

RÉSUMÉ DE THÈSE

Modélisation numérique et calcul haute performance de transport de sédiments

Présenté par

Jean-Baptiste KECK

Thèse dirigée par **Georges-henri COTTET**, UGA
codirigée par **Iraj MORTAZAVI**, CNAM
et encadrée par **Christophe PICARD**, CNRS

préparée au sein du **Laboratoire Laboratoire Jean Kuntzmann**
dans l'**École Doctorale Mathématiques, Sciences et technologies de l'information, Informatique**

Thèse soutenue publiquement le **13 décembre 2019**,
devant le jury composé de :

Monsieur GEORGES-HENRI COTTET

PROFESSEUR, UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES,
Directeur de thèse

Monsieur EMMANUEL JEANNOT

DIRECTEUR DE RECHERCHE, INRIA BORDEAUX SUD-OUEST,
Rapporteur

Monsieur FLORIAN DE VUYST

PROFESSEUR, UNIVERSITÉ DE TECHNOLOGIE DE COMPIÈGNE,
Rapporteur

Monsieur IRAJ MORTAZAVI

PROFESSEUR, CNAM - PARIS,
Codirecteur de thèse

Monsieur CHRISTOPHE PICARD

MAÎTRE DE CONFÉRENCES, CNRS, UNIV. GRENOBLE ALPES,
Examineur

Madame VALÉRIE PERRIER

PROFESSEUR, CNRS, UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES,
Examineur

Madame DELPHINE DEPEYRAS

DOCTEUR-INGÉNIEUR, SOCIÉTÉ INGELIANCE - MÉRIGNAC,
Examineur

Monsieur ECKART MEIBURG

PROFESSEUR, UNIV. DE CALIFORNIE - SANTA BARBARA, USA,
Examineur



1 Introduction

La dynamique des écoulements sédimentaires est un sujet qui concerne de nombreuses applications en géophysiques, qui vont des questions d'ensablement des estuaires à la compréhension des bassins sédimentaires. Le sujet de cette thèse porte sur la modélisation numérique à haute résolution de ces écoulements et l'implémentation des algorithmes associés sur accélérateurs.

Les écoulements sédimentaires font intervenir plusieurs phases qui interagissent, donnant lieu à plusieurs types d'instabilités comme les instabilités de Rayleigh-Taylor et de double diffusivité [2]. Les difficultés pour la simulation numérique de ces écoulements tiennent à la complexité des interactions fluides/sédiments qui font intervenir des échelles physiques différentes. En effet, ces interactions sont difficiles à traiter du fait de la grande variabilité des paramètres de diffusion dans les deux phases et les méthodes classiques présentent certaines limites pour traiter les cas où le rapport des diffusivités, donné par le nombre de Schmidt, est trop élevé.



Estuaire de la Seine, Le Havre, France - 23 Février 2019.

Image adaptée de [Sentinel Hub](#) sous licence [CC BY 2.0](#).

Cette thèse étend les récents résultats [6] obtenus sur la résolution directe de la dynamique du transport d'un scalaire passif à haut Schmidt sur architecture hybride CPU-GPU et valide cette approche sur les instabilités qui interviennent dans des écoulements sédimentaires. Une grosse partie de ce travail a consisté en l'implémentation d'une librairie de calcul haute performance destinée à la simulation numérique directe d'écoulements fluides.

2 Problématique

Les processus de sédimentation sont complexes et encore mal connus. La compréhension des mécanismes de décantation est la clé afin de pouvoir prédire où les sédiments vont se déposer.

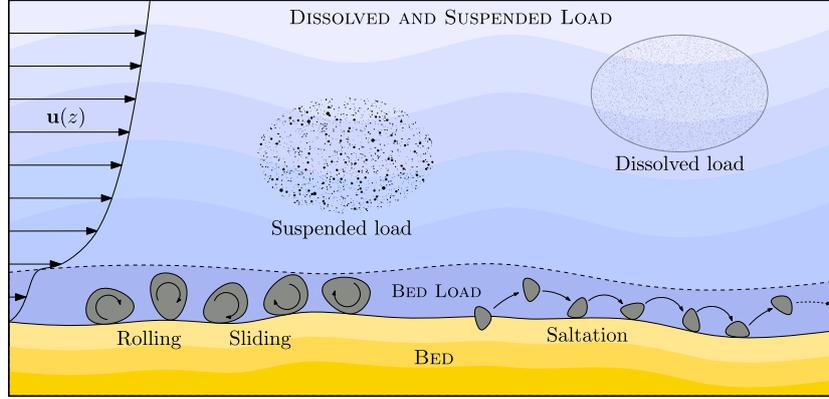


FIGURE 1 – Illustration des mécanismes de transport sédimentaire

Pour de très fines particules, argile ou limons, ces phénomènes sont difficiles à observer à grande échelle aussi bien dans la nature qu'en laboratoire. Le recours à la simulation numérique permet d'effectuer une exploration numérique de cette physique sédimentaire malgré ces difficultés. Au cours des dernières décennies, la plupart des modèles de sédimentation océanographique se sont appuyés sur la sédimentation de Stokes comme principal mécanisme de transfert des sédiments hors des panaches fluviaux. La double diffusivité étant connue pour amplifier le flux vertical de sédimentation [4], de nombreux modèles prenant en compte cette double diffusivité ont ensuite été proposés [5].

Nous considérons un processus sédimentaire où de petites particules avec une inertie négligeable, considérées comme un continuum, se déposent initialement avec une vitesse de sédimentation V_{st} , considérée comme constante, au-dessus d'une couche d'eau salée plus dense.

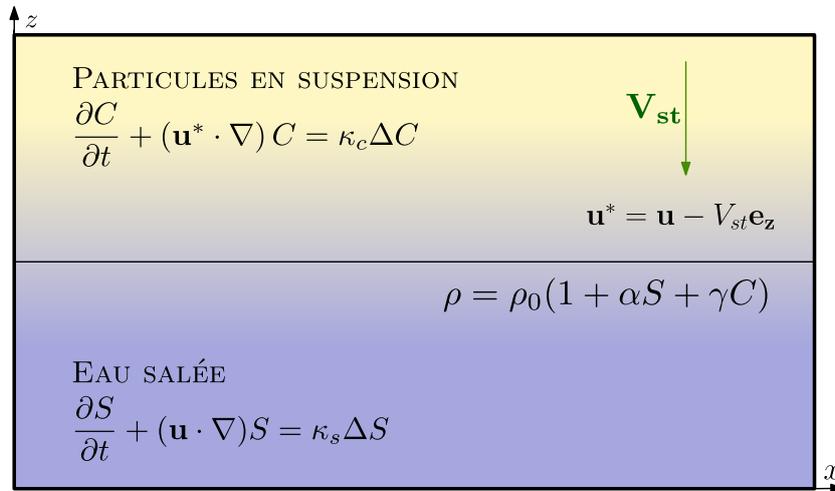


FIGURE 2 – Configuration de sédimentation étudiée dans la thèse.

Lorsqu'une couche d'eau douce chargée en particules s'écoule au-dessus d'eau saline claire de densité plus élevée, des instabilités de type Rayleigh-Taylor et de digitation double diffusivité peuvent survenir. Ces instabilités sont connues pour modifier considérablement la dynamique du problème et contribuent grandement à la vitesse effective de sédimentation [2].

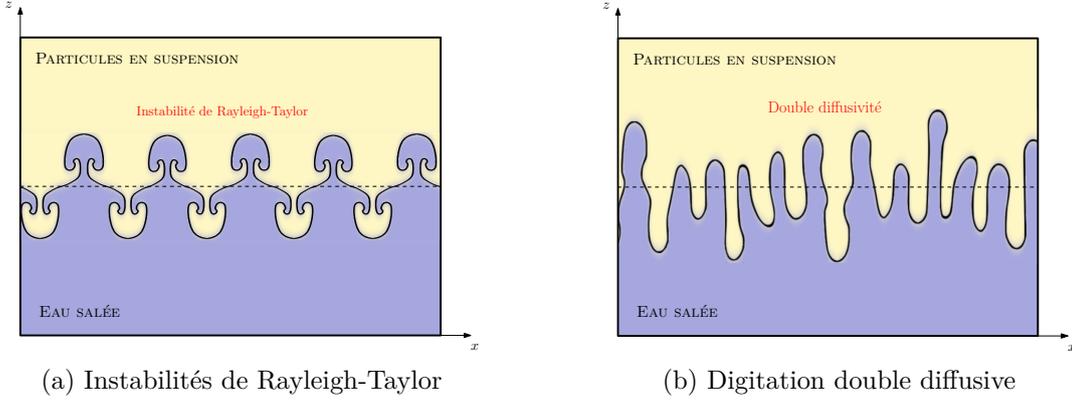


FIGURE 3 – Croquis des différents types d'instabilités possibles

Dans le modèle étudié, la concentration de particules C et la salinité S sont transportées dans un fluide porteur de vitesse \mathbf{u} et vorticité $\boldsymbol{\omega}$, et contribuent localement à la densité du fluide ρ . Le fluide est modélisé par les équations de Navier-Stokes incompressibles à densité variable dans leur approximation de Boussinesq, en formulation vitesse-vorticité. Dans l'approximation de Boussinesq, la vraie densité n'est conservée que dans le terme de force extérieure (poussée d'Archimède). Les deux espèces additionnelles sont modélisées par des équations de transport-diffusion. Il existe donc un couplage bidirectionnel entre le fluide et les deux espèces transportées. Le modèle, une fois adimensionné, est le suivant :

$$\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{u} \quad (1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1b)$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{\omega}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{\omega} - (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \Delta \boldsymbol{\omega} - \nabla \times (R_s S + C) \mathbf{e}_z \quad (1c)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) S = \frac{1}{S_c} \Delta S \quad (1d)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C - V_p \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{1}{\tau S_c} \Delta C \quad (1e)$$

Les paramètres adimensionnés correspondant à des tailles de grains de $2\mu\text{m}$ et à une fraction volumique de 1% sont les suivants :

— **Vitesse de sédimentation** : $V_p \simeq 0.04$

— **Nombre de Schmidt** : $S_c = \frac{\nu_0}{\kappa_s} \simeq 700$

— **Ratio de diffusivité** : $\tau = \frac{\kappa_s}{\kappa_c} \simeq 25$

— **Ratio de stabilité** : $R_\rho = \frac{\alpha \Delta S}{\beta \Delta C} \simeq 2$

Le nombre de Schmidt correspond au ratio entre la viscosité cinématique du fluide et la diffusivité de l'espèce transportée. Le nombre de Schmidt entre la salinité et l'eau est ici de 700, et les sédiments diffusant $\tau = 25$ fois moins que le sel, le nombre de Schmidt entre les sédiments et l'eau peut donc être obtenu par la relation $\nu_0/\kappa_c = \tau S_c \simeq 17500$. Avec de telles valeurs, on parle d'écoulements à haut Schmidt.

Un nombre de Schmidt supérieur à 1 indique que les échelles que va développer l'espèce transportée seront plus fines que la plus petite échelle du fluide, le ratio étant de l'ordre de la racine carrée du nombre de Schmidt [1]. En trois dimensions, à cause des besoins de discrétisation accrus que nécessite l'agent transporté, le coût de calcul d'une DNS avec transport passif est donc au moins proportionnel à \sqrt{Sc}^3 . En pratique avec une méthode numérique d'advection standard, le pas de temps est contraint par une condition CFL et ce coût devient même proportionnel au carré du nombre de Schmidt. Ceci devient très problématique lorsque le nombre de Schmidt explose comme dans la configuration actuelle.

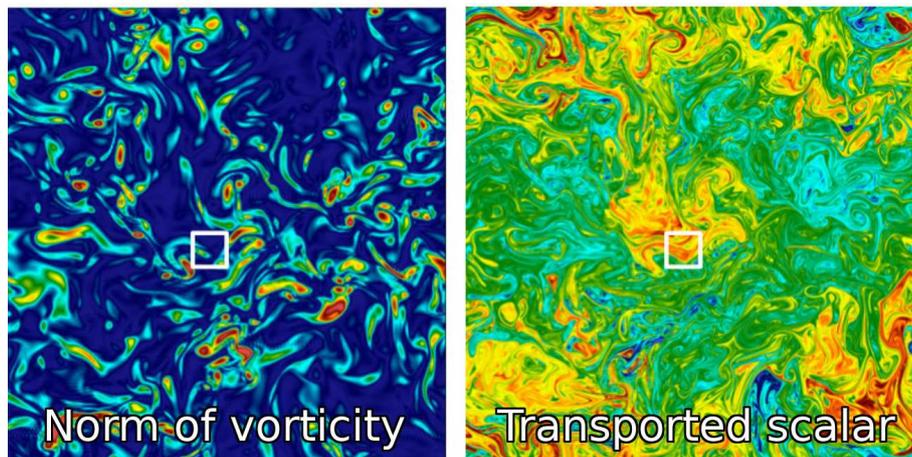


FIGURE 4 – Transport d'un scalaire passif à Schmidt $Sc = 125$ [6]

En raison des nombres de Schmidt impliqués et les fines échelles spatiales associées pour la salinité et la concentration des particules, les simulations numériques avec des valeurs excessivement grandes de Sc ou τ ne peuvent pas être réalisées. Avec $\tau = 25$, des simulations jusqu'à $S_c = 70$ en 2D et $S_c = 7$ en 3D ont été effectuées par Meiburg et ses collaborateurs [2], ce qui est encore loin de la vraie valeur physique : $S_c = 700$. Accéder à des nombres de Schmidt plus élevés constitue le défi actuel pour être en mesure de comprendre pleinement les processus sédimentaires qui se produisent naturellement le long de nos côtes.

Le problème étant par essence multi-échelle, une approche à plusieurs niveaux avec un rapport de discrétisation correspondant à \sqrt{Sc} dans chaque direction peut être envisagée. Même en deux dimensions, cela nécessiterait d'importantes ressources de calcul et le développement d'un code de calcul numérique efficace. Ce travail vise donc à réaliser des simulations d'écoulements sédimentaires à nombre de Schmidt élevé en utilisant des méthodes numériques adaptées dans un contexte de calcul haute performance.

3 Développement du code de calcul HySoP

Le code de calcul développé dans cette thèse part du code de calcul fluide HySoP (**H**ybrid **S**imulation with **P**articles) initialement développé par Jean-Matthieu Etancelin durant sa thèse [3]. Dans cette librairie, l'implémentation est complètement décorrélée de la problématique présentée précédemment, chaque problème pouvant être exprimé différemment par une suite d'opérateurs numériques choisis par l'utilisateur. Les méthodes numériques ont été adaptées afin de pouvoir tourner efficacement sur tout type d'accélérateurs et notamment sur GPU.

Deux axes ont été travaillés durant le projet utilisant des technologies spécifiques :

1. Un axe dédié à la performance : la bibliothèque développée se déploie sur des plateformes hybrides accélérateurs/processeur (GPU/CPU) en optimisant le placement mémoire.
2. Un autre axe centré sur l'utilisateur par l'utilisation de graphes d'opérateurs et de représentation symbolique comme outil d'aide à la résolution.

Le projet s'est structuré autour d'une démarche originale de doctorat-conseil permettant l'industrialisation précoce du code de calcul développé et la montée en compétence progressive d'une poignée d'utilisateurs industriels sur des problématiques scientifiques de haute technicité. En un sens, ce projet prépare donc également la simulation numérique de demain par une utilisation adéquate des architectures hybrides GPU/CPU, tout en intégrant des moyens innovants de collaboration entre un industriel et un laboratoire de recherche.

Dans la librairie, toutes les variables sont discrétisées sur des grilles cartésiennes classiques. Ces structures de données sont très régulières en mémoire et permettent d'effectuer des accès en mémoire contigus permettant facilement d'approcher la bande passante mémoire maximale théorique des calculateurs. De plus, la distribution d'une variable sur plusieurs nœuds de calcul peut se faire très simplement par décomposition de domaine.

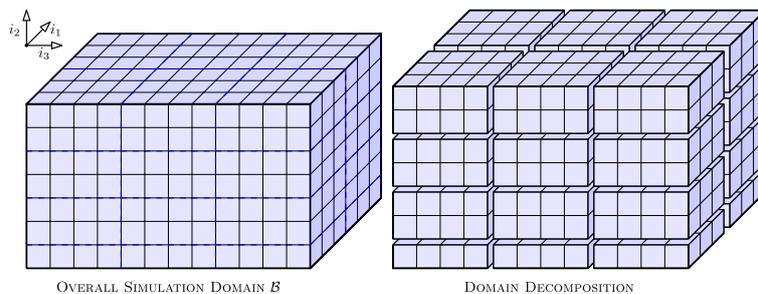
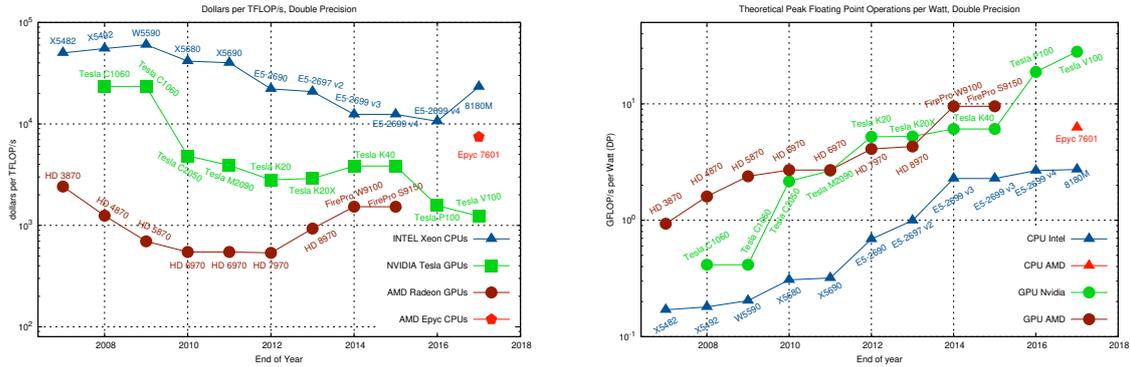


FIGURE 5 – Décomposition de domaine sur 24 nœuds de calcul

La bibliothèque développée se déploie sur des plateformes distribuées hétérogènes et hybrides où chaque nœud de calcul possède des processeurs de calcul classiques (CPU) qui sont possiblement accompagnés d'un ou plusieurs accélérateurs de type GPU ou MIC. Aujourd'hui force est de constater que la puissance de calcul phénoménale que peuvent fournir ces nouvelles architectures est souvent sous utilisée si ce n'est totalement inexploitée par les codes de calculs commerciaux dans le domaine de la dynamique des fluides. Quand bien même un support est proposé il n'est souvent que partiel. Une des raisons évoquées est souvent le manque de mémoire embarquée sur les accélérateurs, ce qui devient de moins en moins vrai, certaines cartes embarquant aujourd'hui jusqu'à 32Go de mémoire.

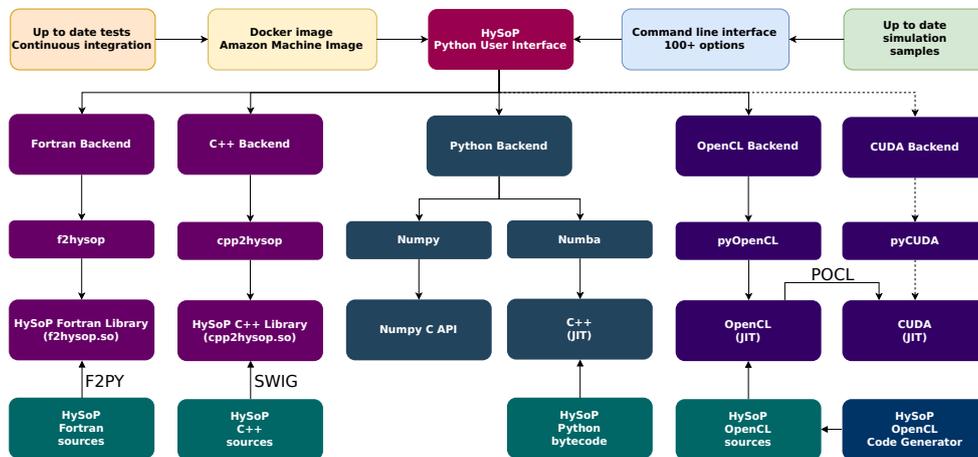


(a) Prix d'un TFLOPS de puissance de calcul (\$) (b) Performance énergétique (GFLOPS/W)

FIGURE 6 – Avantage financier et énergétique du GPU face au CPU.

Pourtant, ces coprocesseurs proposent des avantages en termes de consommation énergétique et de rapport performance/prix très avantageux par rapport aux processeurs classiques. Il n'est pas rare d'obtenir un facteur 10 en termes de TFLOPS/€. L'utilisation de toute cette puissance additionnelle vient au prix de repenser ses algorithmes de résolution numérique et de réaliser une nouvelle implémentation des codes avec une technologie accélérateur-compatible telle que CUDA, OpenCL ou encore OpenMP. Il est alors aisé de comprendre que de convertir plusieurs milliers de lignes de code Fortran ou C++, héritage de plusieurs décennies de développement d'algorithmes numériques optimisés sur CPU, n'est pas chose simple et représente un coût faramineux pour les bases de code existantes.

La force de la librairie HySoP est qu'il s'agit d'un nouveau code de résolution numérique pour le fluide dont le support d'accélérateurs est le fer de lance. La philosophie de la librairie réside dans la description d'une itération temporelle du problème à résoudre par une suite d'opérateurs sur des champs physiques (variables du problème). Dans un sens, HySoP est une boîte d'opérateurs mathématiques adaptés à la physique des fluides. Un opérateur est une interface vers une ou plusieurs implémentations d'opérateurs discrets, chacun écrit dans un langage spécifique. Les implémentations d'opérateurs ne sont pas limitées au langage Python. En effet, la flexibilité du langage permet également d'interfacer des codes précompilés efficaces en C, C++ et Fortran. Le langage permet également l'utilisation de codes parallèles compilés à la volée (JIT) par le biais des technologies OpenCL et Numba.



Une fois que la suite d'opérateurs a été spécifiée par l'utilisateur, la librairie s'occupe de créer un graphe direct acyclique à partir des dépendances en lecture et écriture des variables de chaque opérateur ainsi que de leur dépendance temporelle. L'utilisation de graphes facilite la compréhension du fonctionnement de la librairie de calcul et rend son utilisation plus transparente. Les outils de la théorie des graphes permettent ensuite de déduire un ordre d'exécution des opérateurs. S'en suit une extraction de files d'exécutions indépendantes et la discrétisation des variables, en optimisant les placements mémoires sur les différents types de matériels. L'utilisation de graphes permet également la mise en commun d'une zone mémoire pour les besoins de tableaux temporaires des opérateurs ce qui est très important dans un contexte où la mémoire peut être limitée comme sur les GPUs.

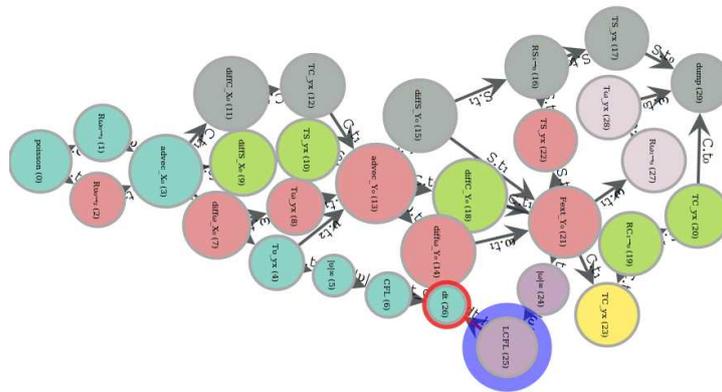


FIGURE 7 – Graphe d'opérateurs obtenu pour le modèle présenté précédemment.

La technologie retenue par la bibliothèque pour l'utilisation des accélérateurs est OpenCL (Open Compute Language). Ce standard ouvert, implémentable par tous, permet d'offrir un support pour tout type de matériel (processeurs, coprocesseurs, puces spécialisées, ...) à l'opposé de CUDA qui est un standard propriétaire ne supportant que des cartes graphiques de marque Nvidia. OpenCL garantit la portabilité du code, mais cela ne signifie en rien une portabilité des performances. La librairie déploie donc toute une série de mesures afin d'extraire un maximum de performance sur chaque architecture cible. Pour chaque opérateur discret compatible OpenCL, cela passe par un framework de génération de variantes d'un même code qui sont ensuite compilés juste à temps et mis en compétition, le meilleur candidat étant sélectionné et mis en cache afin de sauter cette étape possiblement coûteuse lors d'appels ultérieurs.

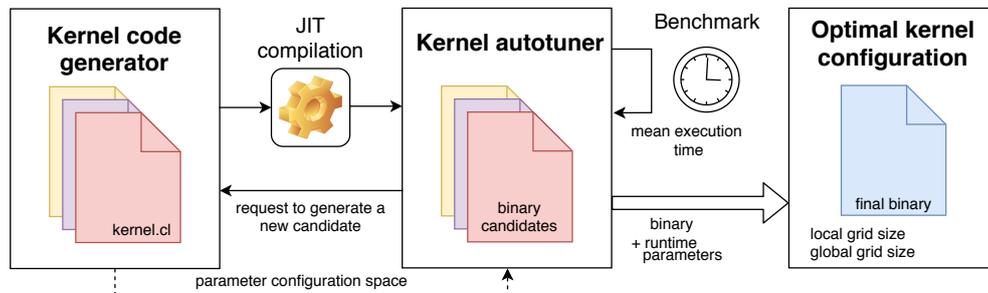


FIGURE 8 – Schéma de fonctionnement du banc d'essais de noyaux de calculs

La technologie OpenCL peut vite repousser l'adoption de la librairie par des utilisateurs peu formés aux technologies sur accélérateurs et au parallélisme en général, qui souhaitent ajouter des fonctionnalités (opérateurs discret) à la librairie. Une des innovations majeures proposées par la librairie vient du fait qu'un utilisateur final ne développera pas de code OpenCL spécifique s'il ne le souhaite pas, via l'utilisation d'expressions symboliques et d'une infrastructure logicielle de génération de code OpenCL, couplé à celui de l'optimisation de code automatique. L'utilisation d'accélérateurs reste totalement transparente, car les opérateurs de transfert mémoire entre CPU et accélérateurs sont également insérés automatiquement par la librairie lors de la génération du graphe d'opérateurs.

La méthode numérique utilisée dans la plupart des simulations est basée sur des différences finies explicites, des méthodes spectrales ou encore la méthode semi-Lagrangienne (particules remaillées). Le pas de temps est adaptatif et les intégrations en temps sont également explicites. Si N est le nombre de points de discrétisation, la complexité algorithmique d'une unique itération avec un tel solveur est donc de $\mathcal{O}(N \log N)$. Le nombre d'itérations total dépend généralement du problème et des méthodes numériques employées (le pas de temps est limité afin d'assurer la stabilité des méthodes). Le transport, réalisé par advection et remaillage particulaire, ainsi que les opérateurs basés sur des différences finies sont résolus direction par direction (splitting directionnel de Strang). Entre chaque direction, une permutation locale de chaque variable en mémoire permet de n'effectuer que des accès contigus en mémoire sur le prochain axe, maximisant la bande passante durant tout l'algorithme.

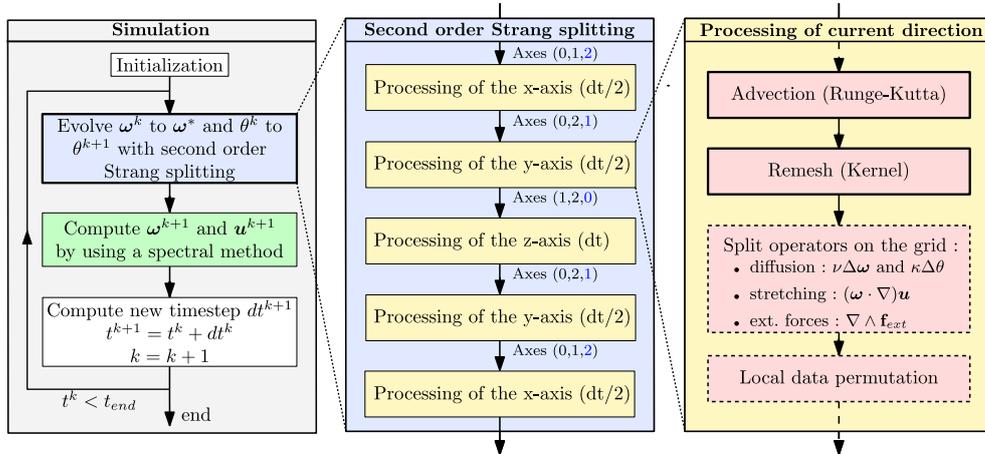


FIGURE 9 – Méthode numérique proposée pour la résolution du modèle

La technologie utilisée pour le calcul distribué est MPI et les opérateurs de redistribution de mémoire entre différents nœuds de calcul sont également créés automatiquement lors de la génération du graphe. Tous les opérateurs discrets ne supportent pas forcément le calcul distribué MPI et en cas d'utilisation dans un contexte distribué, un message clair est affiché à l'utilisateur. Cela fait de la création d'un nouvel opérateur un processus flexible et abordable même pour un utilisateur néophyte. Cela permet par exemple aux utilisateurs d'implémenter simplement leurs propres opérateurs de post-traitement des données afin de l'effectuer durant la simulation, évitant l'étape très coûteuse d'écriture de chaque itération sur disque.

4 Résultats

La méthode numérique proposée est tout d'abord validée sur une simulation d'écoulement turbulent de type Taylor-Green Vortex [7]. On observe une convergence à l'ordre deux en espace. Au niveau des performances, tous les opérateurs nécessaires pour une résolution DNS ont été implémentés en `OpenCL`, ce qui permet de lancer des simulation sur CPU, sur GPU ou sur les deux à la fois. On peut effectuer des simulations de type Navier-Stokes sur des discrétisations allant jusqu'à 16384^2 en 2D et 512^3 en 3D sur une seule carte graphique. Au niveau des temps de simulation, il faut environ 50 ms par itération pour la configuration 2D avec 268 millions d'éléments de discrétisation et environ dix fois plus pour la configuration 3D avec 134 millions d'éléments.

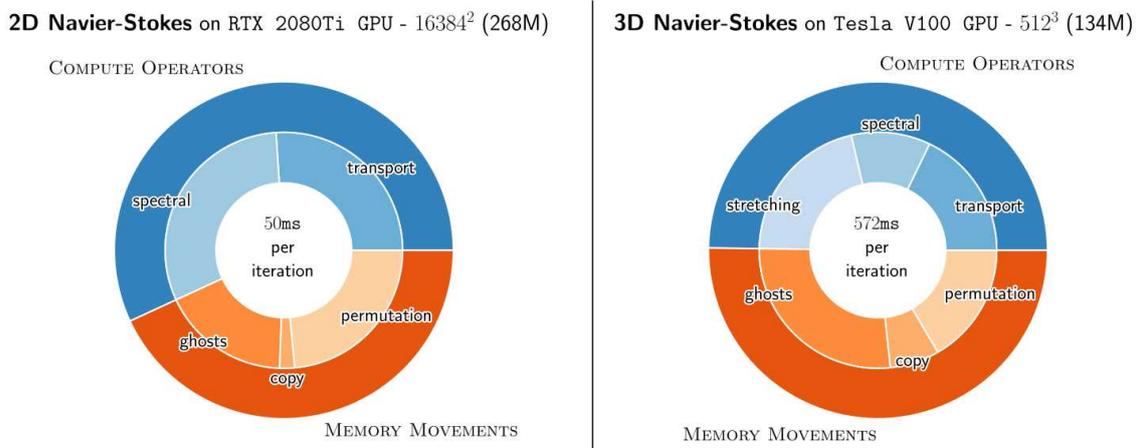


FIGURE 10 – Répartition du temps de calcul par itération

Les simulations d'écoulements sédimentaires réutilisent une grosse partie du solveur précédent ce qui permet de réaliser des simulations tridimensionnelles allant jusqu'à 402 millions d'éléments discrets sur une seule carte graphique ($1537 \times 512 \times 512$), le seul facteur limitant étant la mémoire des GPU (32Go dans le cas présent). La simulation étant plus complexe et la discrétisation étant plus importante, une itération de ce calcul prend environ 10 secondes. Cet écoulement étant plutôt laminaire, le pas de temps n'est contraint que par la stabilité des opérateurs de diffusion.

On retrouve les résultats numériques de Meiburg et collaborateurs [2] qualitativement et quantitativement sur une large gamme de nombres de Schmidt, en 2D et en 3D. Le code permet de monter facilement à des nombres de Schmidt jusqu'à $Sc = 28$, soit quatre fois l'état de l'art précédent. Sur les nombres de Schmidt au-delà de 7, il n'y a plus de résultats numérique à comparer mais l'on constate que l'on retrouve les prédictions théoriques du même auteur.

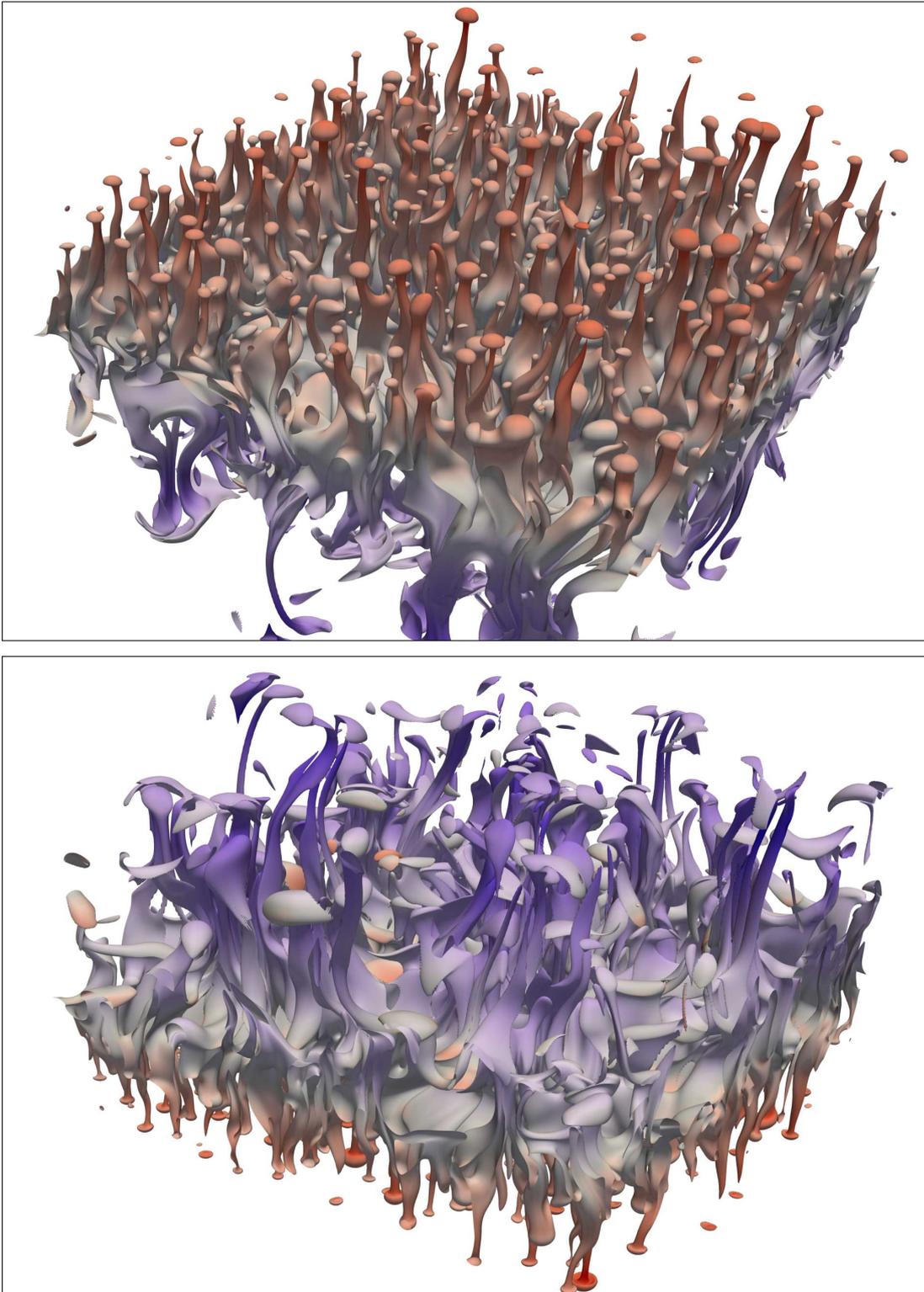


FIGURE 11 – Isosurface de la concentration des particules à Schmidt $Sc = 7$: Isosurface $C(x, y, z) = 0.5$ à $t = 150$ montrant la digitation double diffusive (vue de dessus, puis de dessous). La couleur représente la vitesse verticale u_z de la surface.

5 Conclusion et perspectives

L'objectif principal de ce travail était de pouvoir simuler des écoulements sédimentaires à haut Schmidt en utilisant des méthodes numériques adaptées dans un contexte de calcul haute performance. Une fois la méthode numérique proposée, son implémentation a été développée dans la librairie HySoP, une sorte de boîte à outil d'opérateurs destinés à la simulation d'écoulements fluides. Dans ce code de calcul, un problème est décomposé en opérateurs eux-mêmes organisés dans un graphe de dépendances. Chaque opérateur numérique qui découle de la méthode numérique proposée a été implémenté une fois pour toute pour plusieurs architectures différentes en s'appuyant sur la norme `OpenCL`. La portabilité des performances a été obtenue grâce à la génération de code et à l'optimisation automatique des performances du noyau d'exécution durant l'exécution. Le code a été validé, entre autres, sur une simulation de type Taylor-Green, mais aussi sur l'état de l'art des simulations sédimentaires.

Les performances obtenues sur un seule GPU sont déjà très intéressantes et ont déjà permis de multiplier le nombre de Schmidt par quatre si l'on le compare au précédent état de l'art qui utilisait un cluster de calcul classique avec des CPU. La suite logique de ce travail est de passer les simulations sur plusieurs GPU afin de monter, encore, en nombre de Schmidt. Avec 8 GPU, la barrière de $Sc = 128$ devrait être franchie (nombre de Schmidt effectif de 3200 pour les sédiments). Cela nécessite encore quelques développements qui sont en cours. Le deuxième volet des perspectives est d'ouvrir le code de calcul HySoP sous licence libre pour tous.

Références

- [1] George K BATCHELOR. “Small-scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid Part 1. General discussion and the case of small conductivity”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 5.1 (1959), p. 113-133 (cf. p. 5).
- [2] Peter BURNS et Eckart MEIBURG. “Sediment-laden fresh water above salt water : nonlinear simulations”. In : *Journal of Fluid Mechanics* 762 (2015), p. 156-195 (cf. p. 2, 4, 5, 10).
- [3] Jean-Matthieu ETANCELIN. “Model coupling and hybrid computing for multi-scale CFD”. Theses. Université de Grenoble, déc. 2014 (cf. p. 6).
- [4] Theodore GREEN. “The importance of double diffusion to the settling of suspended material”. In : *Sedimentology* 34.2 (1987), p. 319-331 (cf. p. 3).
- [5] David CJD HOYAL, Marcus I BURSIK et Joseph F ATKINSON. “The influence of diffusive convection on sedimentation from buoyant plumes”. In : *Marine Geology* 159.1-4 (1999), p. 205-220 (cf. p. 3).
- [6] J-B LAGAERT, Guillaume BALARAC et G-H COTTET. “Hybrid spectral-particle method for the turbulent transport of a passive scalar”. In : *Journal of Computational Physics* 260 (2014), p. 127-142 (cf. p. 2, 5).
- [7] Wim M VAN REES, Anthony LEONARD, DI PULLIN et Petros KOUMOUTSAKOS. “A comparison of vortex and pseudo-spectral methods for the simulation of periodic vortical flows at high Reynolds numbers”. In : *Journal of Computational Physics* 230.8 (2011), p. 2794-2805 (cf. p. 10).