



UNIVERSITÉ DE
BORDEAUX



Thés

Évolution d'un solveur Navier-Stokes massivement parallèle pour l'étude du déferlement des vagues

Stéphane Glockner, Pierre Lubin, I2M – UMR 52 95
glockner@ipb.fr p.lubin@i2m.u-bordeaux1.fr

Introduction

Objectif

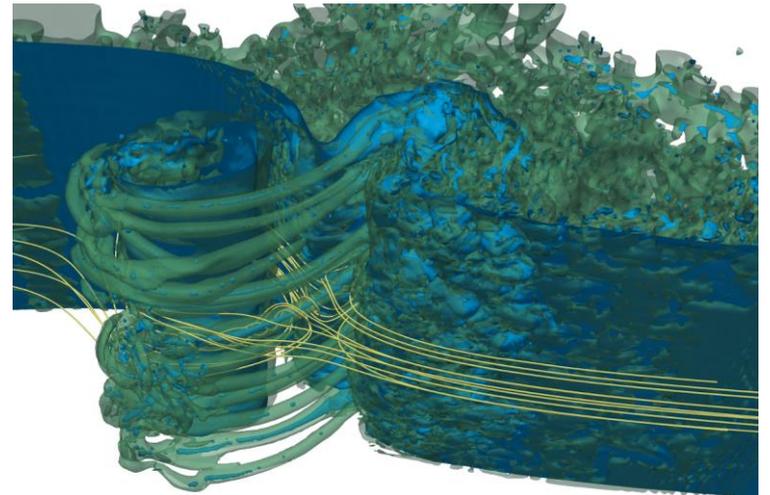
Présenter l'évolution d'un code de calcul pour des simulations 3D à caractère environnemental, dans un contexte de calcul intensif, des calculateurs régionaux aux supercalculateurs européens.

Recours au calcul intensif. Pourquoi ?

- Ecoulements turbulents, au large spectre d'échelles spatio-temporelles
- Plus fines structures de l'ordre du 1/10 mm
- Instrumentation compliquée
- Rôle de l'entraînement de l'air crucial
- Identification incomplète des structures aérées et turbulentes

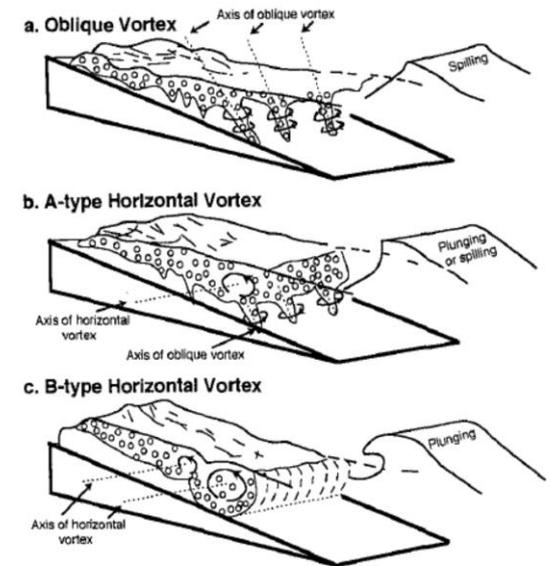
Plan

- Les phénomènes physiques
- Thétis
- Calcul parallèle
- I/O
- Visualisation
- Application au déferlement
- Perspectives



Le déferlement plongeant se produit en plusieurs étapes.

- Retournement de l'onde sur elle-même
- Éjection d'un jet
- Impact du jet sur la face avant de la vague
- Génération d'un jet secondaire (splash-up)
- Entraînement de l'air dans l'eau
- Génération de turbulence
- Plusieurs types de macro-structures cohérentes sont observées dans les vagues déferlantes



Zhang and Sunamura (1994)



Le 13 septembre 2009...

Un mail et...

Subject: Splotch
From: "Sarhou Arthur" <sarhou@enscbp.fr>
Date: 13/09/2009 11:52
To: "Lubin Pierre" <lubin@enscbp.fr>



Vortices, maaannn

<http://www.youtube.com/watch?v=7B0hDajH0m4>

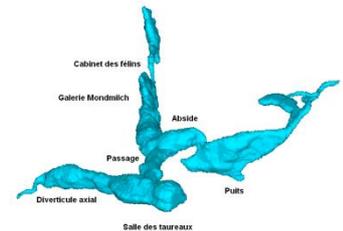
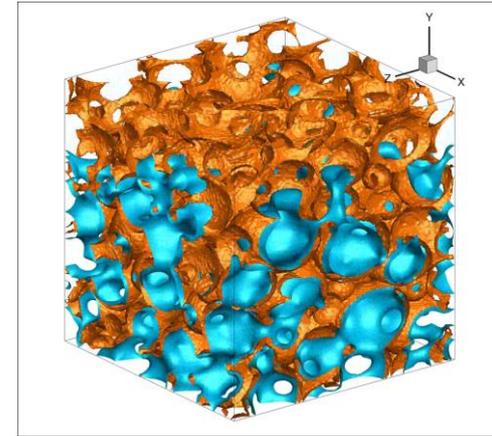


[Lien Youtube](http://www.youtube.com/watch?v=7B0hDajH0m4)

- Structures tourbillonnaires inhabituelles complètement 3D
- Tubes d'air dans la direction de l'écoulement principal
- Ces filaments s'étirent et connectent le splash-up et la poche principale d'air
- Aucune étude académique expérimentale ou numérique

Thétis - contexte

- **Développé à l'I2M depuis 20 ans** (<http://thetis.enscbp.fr>).
- **Code à triple usage**
 - Recherche
 - Industrie
 - Enseignement
- **Environnement multiple**
 - Du PC au supercalculateur
 - S'appuie sur la structure pyramidale du calcul intensif
 - Linux et Windows
 - Plusieurs compilateurs (Intel, GNU, PGI)
 - Plusieurs bibliothèques MPI (OpenMPI, MPT, intel, Bull)
 - Documenté, interfacé
 - Contexte de vérification / validation
- **Outil d'une équipe**
 - +100 ACL depuis 5 ans s'appuyant sur Thétis
 - Projets région Aquitaine (2007, 2012), ANR (2+2), PE (2), coll. institutionnelles et industrielles (ARCELOR, SNECMA, CEA, etc.), projet Lascaux
- **Et au-delà**, exemples d'utilisation passés ou présents :
 - SIAME, LEMTA, IMFT, ICMCB, LOMC, P', LTN, GEPEA, etc.



Thétis - équations / méthodes

- **Navier-Stokes incompressible**, modèle 1-fluide, LES
- **Reconstruction de l'interface** air/eau par VOF-PLIC
- **Couplage vitesse/pression**
 - Étape de prédiction : éq. vectorielle
 - Étape de correction : éq. d'Helmholtz à coeff. variable
- Maillages structurés par blocs, **volumes finis**, ordre 2
- **Solveurs**
 - Étape de prédiction : BiCG, préconditionnement Jacobi diagonal (Thétis)
 - Étape de correction : CG, préconditionnement Multigrille (**Hypre**)

Calcul Parallèle – historique / objectifs / moyens

- **À partir de 2005**
 - démocratisation des clusters et explosion des moyens de calcul (en 2007 CINES-jade)
 - → développement de la version parallèle
- **Objectifs**
 - réduire le temps de calcul → vrai jusqu'à un certain point
 - augmenter la taille des problèmes
- **Moyens** : s'appuyer sur la structure pyramidale des ressources
 - Cluster de laboratoire → projets région Aquitaine
 - Mesocentre (Avakas) → MCIA
 - GENCI (Jade, Titane, Curie) → quelques Mh CPU / an
 - PRACE (Curie)
 - Preparatory Access PA2012
 - Regular call 2013 (13 Mh CPU)



Calcul Parallèle – approche choisie, évolution

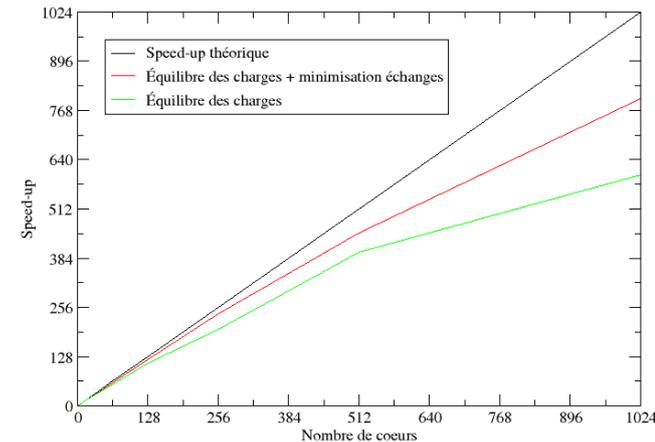
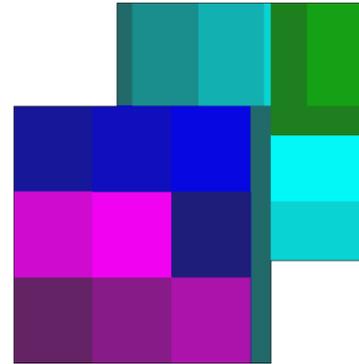
- **Plusieurs possibilités** : OpenMP, MPI, GPU
- **Objectif principal** est d'augmenter la qualité des simulations de problèmes multi-échelles par l'augmentation du maillage
 - augmentation de la mémoire utilisée
 - nécessité de répartir la mémoire sur plusieurs nœuds
 - EDP, dépendance spatiale de la solution
 - MPI (échanges explicites de messages entre nœuds)
 - Du PC au supercalculateur
- **Stratégie payante**, code de production sur qq dizaines de millions de points
- **Extension récente** à 10^9 points (PRACE), mais :
 - Problèmes connexes de transferts de données / stockage / visualisation
 - Les algorithmes/développements/codes prennent du retard sur la puissance de calcul disponible
 - Augmentation des cœurs dans le nœud → MPI / OpenMP (// isme de boucle)

Calcul Parallèle – stratégie de développement

Thétis = Résolution d'EDP

Structure du code, modèles, schémas → I2M

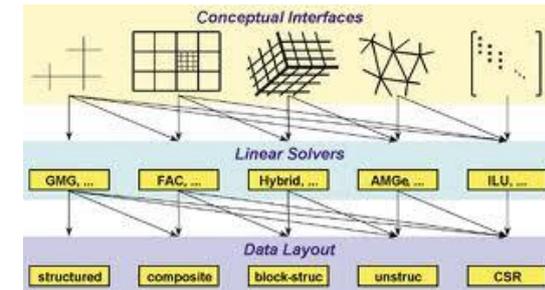
- Partitionnement du domaine
 - Répartir la charge
 - Minimiser les communications
- Discrétisation
- Échanges MPI
- I/O



Solveurs → I2M + Hypre

- BiCGStab + Jacobi → I2M (produits mat-vec, produits scalaires)
- CG + préconditionnement Multigrille → Hypre (Livermore)

Scalabilité forte : nombre de points du maillage total constant, on augmente le nombre de cœurs → *attente d'une réduction linéaire du temps de calcul avec le nombre de cœurs*

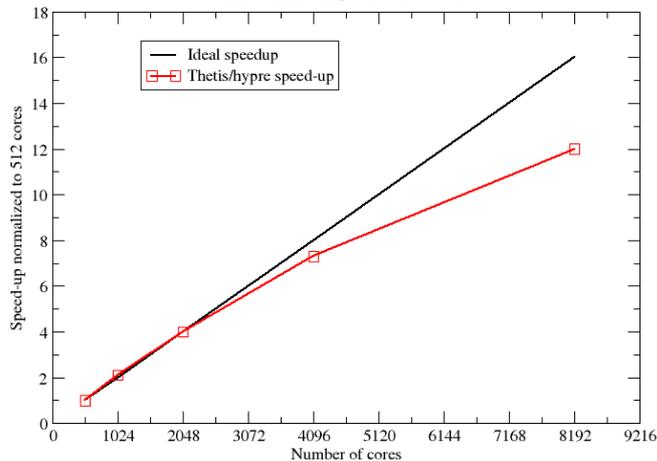


Scalabilité faible : nombre de point constant par cœur, on augmente le nombre de cœurs et donc la taille globale du problème → *attente d'un temps de calcul constant ou linéaire*

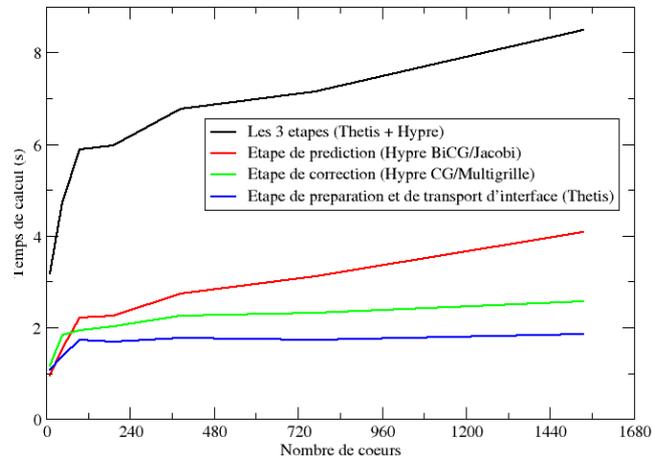
Calcul Parallèle - performances

- **Avakas (MCIA)** : nœuds Intel Westmere à 12 cœurs, 3 168 cœurs
- **Curie (TGCC)** : nœud Intel Sandy Bridge à 16 cœurs, 80 640 cœurs

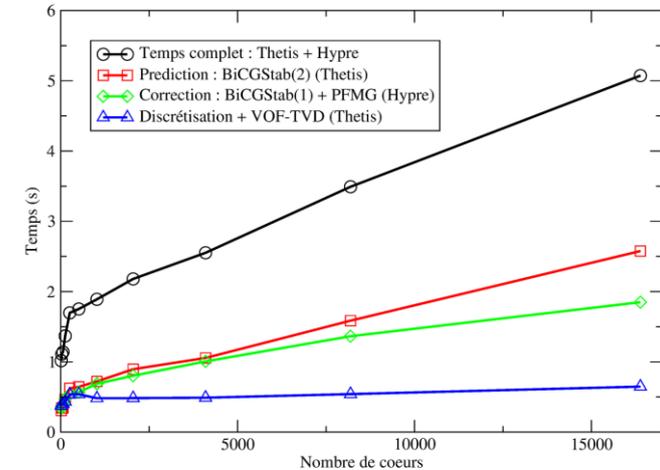
Thétis, Strong Scalability on Curie
540 million mesh cells, from 512 to 8192 cores



Scalabilité faible de Thétis/Hypré sur Avakas
50^3 cellules par cœur, jusqu'à 1536 cœurs, 200 millions de cellules



Scalabilité Thétis + Hypré (40^3 cellules par cœur)
Jusqu'à 1,130 milliard de points et 16384 cœurs.

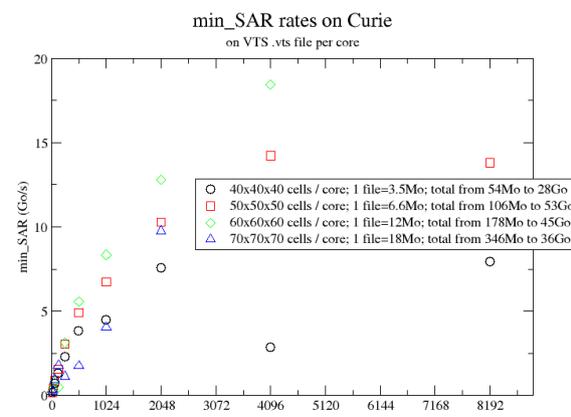
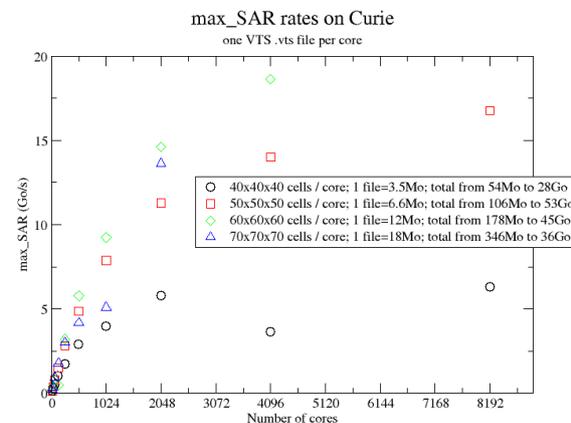


I/O - performances POSIX

- 10 millions de points, 400Mo de données, OK par 1 processeur, mais inélegant
- Au delà, besoin d'écriture //
 - POSIX : 1 fichier / processus MPI, des milliers de fichiers à visualiser, logiciel de visualisation adéquat
 - MPI IO : 1 seul fichier pour tous les processus, bibliothèques spécialisées au dessus de MPI IO, HDF5, netCDF, etc.

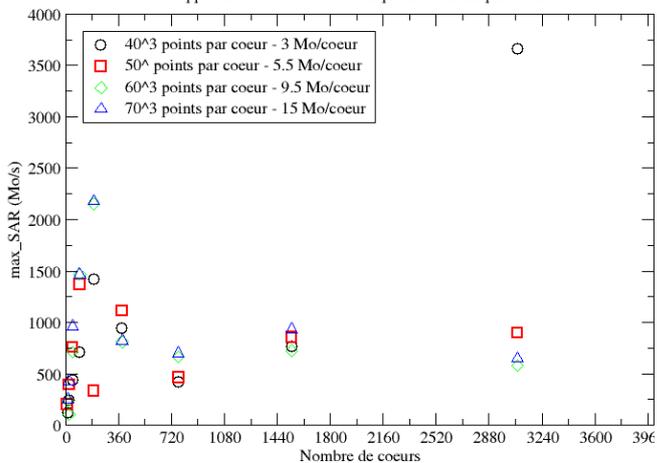
• Performances I/O POSIX

- p cœurs ; chaque cœur écrit N Mo données dans un fichier séparé en T_i s
- Débit soutenu agrégé
 - $\text{max_SAR} = \text{somme}(N/T_i)$
 - $\text{min_SAR} = N.p / \text{max}(T_i)$



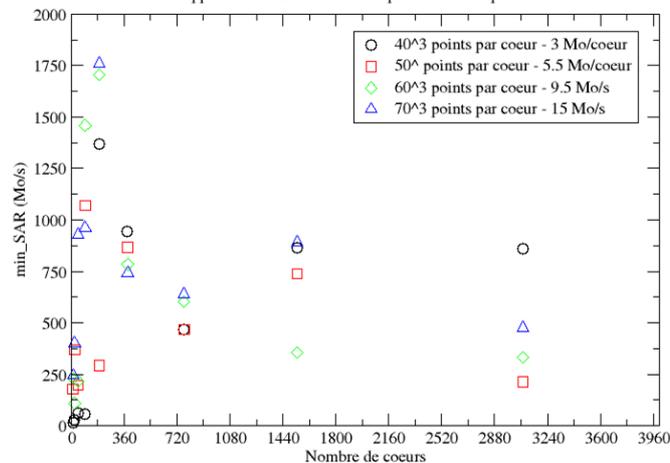
Débit soutenu agrégé maximum (max_SAR) sur Avakas

Approche POSIX - Nombre de points constant par coeur



Débit soutenu agrégé minimum (min_SAR) sur Avakas

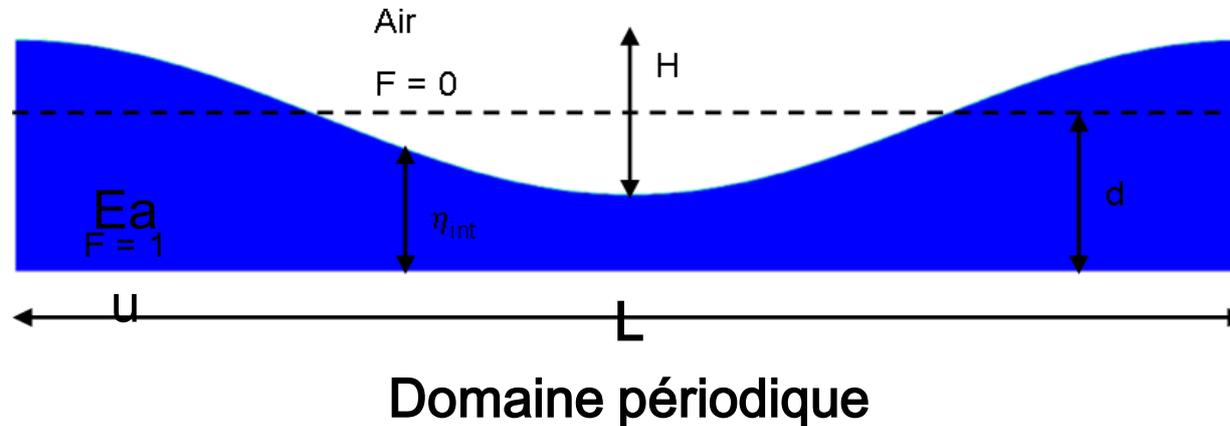
Approche POSIX - Nombre de points constant par coeur



Transferts de données / Visualisation

- Simulation de 86 millions de points sur 576 cœurs (Avakas)
→ 1 To → 60-80Mo/s → 4h de transfert
- Simulation de 600 millions de points sur 4096 cœurs (Curie)
→ 8 To → 30-40Mo/s (plusieurs scp en //) → 62h de transfert au mieux
- Stockage (plusieurs dizaines de To le temps du traitement, de l'écriture des publications)
- Post-traitement // local (Paraview)
- Post-traitement à distance
- Tout visualiser ?
 - Visualisation exploratoire
 - Visualisation sélective

Le déferlement d'une onde sinusoïdale instable est contrôlée par deux paramètres



Cambrure initiale $\frac{H}{L}$ Paramètre de dispersion $\frac{d}{L}$

➔ Description du spectre continu des types de déferlement

On s'intéresse :

- Déferlement plongeant
- Identification et caractérisation des filaments de vortex aérés
- Mécanismes de création des filaments

Visualisation – animation 1

Identification des filaments

- Simulation de 86 millions de points sur Avakas (MCIA)
- 576 processeurs ; + 100 000 fichiers .vts
- visualisation avec Paraview sur 16 cœurs ; convert, montage, mencoder

[Lien video](#)



Plunging Breaking Waves, generation and evolution of aerated vortex filaments.

The evolution of the coherent vortex filaments underneath the breaking wave is visualized using the Q-criterion (green isosurface $Q=1$), to identify the vortex envelopes, and the blue phase function isosurface $C=0.5$, showing the air entrainment. Shown is a 3D view under the breaking wave, between $t=0.1156$ s and 0.2676 s. The frame rate is 15 fps.

Movie: Stéphane Glockner & Pierre Lubin



Visualisation – animation 2

Isolation d'un filament

- Visualisation exploratoire, difficile en raison du caractère chaotique de l'écoulement et de sa forte aération
- Isolation d'un filament pour étudier le mécanisme de génération

[Lien video](#)



Plunging Breaking Waves, generation and evolution of aerated vortex filaments.

The generation and evolution of a single aerated vortex filament is visualized using the phase function isosurface. In practice, $C = 0.5$ is used to characterize this free-surface, but we show $C=0.9$ so surrounding bubbles and ejected droplets from the splash-up are erased from the view for an easier identification. Shown is a 3D strip extracted from the whole numerical domain, between $t=0.1043$ s to 0.2419 s. The frame rate is 25 fps.

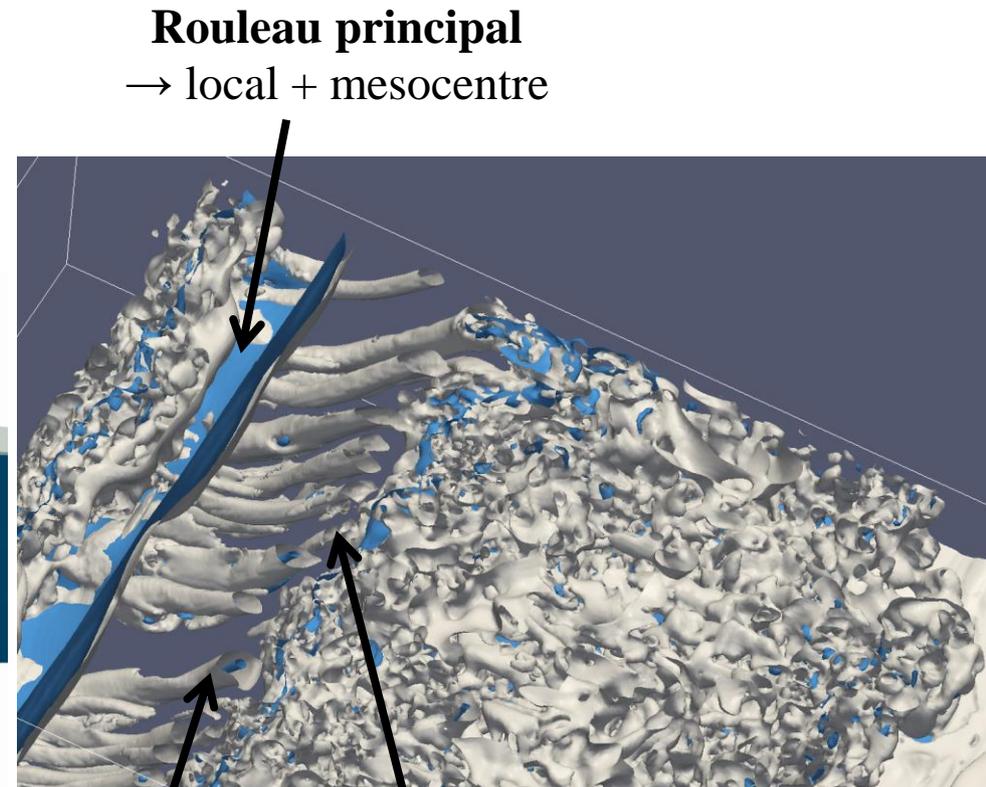
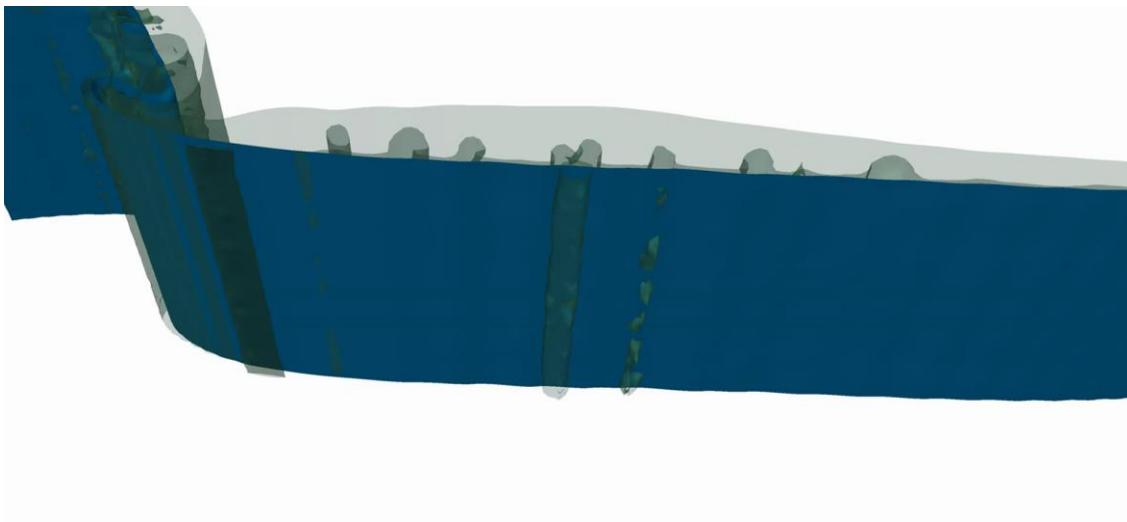
Movie: Stéphane Glockner & Pierre Lubin



Intérêt du calcul intensif, de l'utilisation de la structure pyramidale des moyens

Simulation du déferlement 2004,
500 000 points, séquentiel, 2 mois

[Lien video](#)



Rouleau principal
→ local + mesocentre

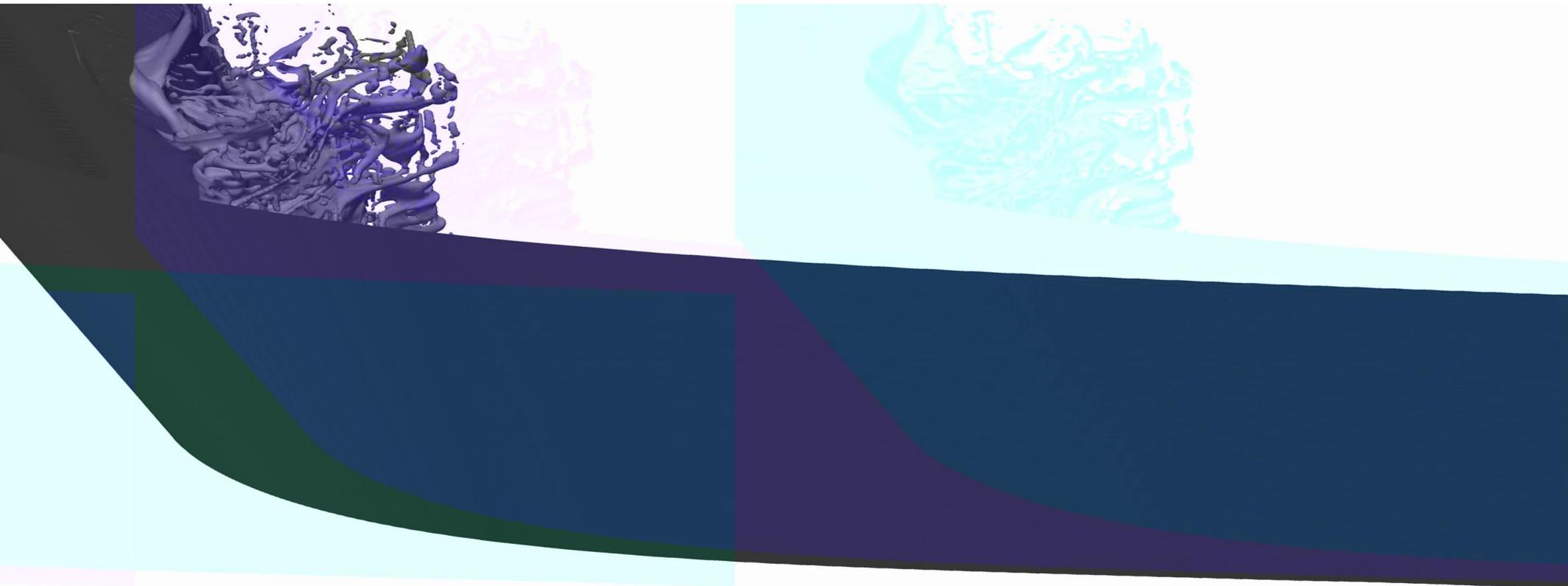
Filaments, niveau grossier
→ mesocentre / GENCI

Filaments, niveau fin
→ PRACE

Visualisation – animation 2

- Nécessité d'augmenter la résolution en maillage
 - Domaines plus grands
 - Capturer les filaments les plus fins qui se désagrègent
 - Toutes les structures turbulentes sont-elles aérées ?
- Simulation de 655 millions de points sur Curie, 4 096 processeurs ; + 1 000 000 fichiers .vts

[Lien video](#)



Conclusion - Perspectives

- Évolution d'un outil de calcul, du PC aux calculateurs européens
 - Tout doit être parallèle : calcul, IO, transferts, stockage, visualisation
 - Constante adaptation aux évolutions matérielles (many cores, ...)
 - Evolution des méthodes numériques (s'adapter aux machines, aux solveurs disponibles, traitement de l'interface air/eau)
- Apport du calcul intensif pour une meilleure description et compréhension du déferlement
- **Vers l'expérimentation numérique 3D pour l'environnement (Déferlement des vagues, Mascaret, Tsunami)**
 - écoulements turbulents, au large spectre d'échelles spatio-temporelles
 - recours nécessaire au calcul intensif
 - approche Navier-Stokes 3D de plus en plus réaliste

Objectifs

- Comprendre/expliquer/prédire/anticiper ces phénomènes
- Alimenter finement les modèles 2D à plus grande échelle (côte, mer, océan)