

Calcul haute performance en transfert radiatif

Une nouvelle méthode déterministe pour le transfert radiatif a été développée sur maillage cartésien en 2D. L'intensité radiative grise (moyennée en fréquence) est projetée sur une base d'harmoniques sphériques. Le système hyperbolique résultant est discrétisé par un schéma de Godunov avec flux numérique préservant la limite de diffusion Rosseland. Le coût intrinsèquement élevé du solveur est compensé par une programmation optimisée pour l'exécution massivement parallèle sur supercalculateur hybride (CPU – Central Processing Unit – multicœurs et GPGPU – General-purpose Processing on Graphics Processing Units). Des simulations opérant jusqu'à 3,5 TFlop/s sur 900 cœurs Xeon Core2Quad ont permis de quantifier le nombre d'harmoniques sphériques nécessaires pour atteindre la convergence angulaire sur quelques problèmes modèles et établir des solutions de référence.

V. Arslan • P. Carribault • C. Enaux • H. Jourden • M. Pérache CEA - DAM Île-de-France

Modèle P_N

En transfert radiatif, l'approximation *harmoniques sphériques* consiste à projeter l'intensité radiative I sur une base tronquée de N harmoniques sphériques ($N \geq 1$), conduisant à un système hyperbolique appelé *modèle P_N* [1]. Naturellement précis pour décrire les rayonnements faiblement anisotropes, ce modèle peut restituer les fortes anisotropies pour N grand. En contrepartie, le nombre d'équations E du modèle croît avec le carré de N en 2D (tableau 1). Ce coût élevé avait limité les simulations 2D aux valeurs $N = 1, 2, 3$ jusqu'au début des années 2000. La montée en puissance des moyens de calcul offrant des possibilités nouvelles, quelques équipes cherchent depuis peu à mener des simulations 2D à convergence angulaire [2, 3].

	1D	2D	3D
N	$E(N) = N+1$	$E(N) = [(N+1)(N+2)]/2$	$E(N) = (N+1)^2$
1	2	3	4
3	4	10	16
5	6	21	36
9	10	55	100
15	16	136	256
31	32	528	1024
99	100	5050	10000

Tableau 1. Nombre E d'équations du modèle P_N en fonction du nombre d'harmoniques sphériques N , en dimension 1, 2 et 3.

Schéma numérique « Asymptotic-Preserving »

Le modèle P_N comporte des termes sources qui modélisent les interactions entre matière et rayonnement. Dans les milieux optiquement épais, ces termes sont *raides* et le modèle P_N tend asymptotiquement vers le modèle de diffusion Rosseland. Fondamental, ce régime de diffusion doit pouvoir être restitué par la méthode numérique : nous parlons alors de schéma *Asymptotic-Preserving* (AP). À la différence des travaux de [2] ou [3], nous avons choisi d'utiliser une méthode de type Godunov pour laquelle nous avons développé un nouveau flux numérique AP [4]. Sans surcoût, cette méthode permet de passer continûment du régime transport au régime diffusion, indépendamment de la finesse du maillage.

Pour illustrer l'apport de notre contribution, nous comparons sur la figure 1 les résultats numériques fournis par un flux classique (non AP) avec ceux donnés par le flux AP lors de la simulation d'une onde de Marshak ([5], voir J.I. Castor). À coûts de calcul équivalents, les résultats obtenus par le flux AP coïncident avec la solution de référence. Nous vérifions que dans un milieu optiquement épais, le modèle P_1 est suffisant pour restituer le rayonnement faiblement anisotrope.

Dans un milieu transparent, la forte anisotropie du rayonnement nécessite d'employer plusieurs harmoniques sphériques. La figure 2 montre qu'il faut utiliser au moins quinze harmoniques pour atteindre la convergence du facteur d'Eddington lors de la simulation 1D de l'onde radiative d'Olson, Auer & Hall ([5], voir J.I. Castor). D'autres simulations 2D ont conduit à la même conclusion.

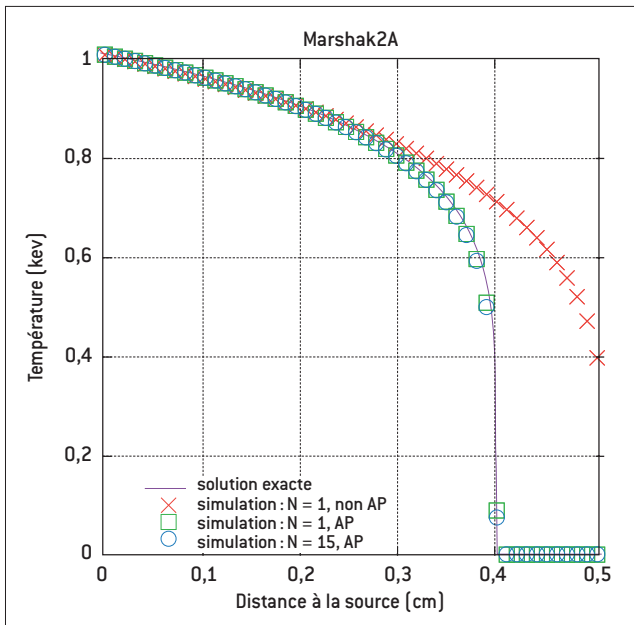


Figure 1. Test Marshak-2A : apport d'un schéma de Godunov Asymptotic-Preserving (AP) pour le transport P_N en régime diffusion.

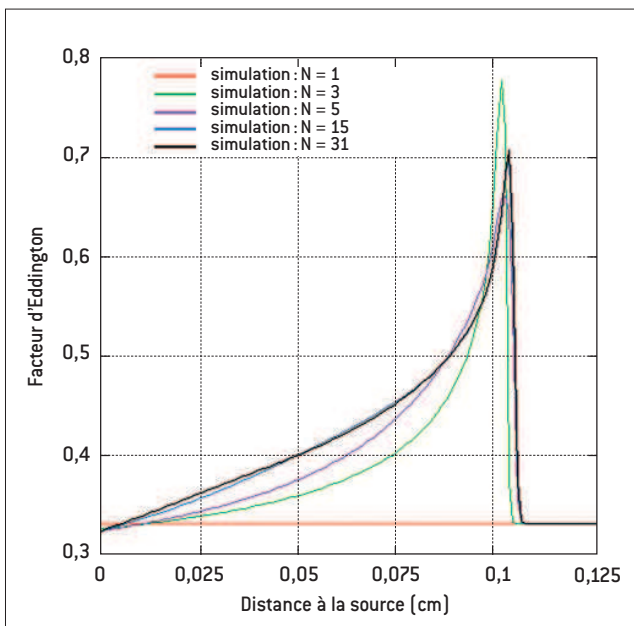


Figure 2. Test Olson-Auer-Hall : convergence angulaire du modèle P_N en régime transport.

Calcul Haute Performance

Chaque itération en temps d'une simulation numérique d'un modèle P_{15} consiste à calculer un flux numérique de $E = 136$ composantes sur chaque face de chaque cellule du maillage. Compte tenu du schéma utilisé, le calcul d'un flux numérique revient à effectuer deux produits [matrice pleine] x [vecteur] de taille E . Un tel

solveur, très lourd *a priori*, se prête idéalement à l'optimisation HPC (High Performance Computing) car la plupart des opérations effectuées sont indépendantes, régulières et nécessitent peu d'accès à la mémoire. Un soin particulier a donc été porté à la programmation et l'optimisation du code P_N .

Concernant les opérations algébriques, les vecteurs ont été regroupés par matrices pour remplacer les produits [matrice pleine] x [vecteur] par des produits [matrice pleine] x [matrice pleine]. Nous avons alors testé deux scénarios d'optimisation des multiplications matricielles :

- > calcul sur CPU avec la bibliothèque Intel MKL (Mathematical Kernel Library) ;
- > calcul sur GPGPU (processeur graphique) avec la bibliothèque Nvidia CuBLAS.

Le calcul sur 4 cœurs Xeon Nehalem s'avère être globalement aussi performant que l'exécution sur 1 GPGPU Tesla, accélérant d'un facteur 10 la version initiale du code. Par ailleurs, nous avons mis en place un parallélisme *mixte*, incluant mémoire distribuée MPI entre les sous-domaines et mémoire partagée OpenMP au sein d'un sous-domaine. Le code P_N exploite donc pleinement les supercalculateurs de dernière génération, dont les nœuds sont composés de plusieurs cœurs de calcul CPU et GPGPU. En pratique, l'efficacité mesurée dépasse 80 % avec plusieurs centaines de cœurs.

Résultats et perspectives

Les efforts déployés pour l'optimisation du code P_N ont permis de mener des simulations complexes de transfert radiatif gris 2D avec les modèles P_{13} , P_{15} et P_{17} (3.5 Teraflops effectifs sur 900 cœurs Xeon Core2Quad). La comparaison des solutions obtenues montre que le modèle P_{15} constitue une approximation déterministe raisonnablement convergée de l'opérateur de transport sur plusieurs problèmes modèles. Le code P_N fournit donc des solutions de référence inédites, utiles par exemple en comparaison avec des solveurs Monte-Carlo.

RÉFÉRENCES

[1] G.C. POMRANING, "The equations of radiation hydrodynamics", Pergamon Press (1973).
 [2] R.G. MC CLARREN, T.M. EVANS, R.B. LOWRIE, J.D. DENSMORE, "Semi-implicit time integration for P_N thermal radiative transfer", *J. Comp. Phys.*, **227**, p. 7561-7586 (2008).
 [3] G.L. OLSON, "Second order time evolution of P_N equations for radiation transport", *J. Comp. Phys.*, **228**, p. 3072-3083 (2009).
 [4] C. ENAUX, "Analyse mathématique et numérique d'un modèle multifluide multivitesse pour l'interpénétration de fluides miscibles", Thèse de l'École Centrale Paris (2007).
 [5] F. GRAZIANI, "Computational methods in transport: verification and validation", *Lecture Notes in Comp. Sci. and Eng.*, **62**, Springer (2008).