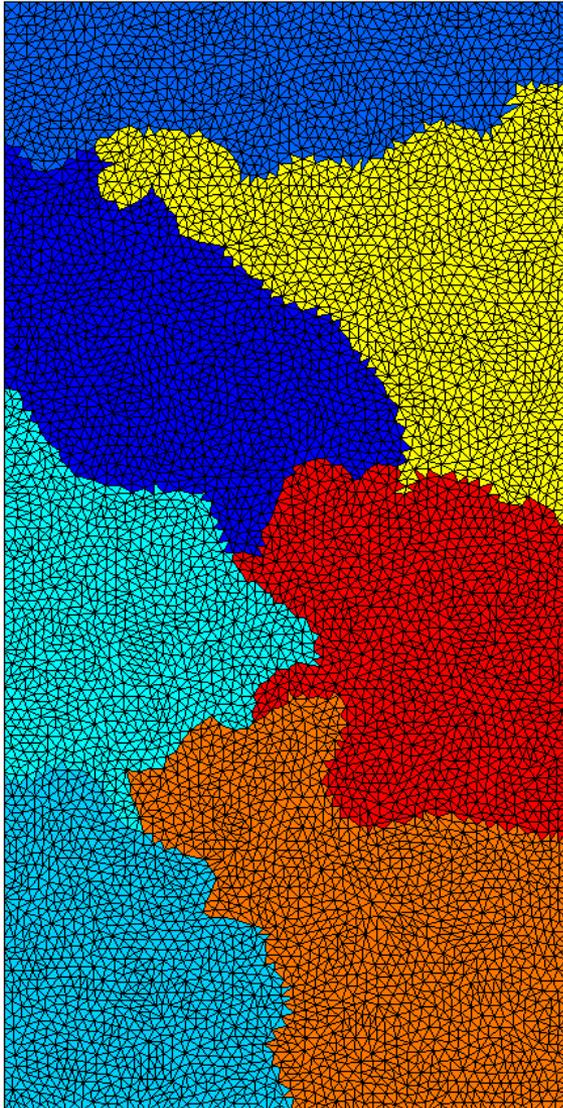


Illustration dans un cas 2d :

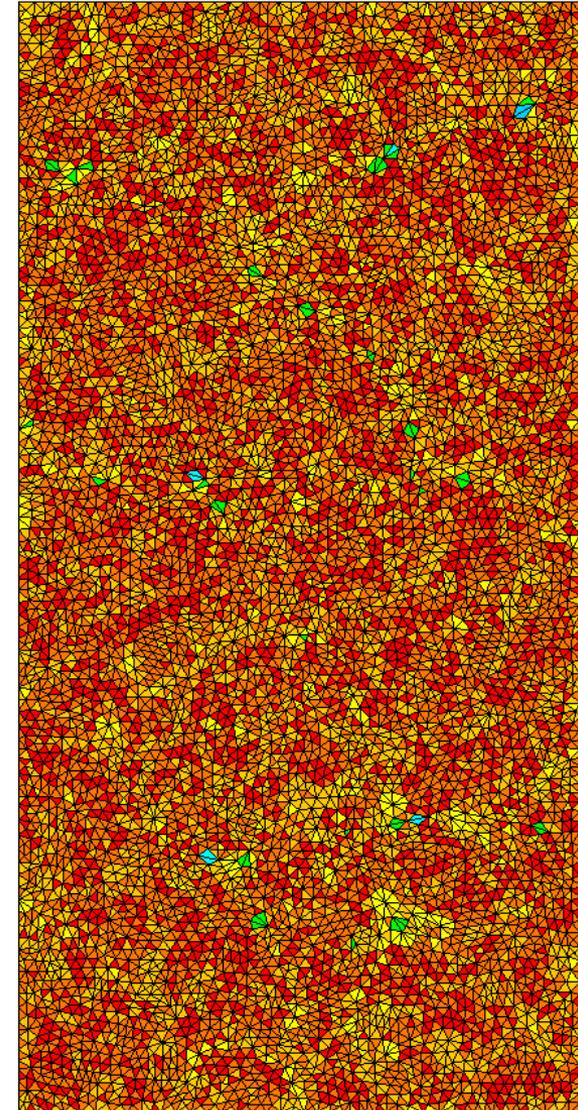
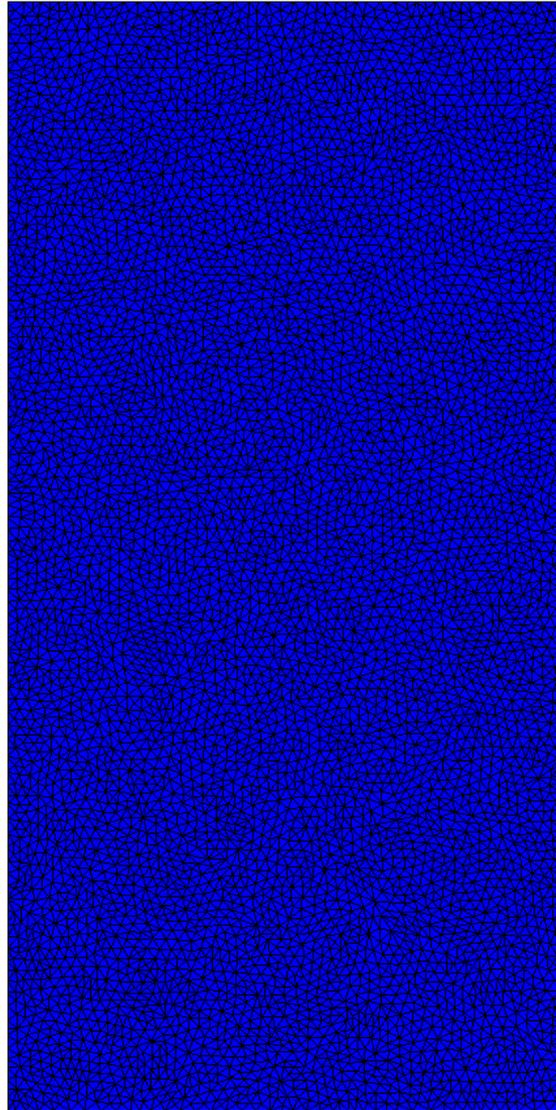
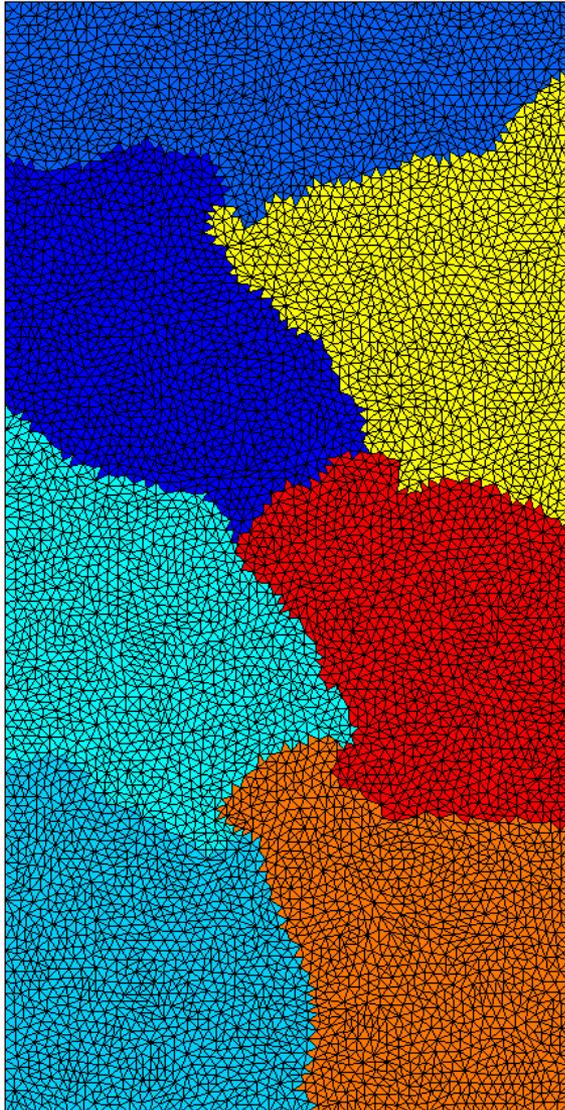
3ème remaillage



Dernier repartitionnement pour équilibrer la charge de travail pour les calculs EF

Illustration dans un cas 2d :

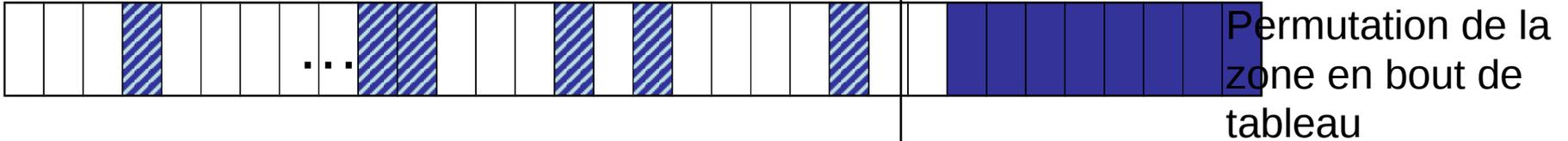
[Vidéo]



Optimisation :

(n - m) data

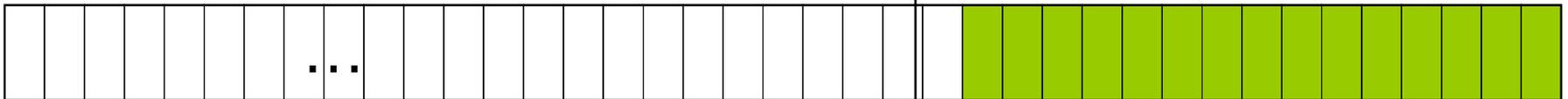
m data



Extraction de la zone à remailler



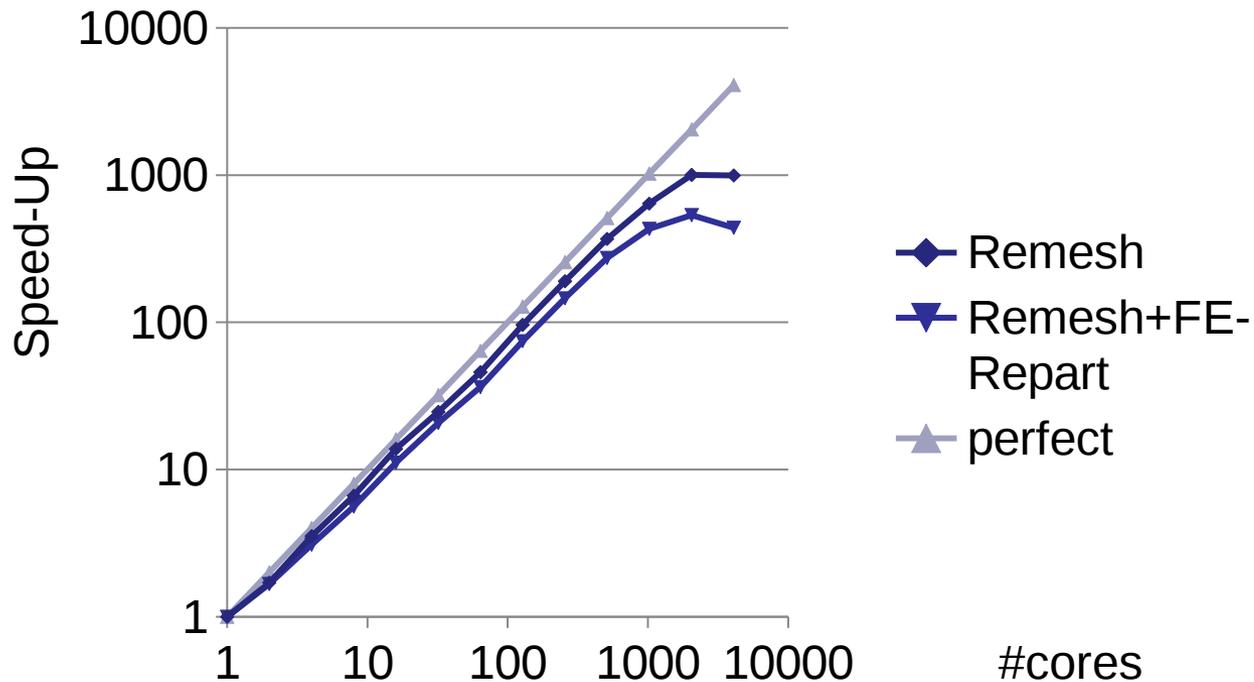
Remaillage de la zone extraite



Recollement du nouveau maillage en bout de tableau

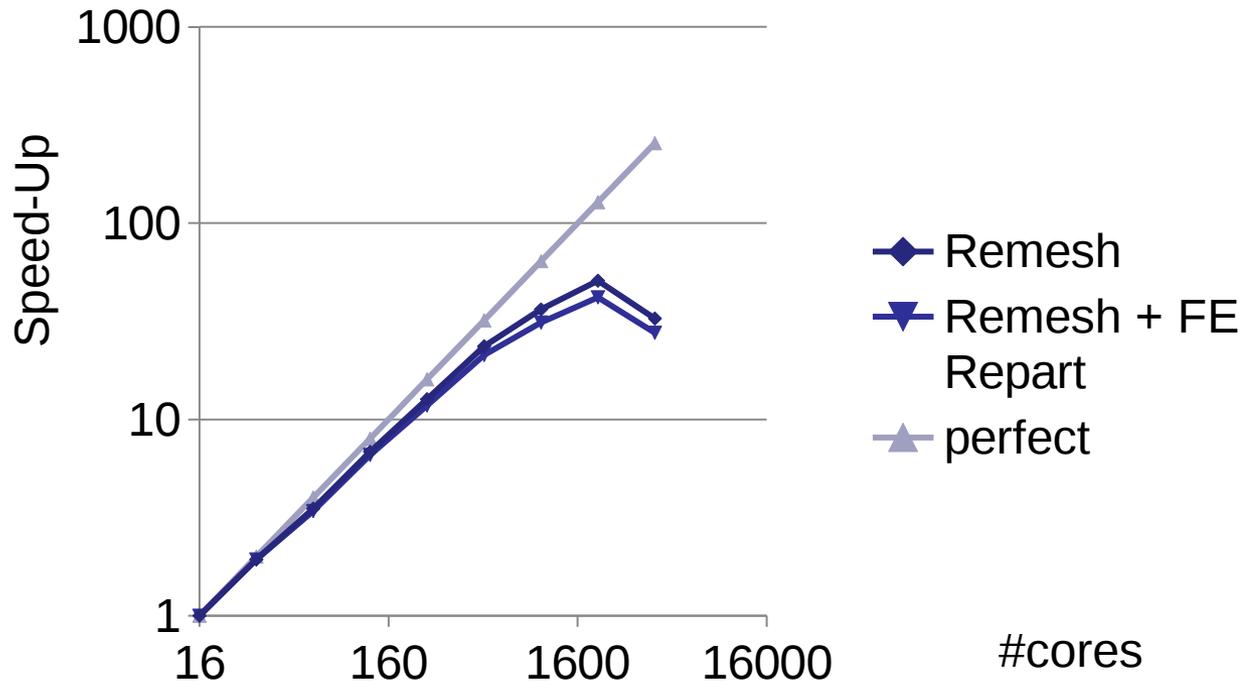
Performances parallèle : Hard Speed-Up

- Cas test 2d avec un raffinement uniforme du maillage d'un facteur 2
- Maillage initial de 5 000 000 de nœuds pour un final à 21 000 000
- Exécute en utilisant de 1 à 4096 cœurs de Curie.
- Le temps de remaillage passe de 3300s sur 1 cœur à 3.3s/6.3s sur 2048 coeurs.



Performances parallèle : Hard Speed-Up

- Cas test 3d avec un raffinement homogène d'un facteur 2
- Maillage initial de 3,6 millions de nœuds pour un final de 30 millions.
- Exécutée en utilisant de 16 à 4096 cœurs
- Le temps de remaillage passe de 6800s sur 16 coeurs à 162s sur 2048 coeurs.



Application : adaptation statique (avec un estimateur d'erreur anisotrope)

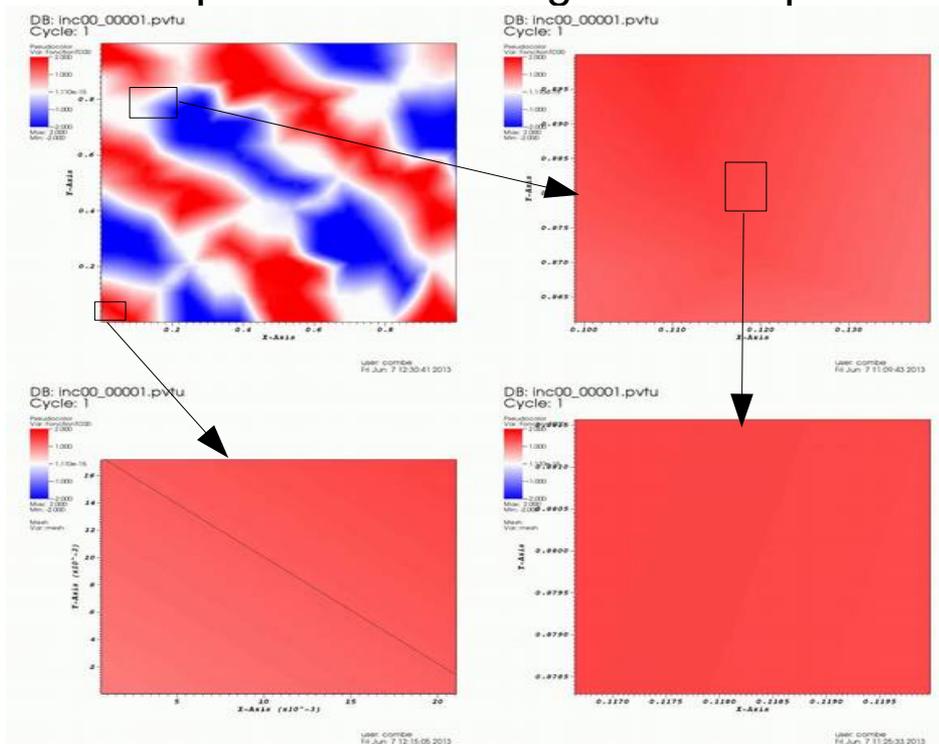
Illustration sur une fonction test complexe :

- constante presque partout
- avec localement de forte variation

$$g(x) = \tanh\left(E \sin\left(\frac{4N+1}{2}\pi x\right)\right)$$

$$f(x) = g \circ g(\|x-0\|) + g \circ g(\|x-1\|)$$

Adaptation de maillage anisotrope : 200 itérations exécuté en séquentiel

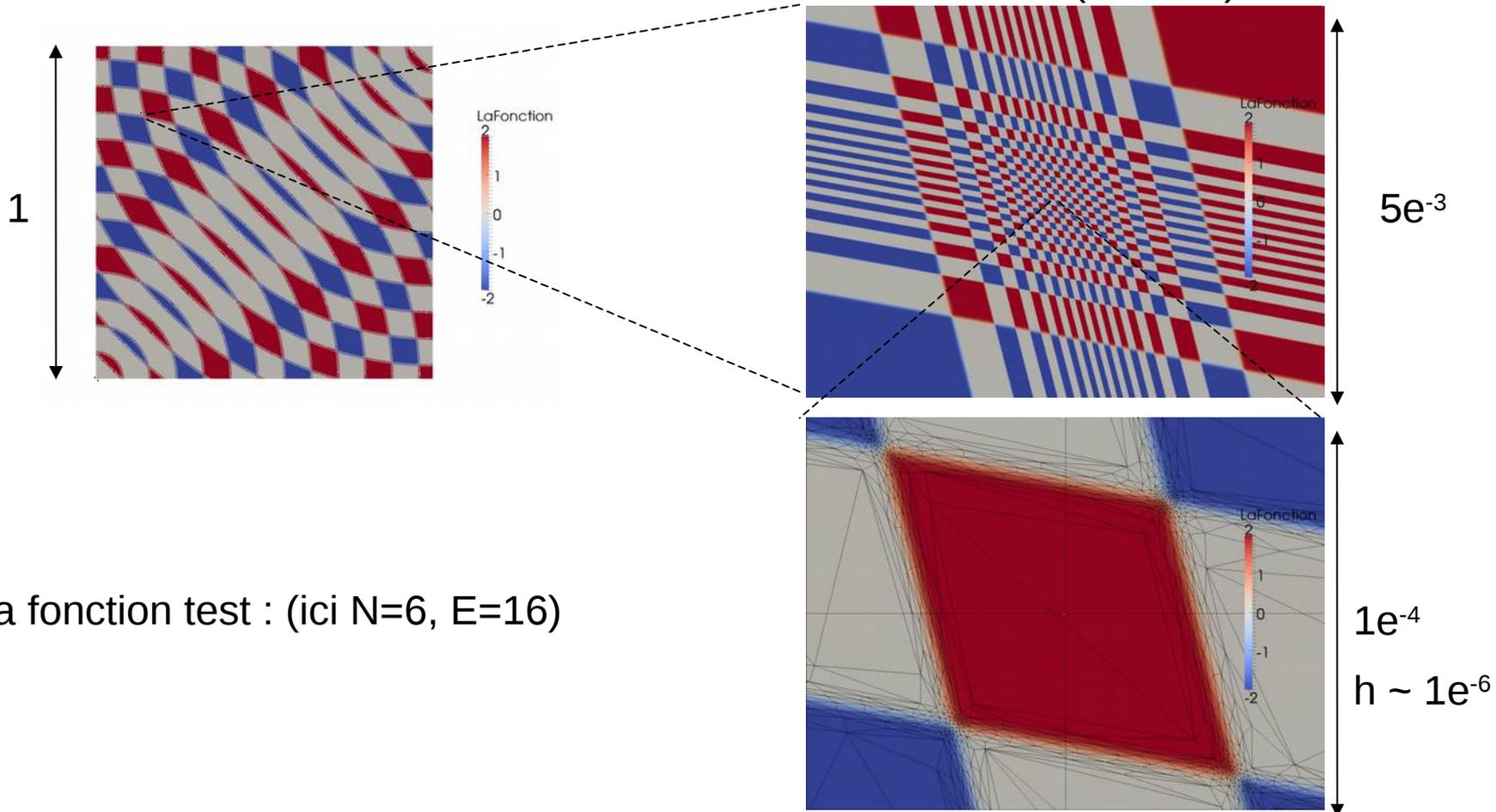


Vidéo (avec E=2 et N=8)

Application : adaptation statique (avec un estimateur d'erreur anisotrope)

Test 2d avec un maillage de 25 000 000 noeuds

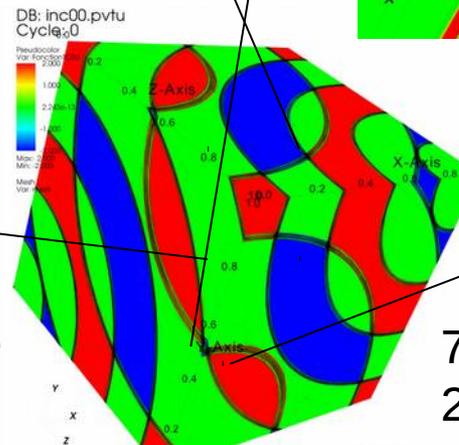
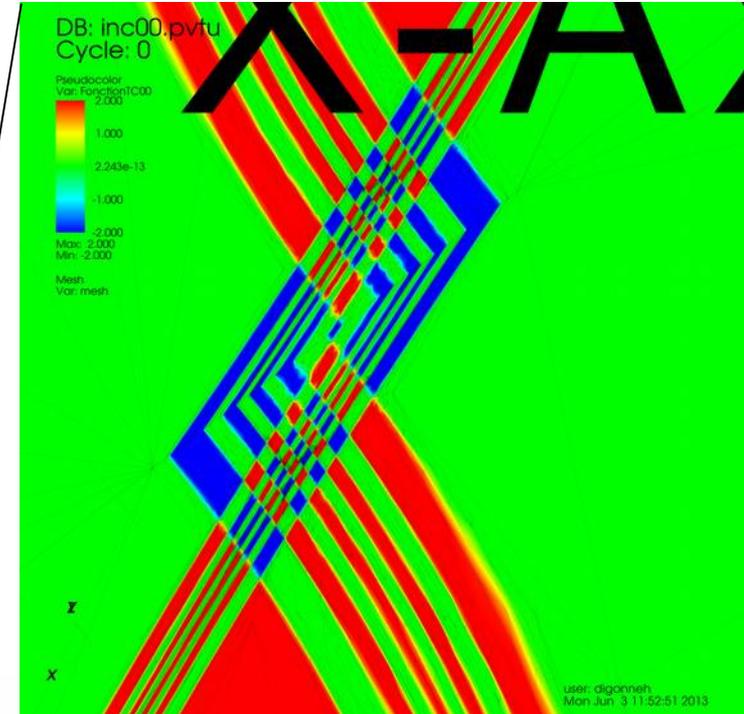
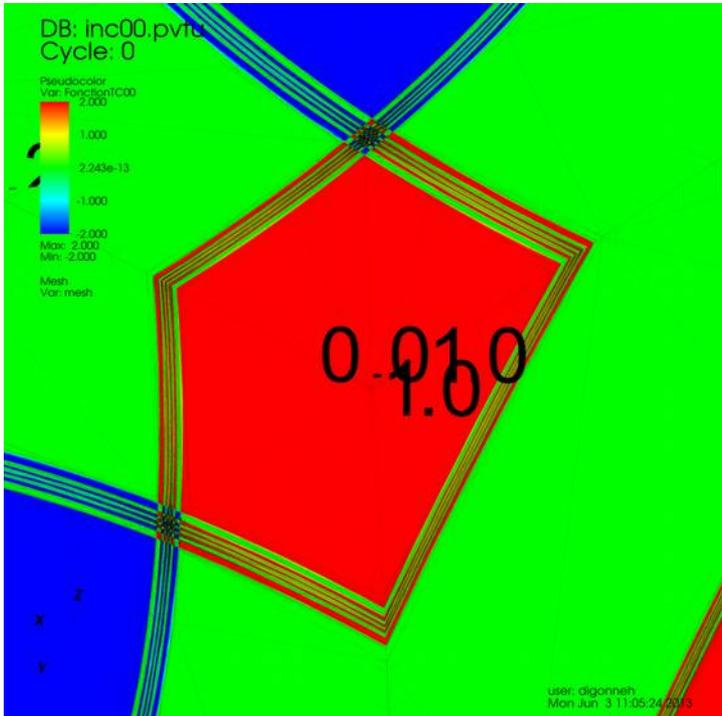
150 itérations exécutées sur 512 coeurs en 6 059s (1h 41m) sur Jade



La fonction test : (ici N=6, E=16)

Application : adaptation statique (avec un estimateur d'erreur anisotrope)

Test 3d : la fonction avec $N=2$ $E=16$

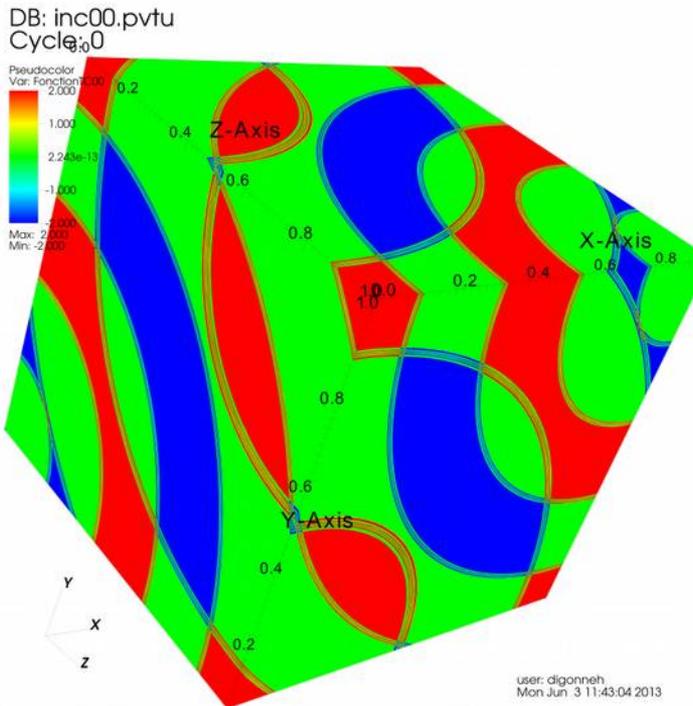


Maillage adapté sous la contrainte d'avoir 60 millions de nœuds

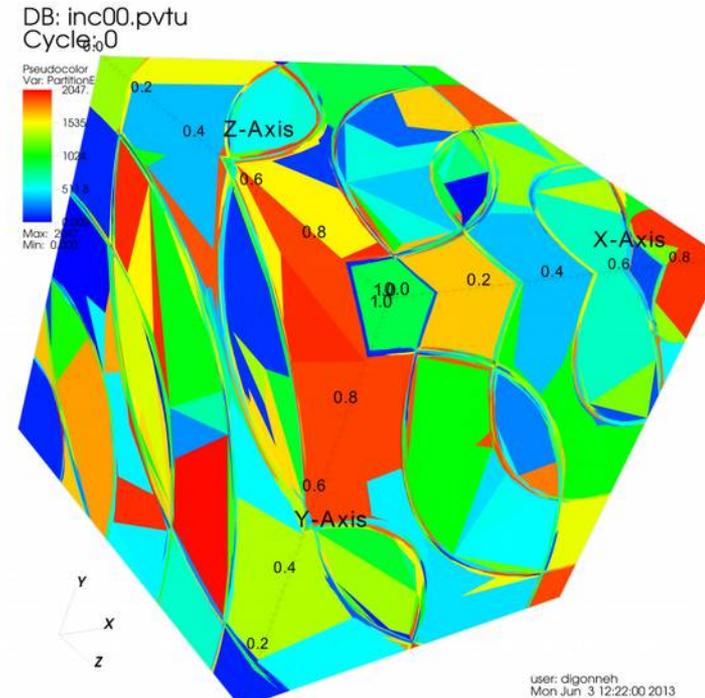
70 itérations effectuées sur 2048 cœurs de Curie in (10h)

Application : adaptation statique (avec un estimateur d'erreur anisotrope)

Test 3d : la fonction avec $N=2$ $E=16$ et la partition du maillage



Maillage adapté sous la contrainte d'avoir 60 millions de nœuds



70 itérations effectuées sur 2048 cœurs de Curie in (10h)



Centrale
Nantes

Supercalculateurs Tier0 et FEM implicite adaptative...

Methode multigrille parallèle

Pourquoi un solveur multigrille

- Nous sommes capables de générer/adapter des maillages à plusieurs milliards de nœuds en utilisant plusieurs dizaines de milliers de cœurs
- Ces maillages ont pour objet principal de discrétiser un domaine de calcul pour résoudre des EDP.
- Même si les méthodes itératives se parallélisent très bien et avec d'excellentes performances (accélération quasi parfaite voir même super linéaire avec les effets de cache)
- La complexité algorithmique de ces dernières est telle qu'il est impossible d'envisager la résolution de systèmes linéaires à plusieurs milliards de degrés de liberté

Solveur multigrille : utilisation de PETSc

PETSc est une bibliothèque comportant un large gamme de solveurs itératifs parallèles ainsi qu'un large variété de préconditionneurs parallèles.

Elle présente de très bonnes performances parallèles et est largement utilisée dans les codes de simulation numérique utilisant une formulation implicite.

Elle a une interface de développement afin d'implémenter un préconditionneur de type multigrille PCMG. Le développeur doit cependant fournir les fonctionnalités suivantes :

- Les systèmes à résoudre sur chaque niveau:
 - Discrétisation du problème physique (Géométrie MG)
 - Réursive réduction du problème fin (Algébrique MG)

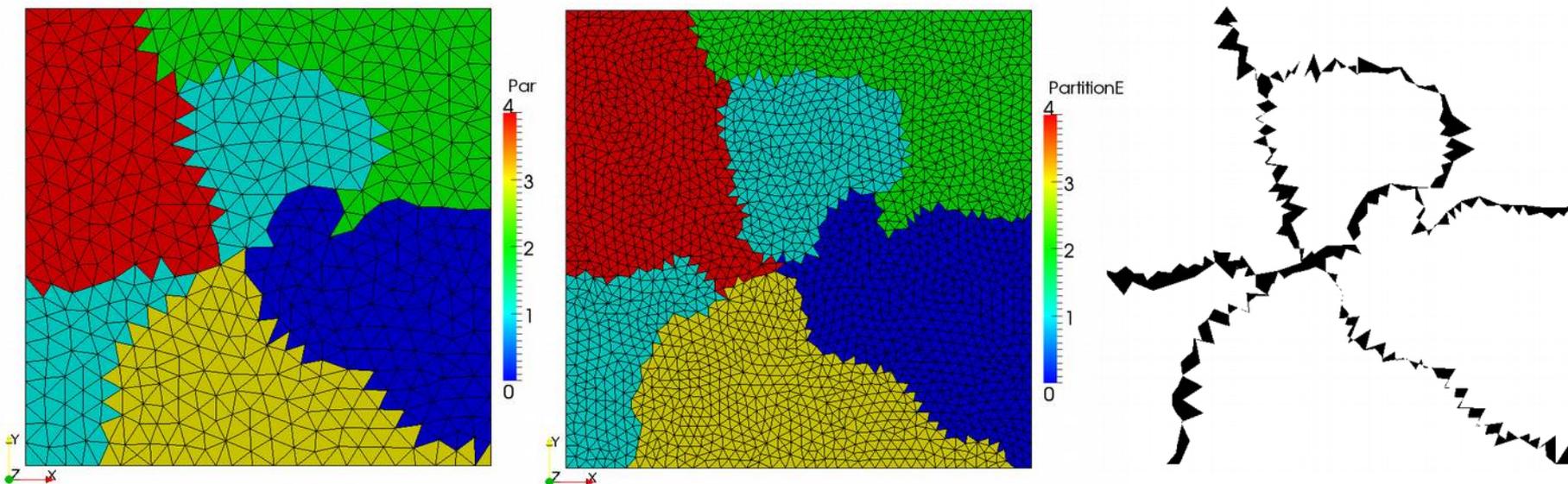
$$A_{n-1} = {}^t I_{n-1,n} A_n I_{n-1}$$

- Opérateurs d'interpolation $I_{n-1,n}$ et/ou de restriction $R_{n,n-1}$ entre deux niveaux.

Solveur multigrille : opérateur parallèle de restriction/interpolation

Dans un contexte parallèle ces opérateurs s'appuient sur des maillages partitionnés. Il est donc nécessaire d'effectuer des localisations locales et d'autres externes.

Grâce à la technique de remaillage choisie, les partitions des deux maillages sont très proches (bien que différentes), et le nombre de localisations externes représente uniquement un petit pourcentage des nœuds.

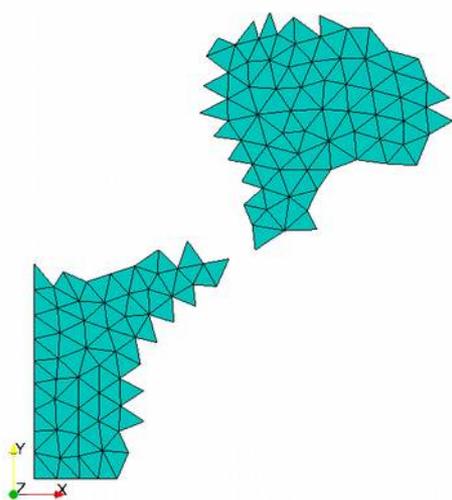


Solveur multigrille : opérateur parallèle de restriction/interpolation avec utilisation de filtre.

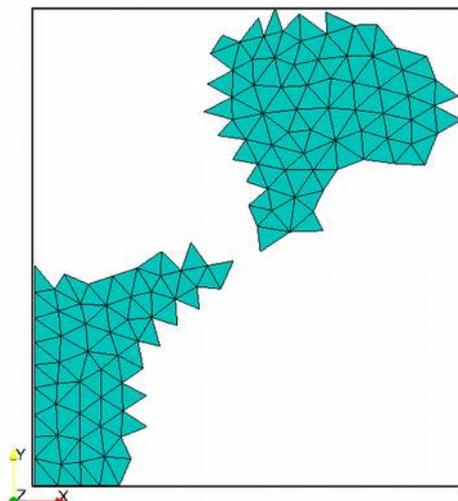
Le calcul parallèle rend les détails prépondérants !!!

Par exemple, avec en moyenne seulement 5% de nœuds externes mais en utilisant 1000 cœurs, on se retrouve à devoir localiser 5 fois plus de nœuds externe que de nœuds locaux. Ce qui entraîne un dépassement mémoire.

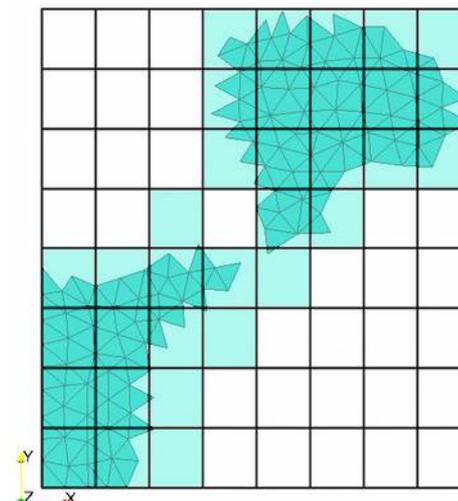
Pour lutter contre ceci on introduit des filtres qui limitent les faux positifs : boite englobante ou (mieux) un masque de pixels.



Le sous domaine



Boite englobante



Masque de pixel



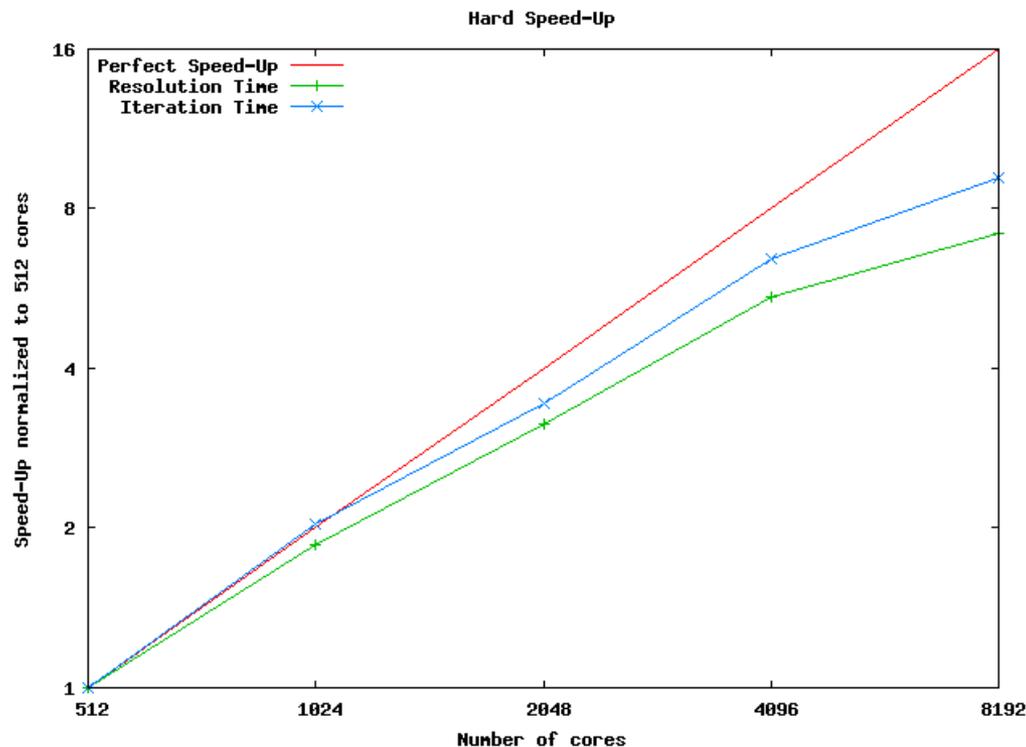
Solveur multigrille : performance parallèle (hard speed-up)

Ce cas test consiste dans la résolution des équations de Stokes incompressibles en formulation éléments finis mixte (vitesse, pression) discrétisée par un élément P1+/P1. Maillage 2d de 216 millions de nœuds (650 millions de ddl). Exécuté sur 512 à 8192 cœurs avec un solveur multigrille à 8-niveaux.

Temps de résolution :

de 96.7s avec 11 itérations
sur 512 cœurs

à 13.4s avec 14 itérations
sur 8192 cœurs



Performance a l'échelle des calculateurs Tier0

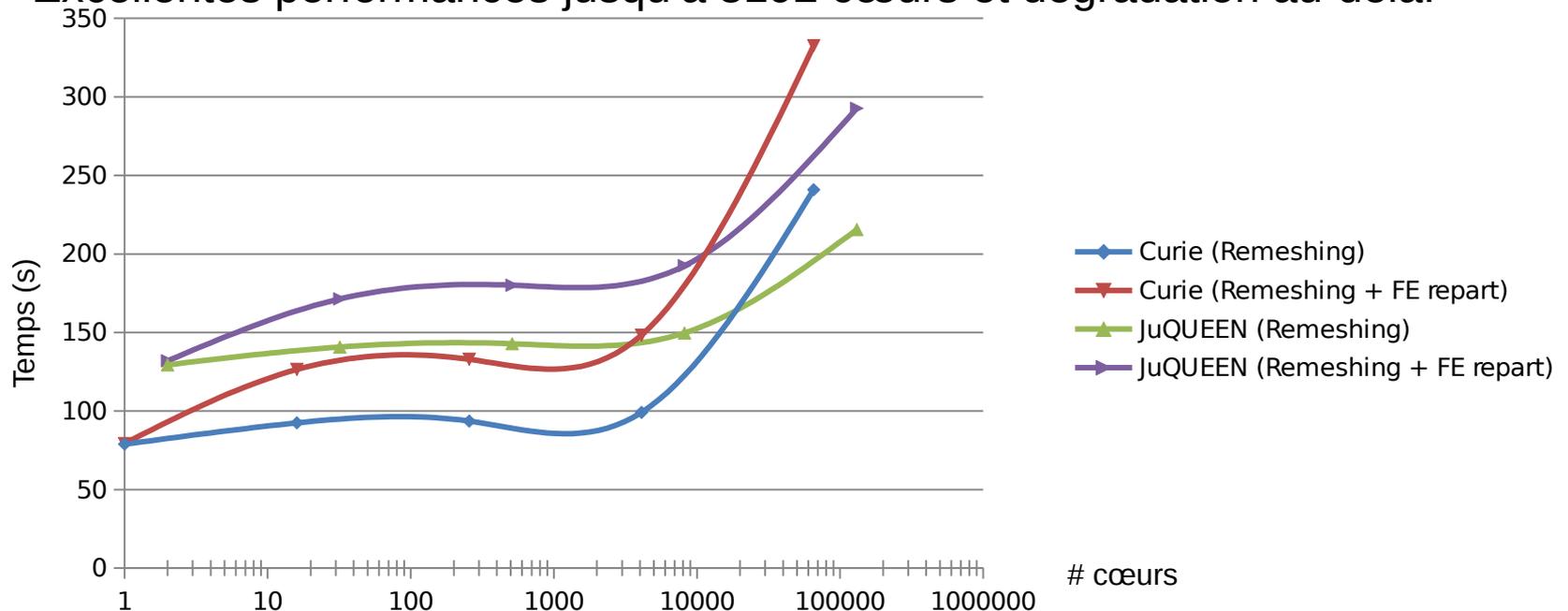
Maillage parallèle : weak speed-up pour un cas 2d

Exécution de 1 à 131 072 cœurs, raffinement homogène d'un facteur 4.

Charge de travail constante par cœur : 500 000 nœuds sur Curie
et 125 000 x2 sur JuQUEEN.

Le maillage final contient de 33,3 milliards de nœuds et 67 milliards d'éléments.

Excellentes performances jusqu'à 8192 cœurs et dégradation au-delà.

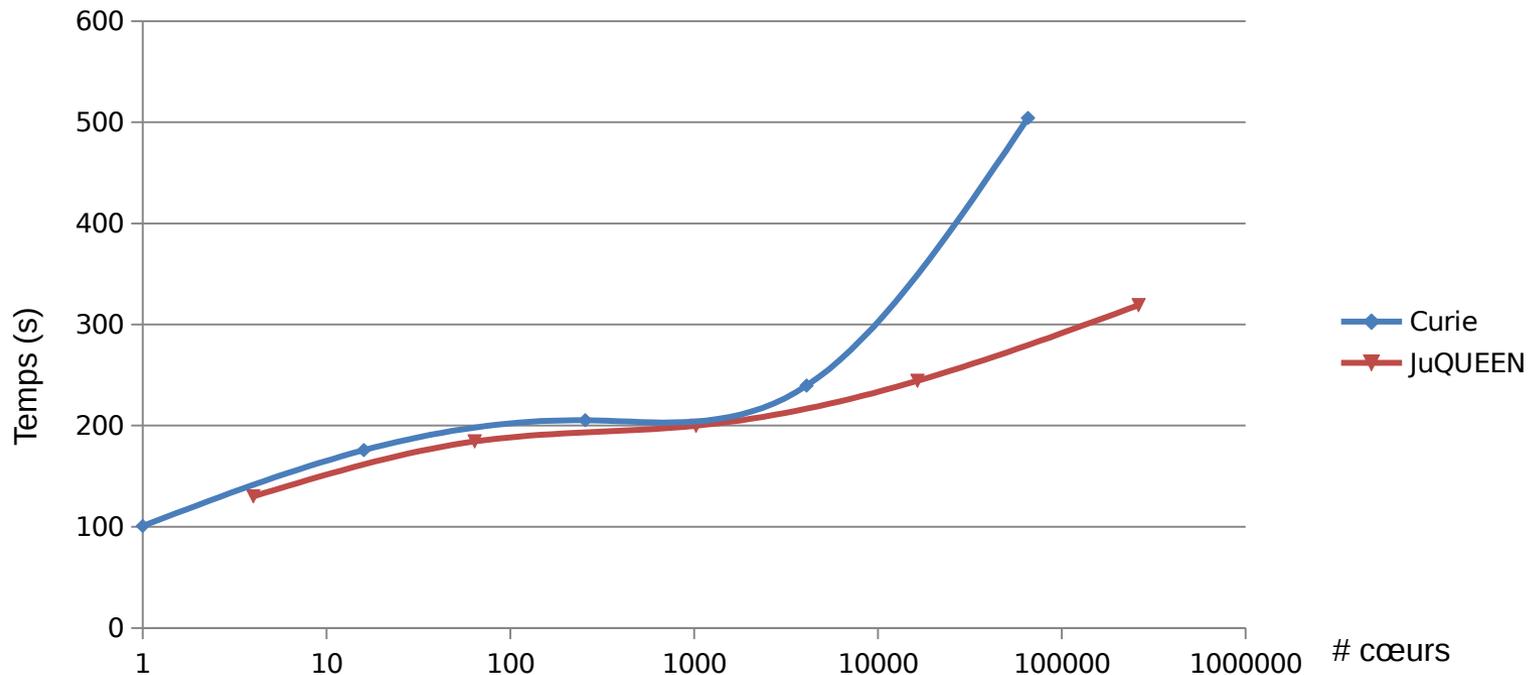


Solveur multigrille : weak speed-up pour un cas 2d

Exécution de 1 à 262 144 cœurs pour une convergence relative à $1e-9$

Cas final à 100 milliards de degrés de libertés

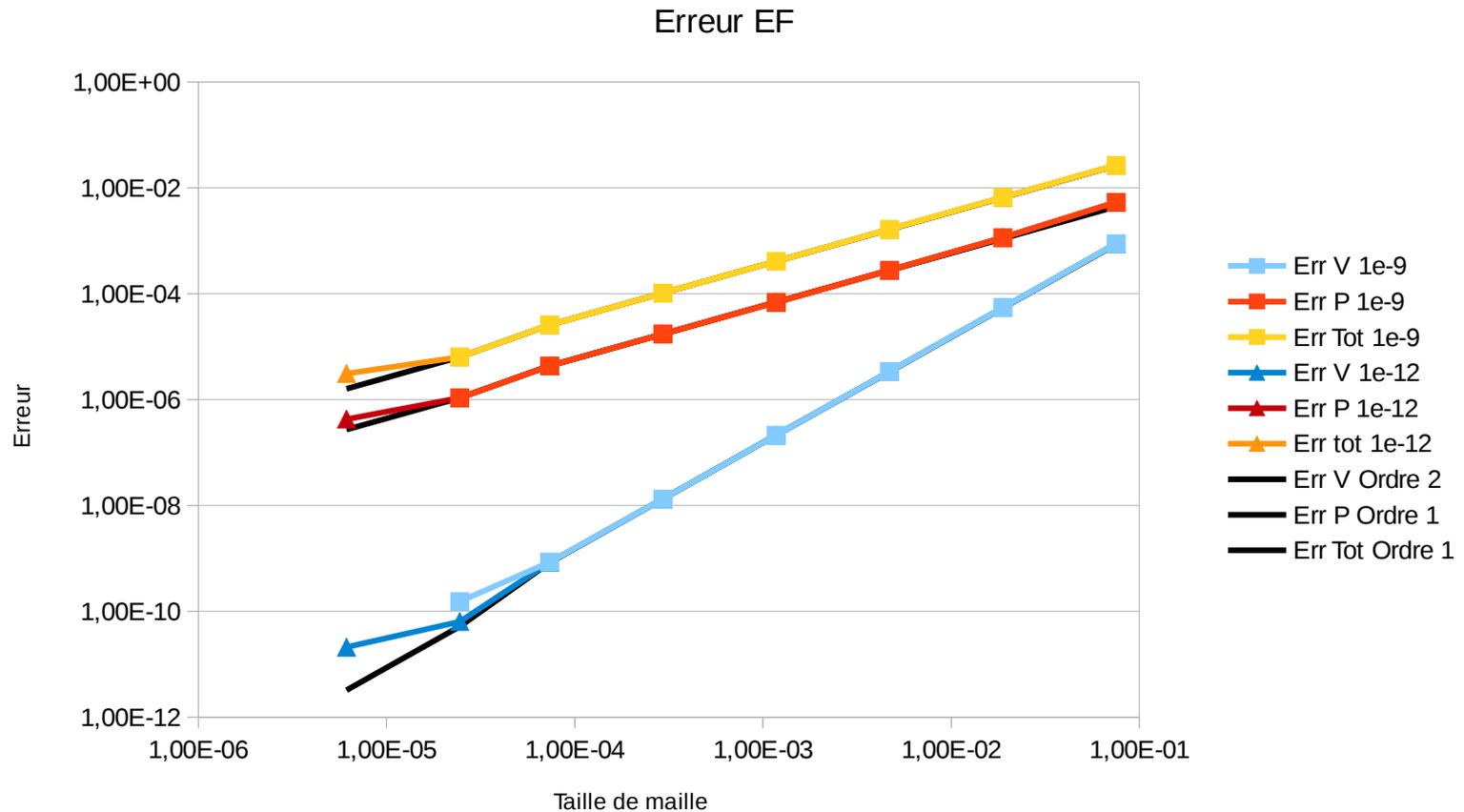
On observe de très bonnes performances jusqu'à 10 000 cœurs et une dégradation au-delà (surtout sur Curie).



Solveur multigrille : évolution de l'erreur EF

Convergence linéaire pour la pression et quadratique en vitesse

Limite du réel « double précision » ($1e-14$) sur le cas le plus fin ?



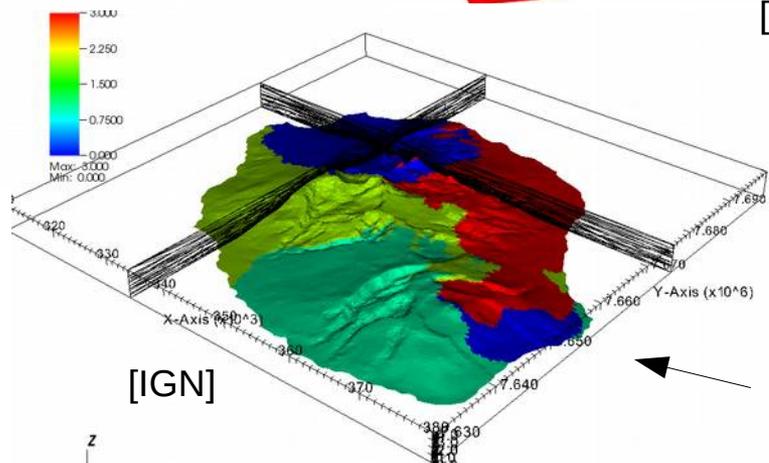
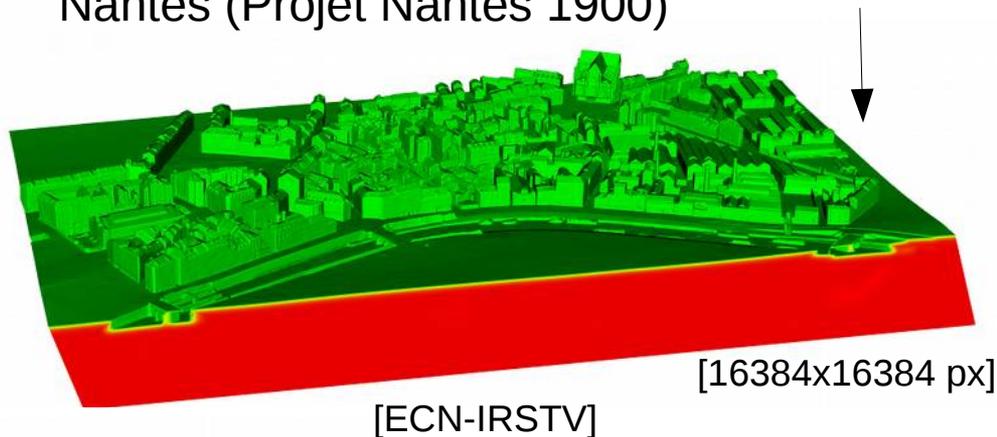
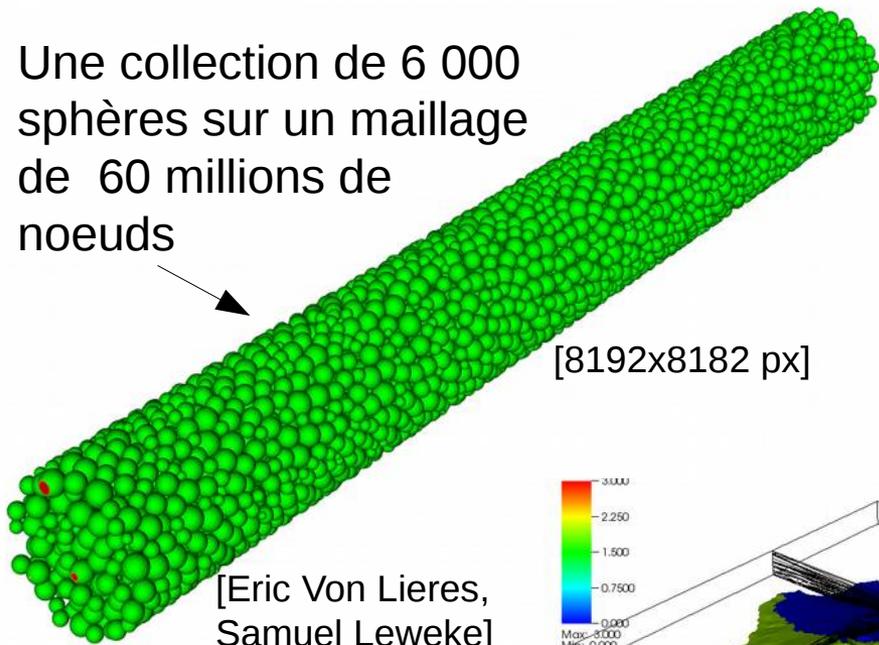
Exemples d'applications

Du réel au virtuel :

Le but est d'incorporer directement des données réelles dans les simulation.

Un maillage à 5 millions de noeuds qui représente une vue d'un quartier de Nantes (Projet Nantes 1900)

Une collection de 6 000 sphères sur un maillage de 60 millions de noeuds

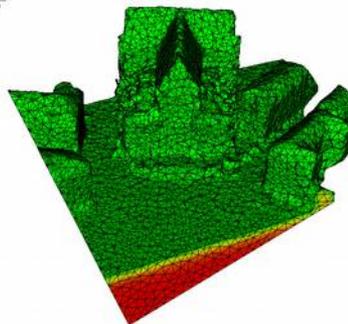
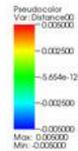
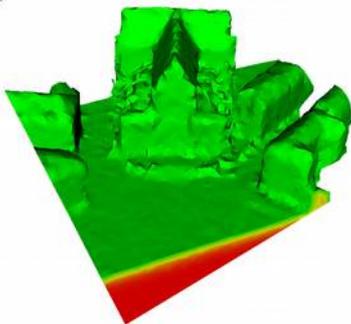
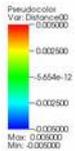
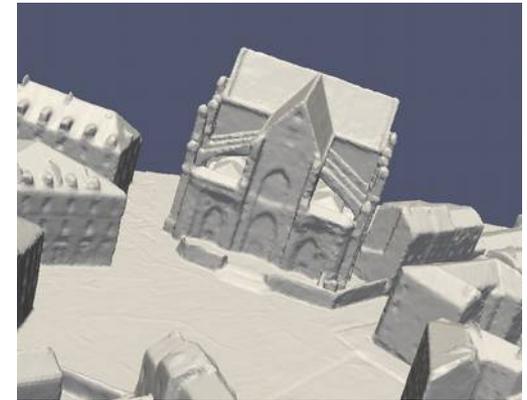


L'île de la Réunion :
Maillage anisotrope
sur 4 coeurs

Du réel au virtuel :

Adaptation autour d'un détail de paysage urbain :

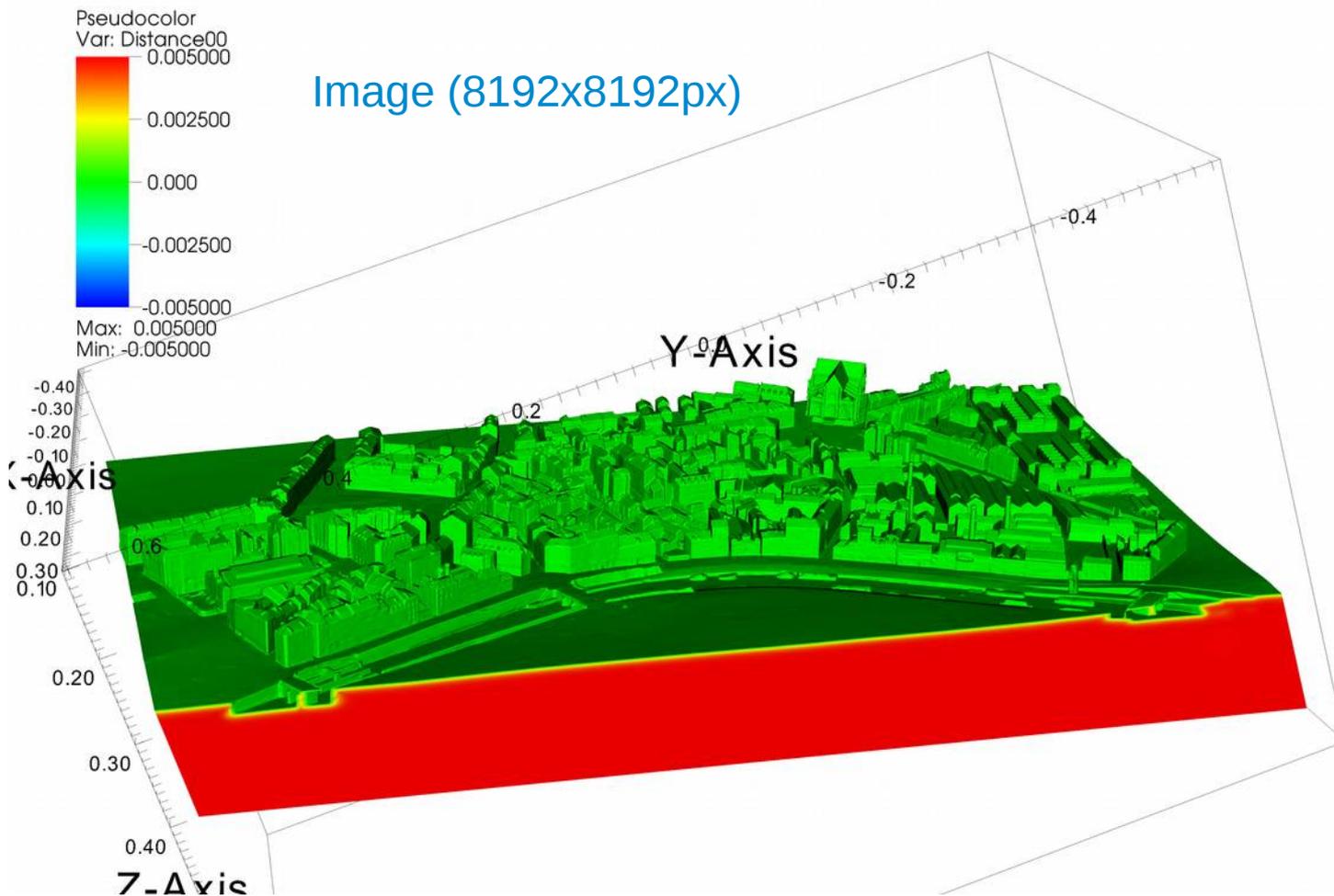
100 itérations avec maillage volumique
d'environ : 60 000 nœuds et 300 000 éléments



Vidéo (Cathedrale)

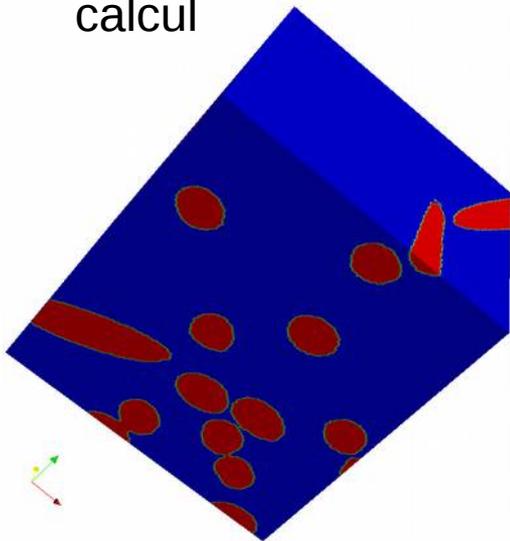
Du réel au virtuel :

Sur l'ensemble de la maquette : triangulation de la surface avec 9 millions de triangles.
Maillage volumique adapté de 6 millions de nœuds exécuté sur 256 cœurs

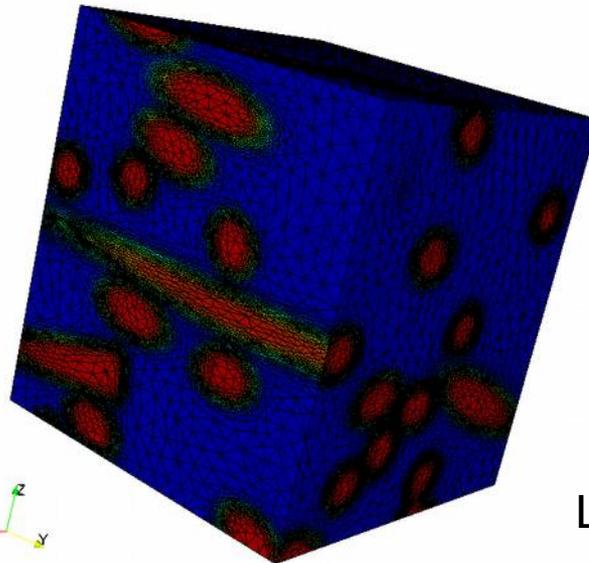
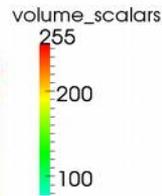


Du réel au virtuel :

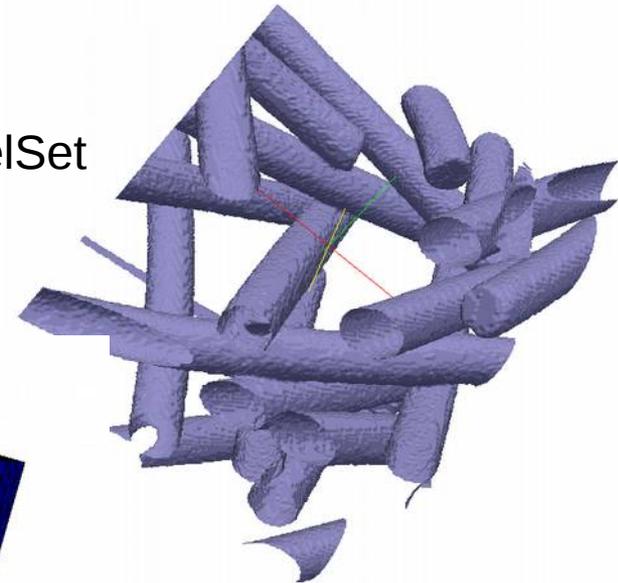
Aujourd'hui, les tomographies produisent des images 3d précises de microstructures (ici un exemple avec 200^3 voxels). Cette image segmentée peut alors être utilisée pour déterminer les différentes phases et adapter le maillage de calcul



l'image



la LevelSet



Le maillage de calcul

Du réel au virtuel :

Exemple :

Isovolume positif de la LevelSet sur un maillage adapté de 400 millions de nœuds et 2,2 milliards éléments

Calculé à partir d'une image tomographique 3d de la microstructure de taille 1200x1200x1800 voxels (2Go)

Exécuté sur 4096 cœurs en 5h pour une dizaines d'itérations

DB: inc.pvtu

Pseudocolor

Var: Distance

0.0

1.000

0.5000

0.0000

-0.5000

-1.0000

Max: 1.000

Min: -1.000

0.4

0.6

0.8

1.0

1.2

1.4

1.6

1.8

2.0

2.2

2.4

2.6

2.8

3.0

3.2

3.4

3.6

3.8

4.0

4.2

4.4

4.6

4.8

5.0

5.2

5.4

5.6

5.8

6.0

6.2

6.4

6.6

6.8

7.0

7.2

7.4

7.6

7.8

8.0

8.2

8.4

8.6

8.8

9.0

9.2

9.4

9.6

9.8

10.0

10.2

10.4

10.6

10.8

11.0

11.2

11.4

11.6

11.8

12.0

12.2

12.4

12.6

12.8

13.0

13.2

13.4

13.6

13.8

14.0

14.2

14.4

14.6

14.8

15.0

15.2

15.4

15.6

15.8

16.0

16.2

16.4

16.6

16.8

17.0

17.2

17.4

17.6

17.8

18.0

18.2

18.4

18.6

18.8

19.0

19.2

19.4

19.6

19.8

20.0

20.2

20.4

20.6

20.8

21.0

21.2

21.4

21.6

21.8

22.0

22.2

22.4

22.6

22.8

23.0

23.2

23.4

23.6

23.8

24.0

24.2

24.4

24.6

24.8

25.0

25.2

25.4

25.6

25.8

26.0

26.2

26.4

26.6

26.8

27.0

27.2

27.4

27.6

27.8

28.0

28.2

28.4

28.6

28.8

29.0

29.2

29.4

29.6

29.8

30.0

30.2

30.4

30.6

30.8

31.0

31.2

31.4

31.6

31.8

32.0

32.2

32.4

32.6

32.8

33.0

33.2

33.4

33.6

33.8

34.0

34.2

34.4

34.6

34.8

35.0

35.2

35.4

35.6

35.8

36.0

36.2

36.4

36.6

36.8

37.0

37.2

37.4

37.6

37.8

38.0

38.2

38.4

38.6

38.8

39.0

39.2

39.4

39.6

39.8

40.0

40.2

40.4

40.6

40.8

41.0

41.2

41.4

41.6

41.8

42.0

42.2

42.4

42.6

42.8

43.0

43.2

43.4

43.6

43.8

44.0

44.2

44.4

44.6

44.8

45.0

45.2

45.4

45.6

45.8

46.0

46.2

46.4

46.6

46.8

47.0

47.2

47.4

47.6

47.8

48.0

48.2

48.4

48.6

48.8

49.0

49.2

49.4

49.6

49.8

50.0

50.2

50.4

50.6

50.8

51.0

51.2

51.4

51.6

51.8

52.0

52.2

52.4

52.6

52.8

53.0

53.2

53.4

53.6

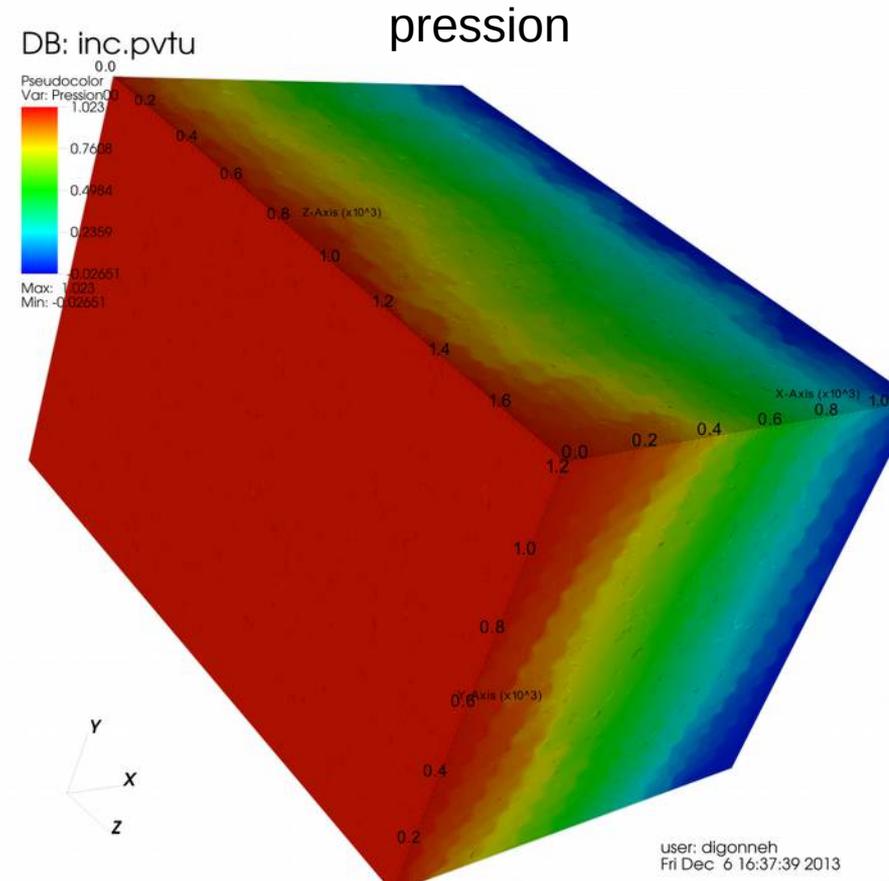
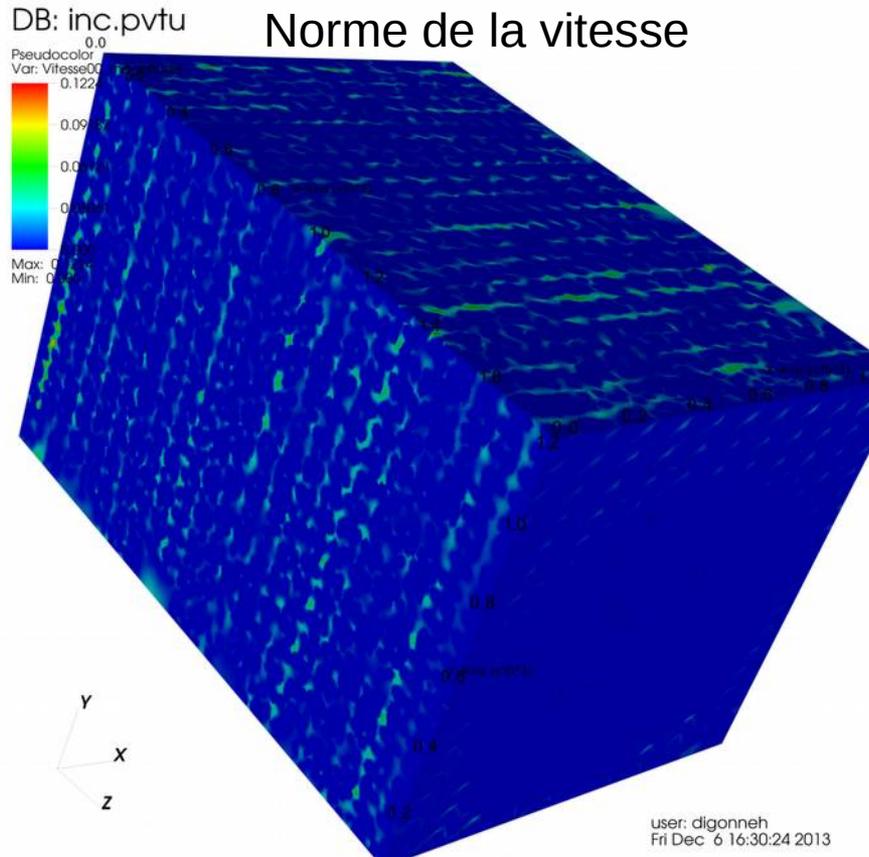
53.8

54.0

54.2

Du réel au virtuel :

Exemple : Calcul d'écoulement à travers cette microstructure. Équation de Stokes en formulation éléments finis mixte P1+/P1 aboutissant à la résolution d'un système à 1.5 milliards de degrés de libertés en 1100 seconds.



Conclusions

Nous sommes capables d'adresser les supercalculateurs de type Tier0 avec une bonne efficacité parallèle et une extensibilité au-delà des 100 000 cœurs que ce soit :

- avec l'adaptation anisotrope de maillage
- mais également pour la résolution des systèmes linéaires à l'aide d'une méthode multigrille

Une résolution « record » d'un système à **100 milliards de ddl** à été réalisé sur **65 536** (Curie) et **262 144** (JuQUEEN) cœurs et **200 To** de mémoire RAM.

Tout ceci nous permet de combiner les accélérations ($\times 10^{11}$) de chaque optimisation:

- l'adaptation de maillage
=> réduit le nombre d'inconnues nécessaire ($\times 1\ 000$)
- le calcul massivement parallèle
=> accès à une puissance de calcul impressionnante ($\times 100\ 000$)
- le solveur multigrille
=> réduit considérablement le nombre d'opérations nécessaires à la résolution de grands systèmes ($\times 1\ 000$)

Visit ou Paraview nous permettent également de visualiser les résultats obtenues.

Perspectives

A court terme :

Améliorer les performances lors de l'utilisation de la quasi totalité des supercalculateurs (à 100 000 cœurs) par un meilleur placement des processus en fonction du hardware de ces derniers.

Valider les développements effectués dans d'autre contextes :

- solveur non linéaire
- problèmes instationnaires (exemple : évolution de surface libre)

Développer « redévelopper » une version open sources des outils présentés

A plus long terme :

Étendre la méthode à des ordre d'éléments plus élevé P2, ...

Construire une version en float128 bits pour autoriser des convergences au-delà des 10^{-14} du double précision (et retrouver une erreur de convergence inférieur à l'erreur EF)



Remerciement

Je veux remercier les programmes

GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif)

pour les accès aux supercalculateurs Tier1 français : Jade, Curie et Turing

PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)

Pour les accès aux supercalculateurs Tier0 Curie et JuQUEEN.

Et merci pour votre attention



Centrale
Nantes

Supercalculateurs Tier0 et FEM implicite adaptative...

Solveur multigrille : opérateur de restriction/interpolation

Ces opérateurs ont pour but de transporter des champs d'un maillage à un autre :

- Interpolation : du plus grossier au plus fin.
- Restriction : du plus fin au plus grossier.

Une façon simple de définir ces opérateurs est d'utiliser les coordonnées barycentriques (des nœuds d'un maillage pour les éléments d'un autre).

La construction rapide de cet opérateur repose sur un algorithme de localisation rapide de l'élément contenant un nœud.

Pour cela nous utilisons une structure d'octree de façon à réduire la complexité algorithmique à $O(n \log n)$

