PDSA : accélération synthétique par la diffusion par morceaux pour la neutronique

Workshop MaNu
"Mathématiques pour la neutronique"

7 décembre 2018

François Févotte[*],
M. Salli[*,†], L. Plagne[*],
M. Faverge[†], P. Ramet[†]

[*] EDF R&D, PERICLES I23
[†] Inria Bordeaux, LaBRI

Contexte

- Solveurs EDF (plate-forme Cocagne, en 2013)

Solveur	Modèle Méthode	Discrétisation spatiale	Parallélisation
Diabolo	SP_N	EF RT_k maillage cartésien	vectorisation (Eigen) mémoire partagée (tbb)
Domino	S_N	Diamant DD_0 maillage cartésien	vectorisation (Eigen) mémoire partagée (tbb) **mémoire distribuée ? ? ?**

- Thèse Moustafa Salli
  - parallélisation de Domino en mémoire distribuée

Contexte

- Solveurs EDF (plate-forme Cocagne, en **2016)**

Solveur	Modèle Méthode	Discrétisation spatiale	Parallélisation
Diabolo	SP_N	EF RT_k maillage cartésien	vectorisation (Eigen) mémoire partagée (tbb)
Domino	S_N SI + DSA	Diamant DD_0 maillage cartésien	vectorisation (Eigen) **mémoire partagée** **mémoire distribuée** } (PaRSEC)

- Thèse Moustafa Salli
  - parallélisation de Domino en mémoire distribuée
  - **impact sur Diabolo ?**

Transport neutronique

$$\forall \vec{\Omega} \in S^2, \forall \vec{r} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2,$$

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{r})\, \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\,\pi} \int_{S^2} d^2\Omega'\ \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + Q(\vec{r}).$$

Transport neutronique

Itération sur les sources

$\forall \vec{\Omega} \in S^2, \forall \vec{r} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2,$

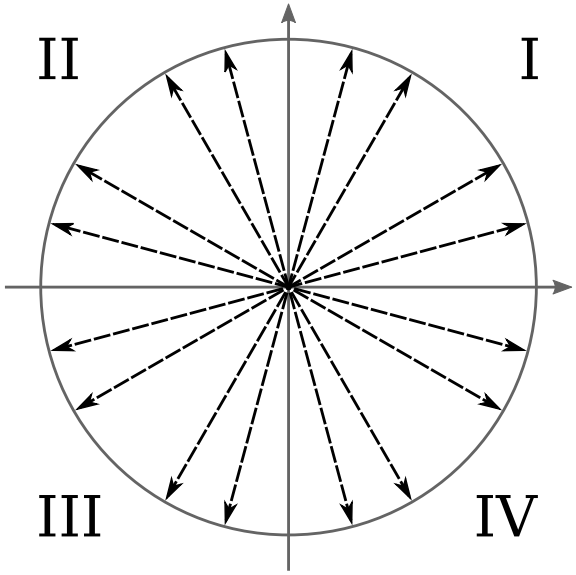
$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma(\vec{r})\, \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\,\pi} \int_{S^2} d^2\Omega'\; \psi_\ell(\vec{r}, \vec{\Omega}') + Q(\vec{r}).$$

Transport neutronique

Itération sur les sources, ordonnées discrètes

$\forall k \in [1 \dots N_k], \forall \vec{r} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2,$

$$\vec{\Omega}_k \cdot \vec{\nabla} \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) + \Sigma(\vec{r})\, \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) = \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\,\pi} \sum_{k'=1}^{N_k} w_{k'}\, \psi_\ell(\vec{r}, \vec{\Omega}_{k'}) + Q(\vec{r}).$$

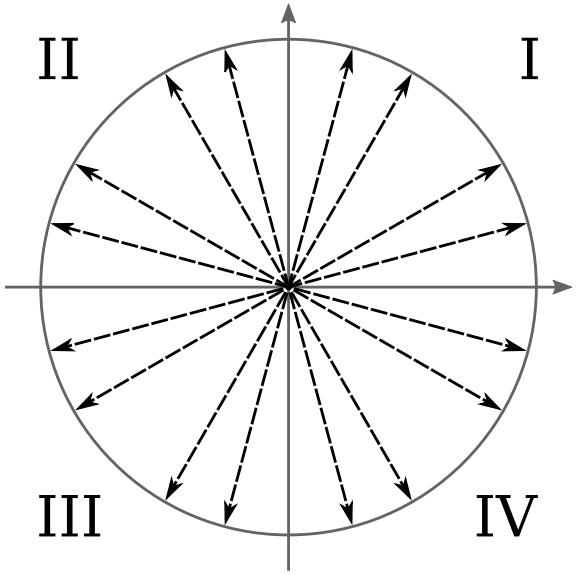


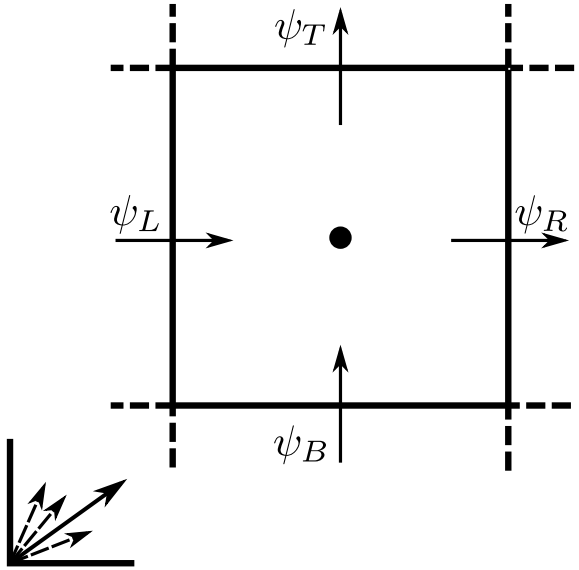
Transport neutronique

Itération sur les sources, ordonnées discrètes, schéma diamant

$\forall k \in [1 \dots N_k], \forall \vec{r} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2,$

$$\vec{\Omega}_k \cdot \vec{\nabla} \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) + \Sigma(\vec{r})\, \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) = \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\,\pi} \sum_{k'=1}^{N_k} w_{k'}\, \psi_\ell(\vec{r}, \vec{\Omega}_{k'}) + Q(\vec{r}).$$



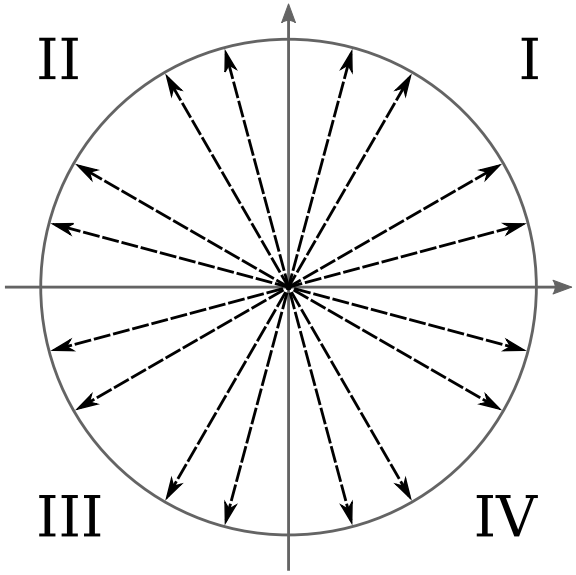


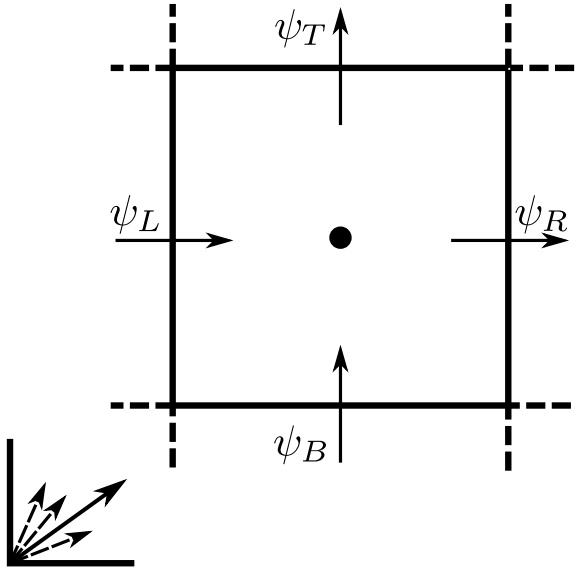
Transport neutronique

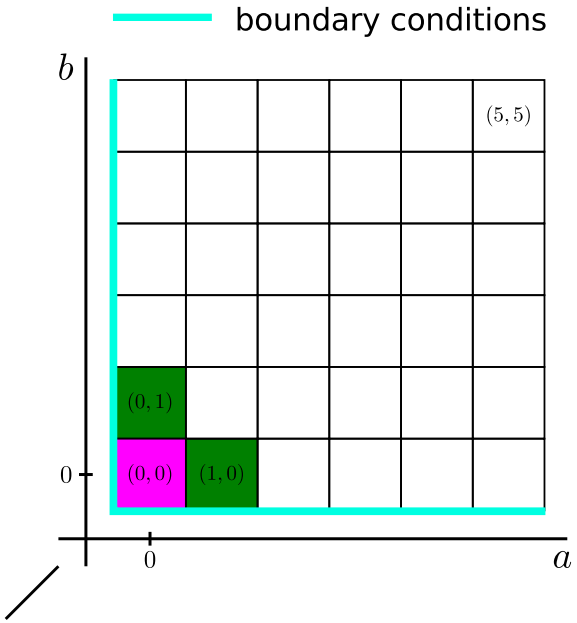
Itération sur les sources, ordonnées discrètes, schéma diamant, balayage

$\forall k \in [1 \dots N_k], \forall \vec{r} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2,$

$$\vec{\Omega}_k \cdot \vec{\nabla} \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) + \Sigma(\vec{r})\, \psi_{\ell+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) = \frac{\Sigma_s(\vec{r})}{4\,\pi} \sum_{k'=1}^{N_k} w_{k'}\, \psi_\ell(\vec{r}, \vec{\Omega}_{k'}) + Q(\vec{r}).$$

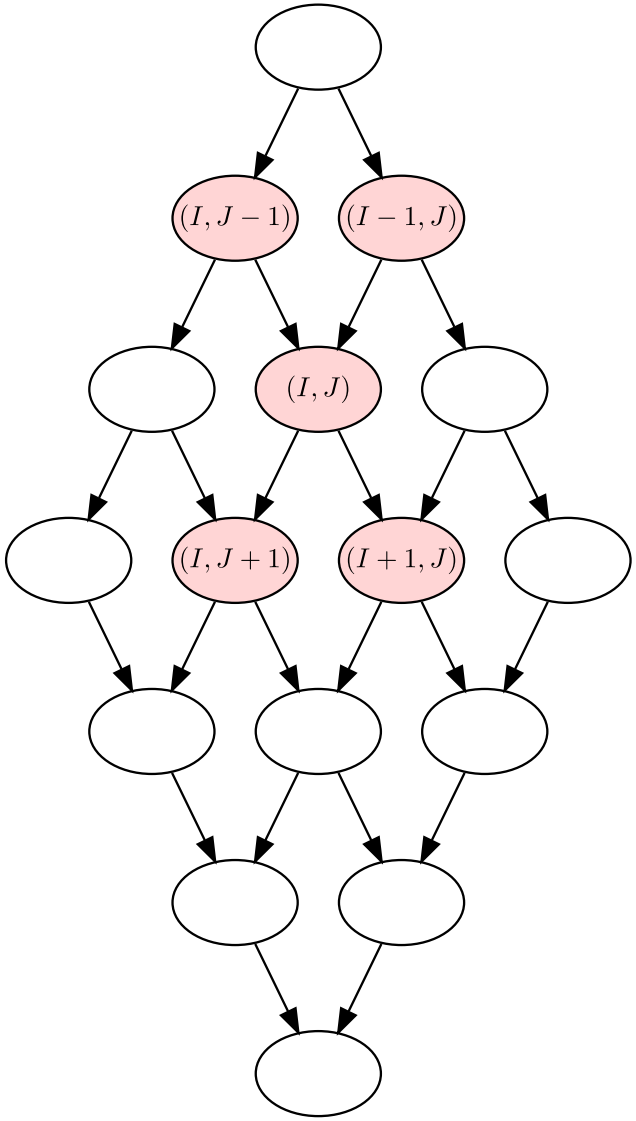


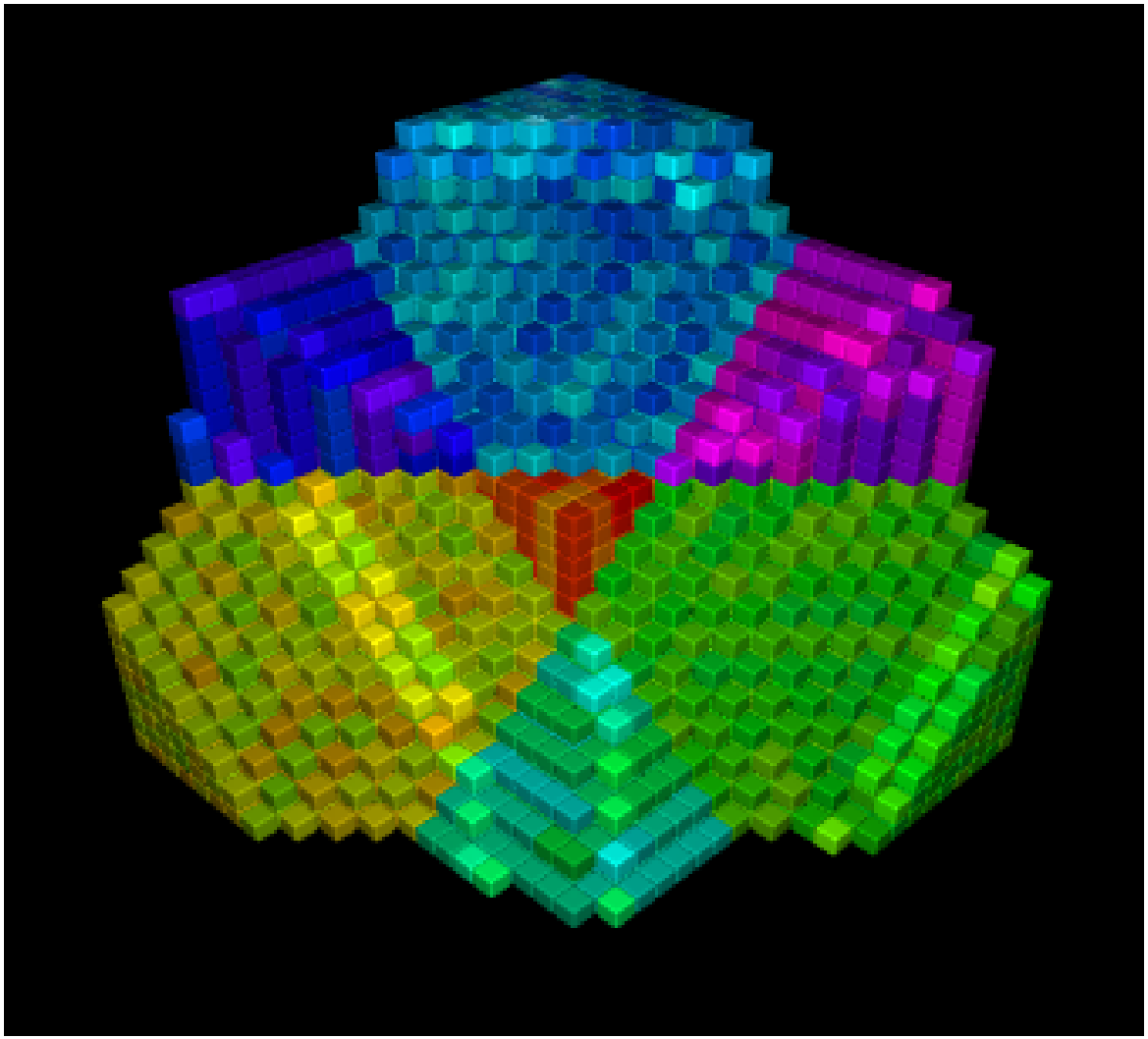




Solveur Domino

Expression du parallélisme – Run-times (ex : PaRSEC / StarPU)





Analyse classique

- Itération sur les sources
- Accélération synthétique par la diffusion (DSA)

Transport neutronique (S_N)

Équations fondamentales + résolution

- Simplification 1D (géométrie "slab") :

$$\forall \mu \in [-1,1], \forall x \in \mathcal{D},$$
$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma\, \psi(x,\mu) = \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^{1} \psi(x,\mu')\, d\mu' + Q(x).$$

Transport neutronique (S_N)

Équations fondamentales + résolution

- Simplification 1D (géométrie "slab") :

$$\forall \mu \in [-1,1], \forall x \in \mathcal{D},$$
$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma\, \psi(x,\mu) = \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^{1} \psi(x,\mu')\, d\mu' + Q(x).$$

- Itération sur les sources (SI, *"source iterations"*) :
  explicitation second membre + itération :

$$\forall \mu \in [-1,1], \forall x \in \mathcal{D},$$
$$\mu \frac{\partial \psi_{\ell+1}}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma\, \psi_{\ell+1}(x,\mu) = \frac{\Sigma_s}{2} \int_{-1}^{1} \psi_{\ell}(x,\mu')\, d\mu' + Q(x).$$

Itération sur les sources

Vitesse de convergence

- Notation : flux scalaire

$$\phi_\ell(x) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \psi_\ell(x,\mu')\, d\mu' \qquad \phi_\ell = S\psi_\ell$$

$$\mu\frac{\partial \psi_{\ell+1}}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma\,\psi_{\ell+1}(x,\mu) = \Sigma_s\,\phi_\ell(x) + Q(x) \qquad L\,\psi_{\ell+1} = \Sigma_s\,\phi_\ell + Q$$

Itération sur les sources

Vitesse de convergence

- Notation : flux scalaire

$$\phi_\ell(x) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \psi_\ell(x,\mu')\, d\mu' \qquad \phi_\ell = S\psi_\ell$$

$$\mu\frac{\partial \psi_{\ell+1}}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma\,\psi_{\ell+1}(x,\mu) = \Sigma_s\,\phi_\ell(x) + Q(x) \qquad L\,\psi_{\ell+1} = \Sigma_s\,\phi_\ell + Q$$

- Convergence des itérations sur les sources :

$$\phi_{\ell+1} = S\,L^{-1}\,\Sigma_s\,\phi_\ell + S\,L^{-1}\,Q.$$

  - Vitesse de convergence donnée par $\rho(S\,L^{-1}\Sigma_s)$

Vitesse de convergence

Source Iterations

- Analyse de Fourier, problème 1D, conditions aux limites périodiques : $(Q = 0, \quad c = \Sigma_s/\Sigma < 1, \quad x \in [0, L], \quad \mu \in [-1, 1])$

$$\begin{cases} \mu \dfrac{\partial \psi_{\ell+1}}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma\, \psi_{\ell+1}(x,\mu) = c\, \Sigma\, \phi_\ell(x), \\ \psi_{\ell+1}(0,\mu) = \psi_{\ell+1}(0,-\mu), \\ \psi_{\ell+1}(L,\mu) = \psi_{\ell+1}(L,-\mu), \end{cases}$$

- Itérée initiale :

$$\phi_0(x) = \cos\left(\frac{\pi\, k\, x}{L}\right),$$

$$\phi_\ell \xrightarrow[\ell\to\infty]{?} 0$$

Vitesse de convergence

Source Iterations

- Calculs (complètement analytiques) ...

$$\psi_1 = \ldots,$$

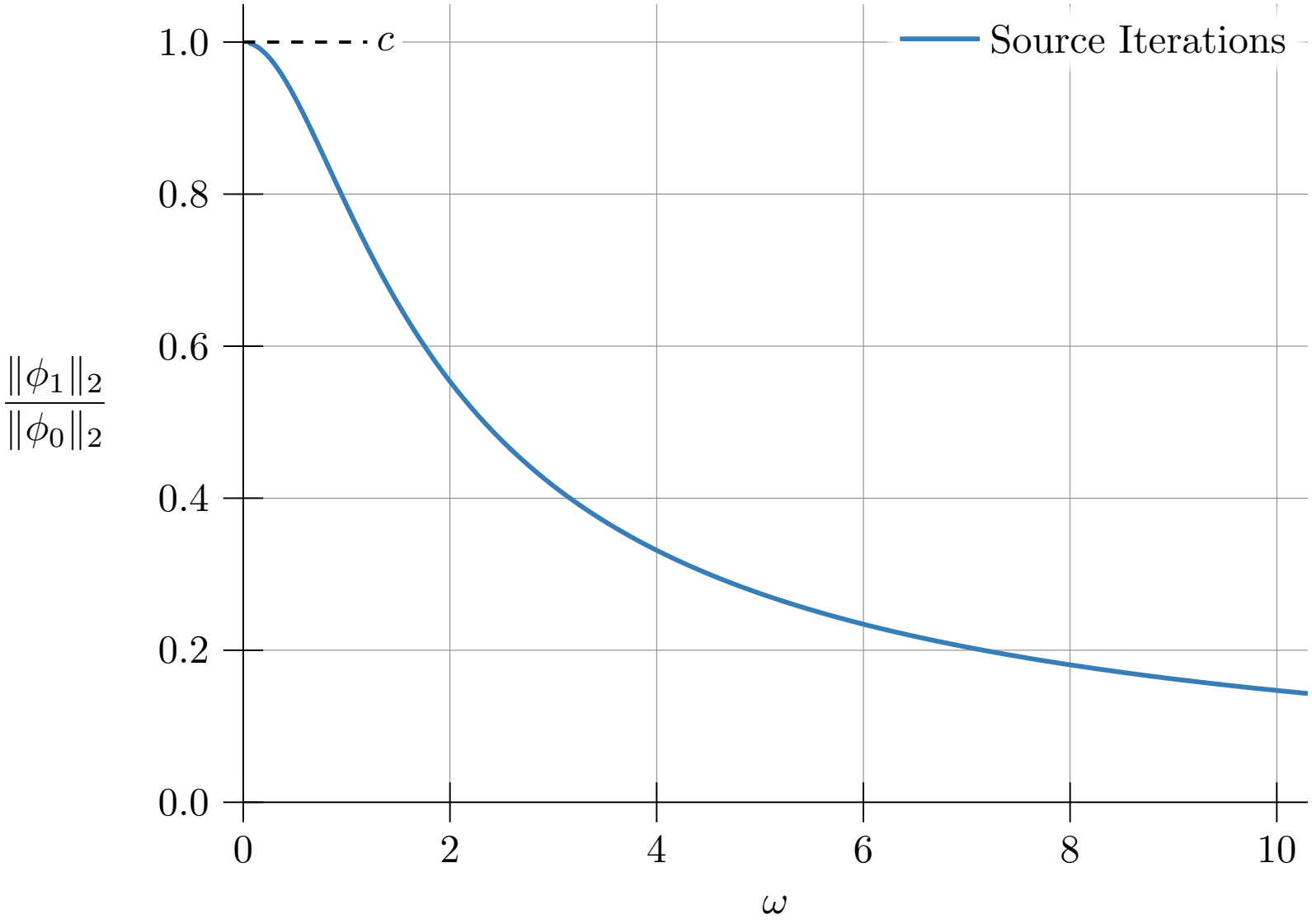
$$\begin{aligned}\phi_{\mathrm{si}}(x) &= \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \psi_1(x,\mu)\, d\mu \\ &= \rho_{\mathrm{si}}(\omega)\, \phi_0(x),\end{aligned}$$

$$\omega = \frac{\pi\, k}{\Sigma\, L}$$

$$\rho_{\mathrm{si}}(\omega) = \frac{c\, \arctan \omega}{\omega}.$$

Vitesse de convergence

Source Iterations



Diffusion Synthetic Acceleration

Principe

- Correction du flux :

$$\phi_{\text{dsa}} = \phi_{\text{si}} + S\varepsilon$$

- Erreur : $\varepsilon = \psi - \psi_{\text{si}}$

$$\begin{cases} \mu \dfrac{\partial \varepsilon}{\partial x}(x,\mu) + \Sigma\, \varepsilon(x,\mu) = c\,\Sigma\, \left[\phi_{\text{si}}(x) - \phi_0(x)\right], \forall \mu, \forall x \\ \varepsilon(0,\mu) = \varepsilon(0,-\mu), \\ \varepsilon(L,\mu) = \varepsilon(L,-\mu), \end{cases}$$

Diffusion Synthetic Acceleration

Principe

- Correction du flux :

$$\phi_{\text{dsa}} = \phi_{\text{si}} + f$$

- Approximation de la diffusion : $f \simeq S\varepsilon$

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\Sigma} f''(x) + (1-c)\,\Sigma\, f(x) = c\,\Sigma\,\left[\phi_{\text{si}}(x) - \phi_0(x)\right], \forall x \\ f'(0) = 0, \\ f'(L) = 0. \end{cases}$$

Diffusion Synthetic Acceleration

Principe

- Correction du flux :

$$\phi_{\text{dsa}} = \phi_{\text{si}} + f$$

- Approximation de la diffusion : $f \simeq S\varepsilon$

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\Sigma} f''(x) + (1-c)\,\Sigma\, f(x) = c\,\Sigma\,\left[\phi_{\text{si}}(x) - \phi_0(x)\right], \forall x \\ f'(0) = 0, \\ f'(L) = 0. \end{cases}$$

Lien entre solveurs de Cocagne

- Le problème de DSA de Domino est résolu par le solveur Diabolo (SP_N)
- Pas besoin de développer un solveur supplémentaire

Vitesse de convergence

Diffusion Synthetic Acceleration

- Calculs (complètement analytiques)...

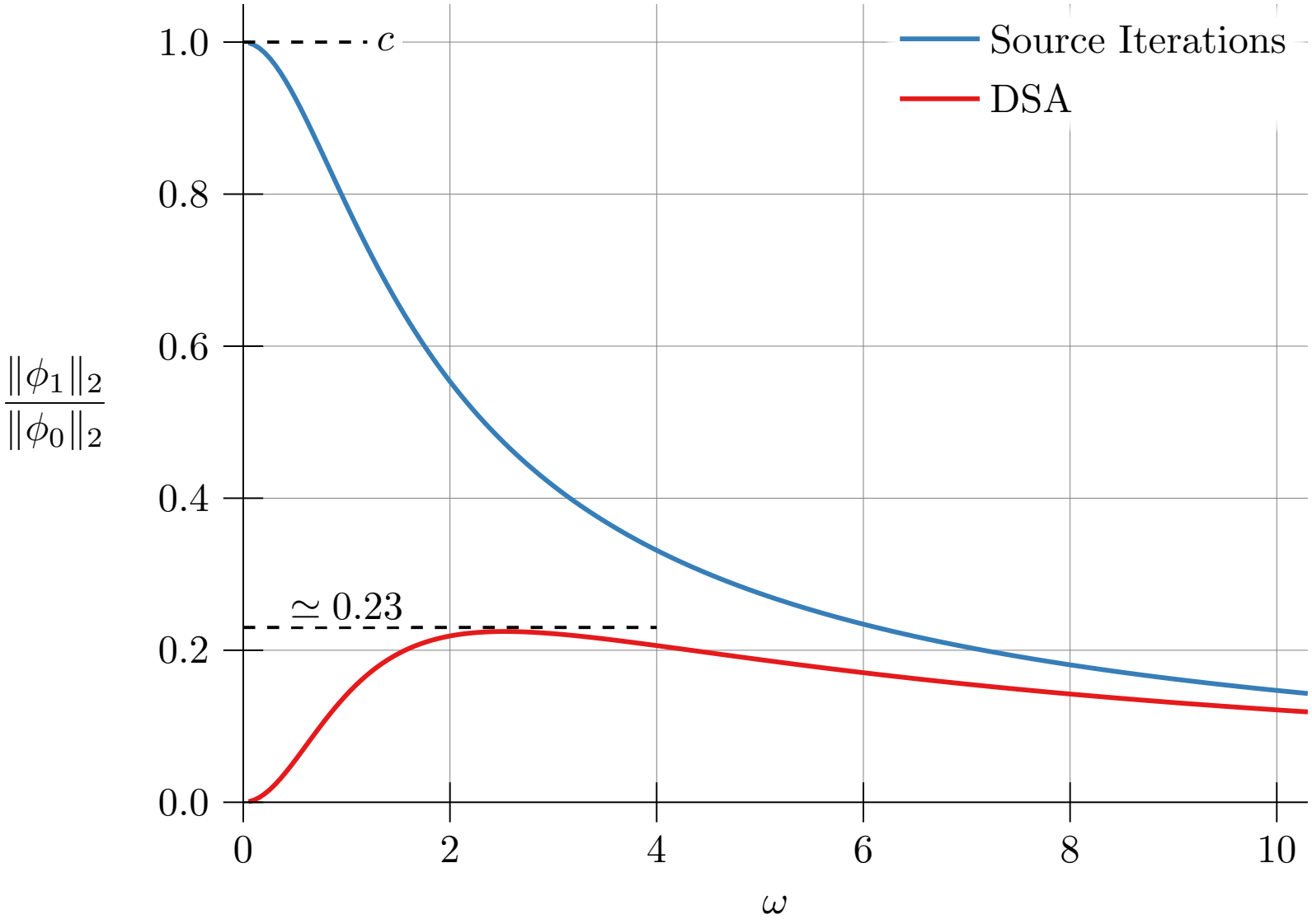
$$f(x) = \rho_d(\omega)\,\phi_0(x), \qquad \rho_d(\omega) = \ldots,$$

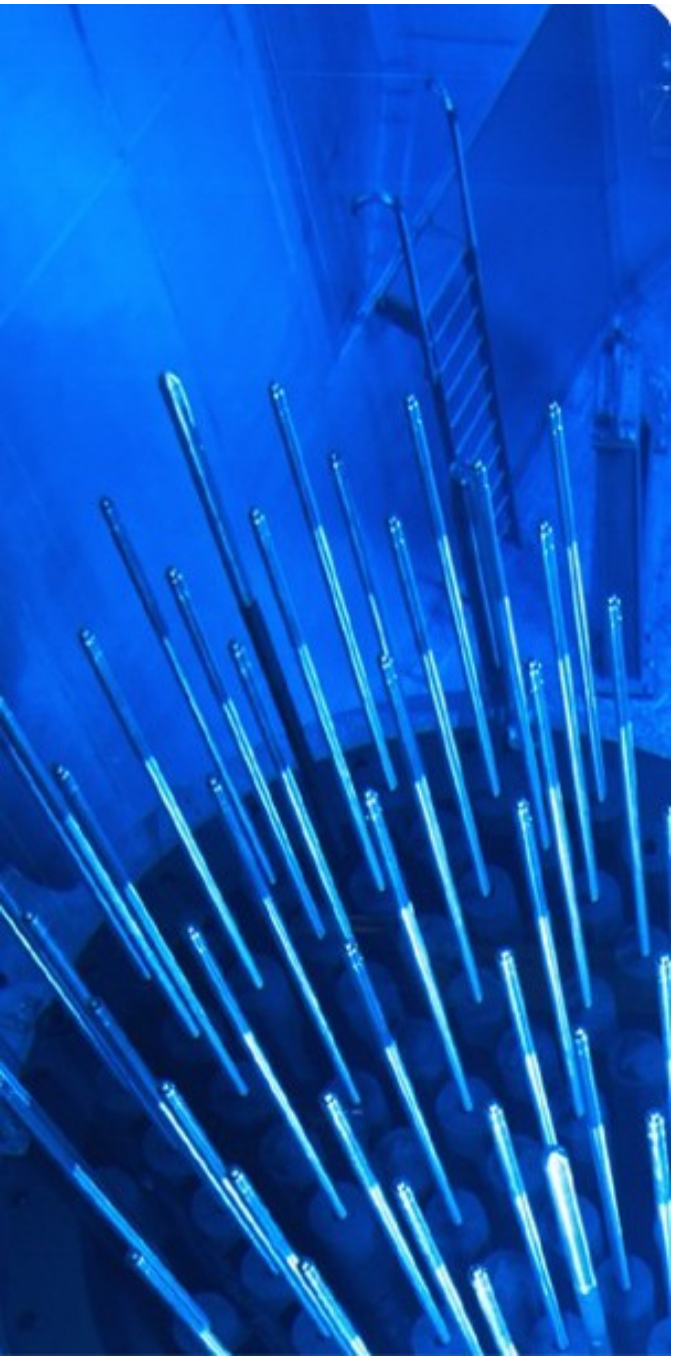
$$\begin{aligned}\phi_{\text{dsa}} &= \phi_{\text{si}} + f \\ &= (\rho_{\text{si}} + \rho_d)\,\phi_0 \\ &= \rho_{\text{dsa}}\,\phi_0,\end{aligned}$$

$$\rho_{\text{dsa}}(\omega) = \frac{\omega^2\,\rho_{\text{si}}(\omega) + 3\,\rho_{\text{si}}(\omega) - 3\,c}{\omega^2 - 3\,c + 3}.$$

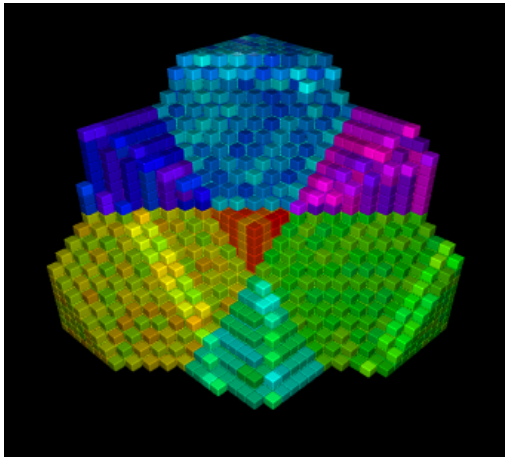
Vitesse de convergence

Source Iterations + Diffusion Synthetic Acceleration





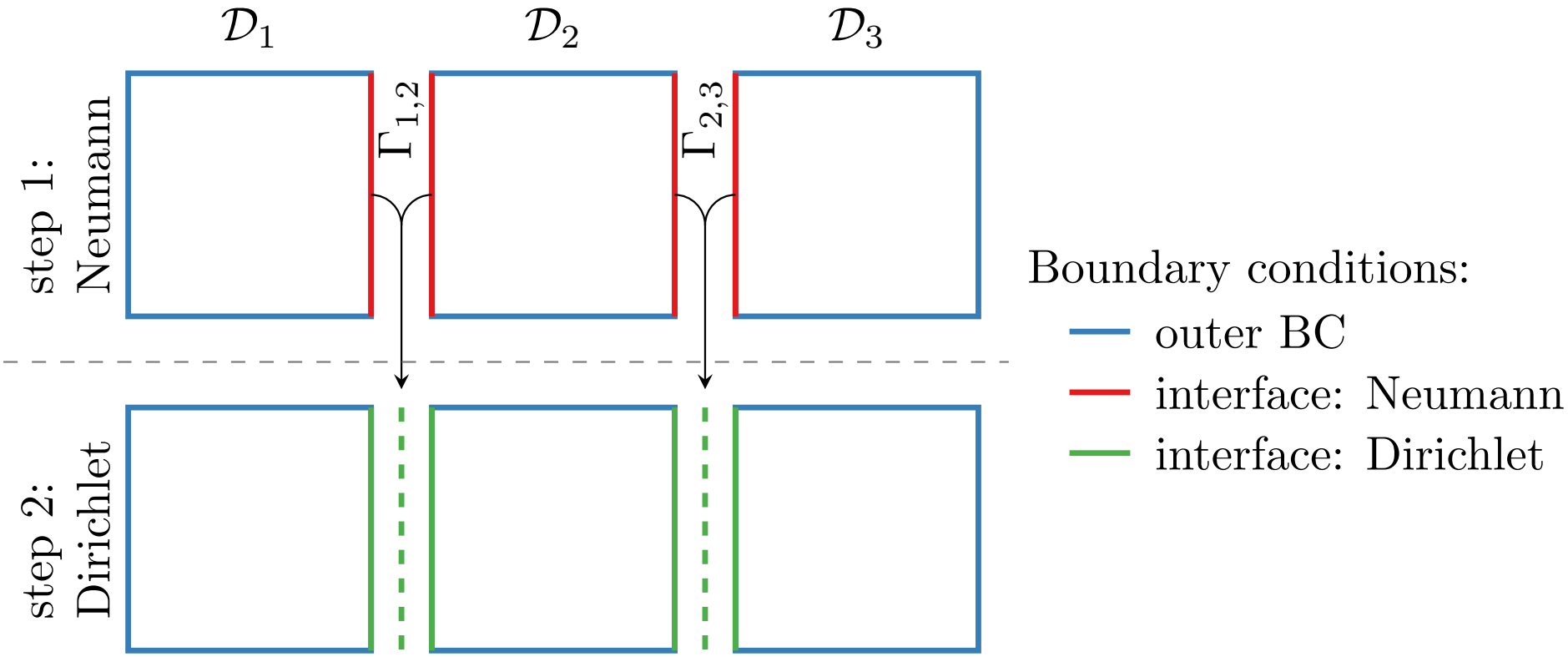
PDSA



- Comment construire un opérateur DSA s'appuyant sur la même distribution de données ?
- Avec un minimum de développements dans le solveur SP_N

Piecewise DSA

Principe



Piecewise DSA

Principe

1. *Source Iteration* $\rightarrow \phi_{\mathrm{si}}$

Piecewise DSA

Principe

1. *Source Iteration* $\rightarrow \phi_{\mathrm{si}}$
2. problème de diffusion local dans chaque sous-domaine $\mathcal{D}_i$ (Neumann) :

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\Sigma}\, g''(x) + (1-c)\,\Sigma\, g(x) = c\,\Sigma\,\left[\phi_{\mathrm{si}}(x) - \phi_0(x)\right] \quad \forall x \in \mathcal{D}_i, \\ g'(0) = 0, \quad g'(L) = 0, \\ g'(x_i) = 0, \qquad 1 \leqslant i \leqslant N-1. \end{cases}$$

Piecewise DSA

Principe

1. *Source Iteration* $\rightarrow \phi_{\text{si}}$
2. problème de diffusion local dans chaque sous-domaine $\mathcal{D}_i$ (Neumann) :

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\Sigma}\, g''(x) + (1-c)\,\Sigma\, g(x) = c\,\Sigma\, \left[\phi_{\text{si}}(x) - \phi_0(x)\right] \quad \forall x \in \mathcal{D}_i, \\ g'(0) = 0, \quad g'(L) = 0, \\ g'(x_i) = 0, \qquad 1 \leqslant i \leqslant N-1. \end{cases}$$

3. problème de diffusion local dans chaque sous-domaine $\mathcal{D}_i$ (Dirichlet) :

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\,\Sigma}\, h''(x) + (1-c)\,\Sigma\, h(x) = c\,\Sigma\, \left[\phi_{\text{si}}(x) - \phi_0(x)\right] \quad \forall x \in \mathcal{D}_i, \\ h'(0) = 0, \quad h'(L) = 0, \\ h(x_i) = \dfrac{1}{2}\left[g^-(x_i) + g^+(x_i)\right], \qquad 1 \leqslant i \leqslant N-1. \end{cases}$$

Piecewise DSA

Principe

1. *Source Iteration* $\rightarrow \phi_{\text{si}}$
2. problème de diffusion local dans chaque sous-domaine $\mathcal{D}_i$ (Neumann) :

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\Sigma}\, g''(x) + (1-c)\,\Sigma\, g(x) = c\,\Sigma\, \left[\phi_{\text{si}}(x) - \phi_0(x)\right] \quad \forall x \in \mathcal{D}_i, \\ g'(0) = 0, \quad g'(L) = 0, \\ g'(x_i) = 0, \qquad 1 \leqslant i \leqslant N-1. \end{cases}$$

3. problème de diffusion local dans chaque sous-domaine $\mathcal{D}_i$ (Dirichlet) :

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\,\Sigma}\, h''(x) + (1-c)\,\Sigma\, h(x) = c\,\Sigma\, \left[\phi_{\text{si}}(x) - \phi_0(x)\right] \quad \forall x \in \mathcal{D}_i, \\ h'(0) = 0, \quad h'(L) = 0, \\ h(x_i) = \dfrac{1}{2}\left[g^-(x_i) + g^+(x_i)\right], \qquad 1 \leqslant i \leqslant N-1. \end{cases}$$

4. correction du flux : $\phi_{\text{pdsa}} = \phi_{\text{si}} + h$

PDSA

Idée de l'analyse : exemple de l'étape 1 (Neumann)

- Erreur $\delta = g - f$, restreinte au sous-domaine $\mathcal{D}_i = [x_i, x_{i+1}]$:

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\,\Sigma}\,\delta''_{|\mathcal{D}_i}(x) + (1-c)\,\Sigma\,\delta_{|\mathcal{D}_i}(x) = 0, \\ \delta'_{|\mathcal{D}_i}(x_i) = -f'(x_i), \\ \delta'_{|\mathcal{D}_i}(x_{i+1}) = -f'(x_{i+1}). \end{cases}$$

PDSA

Idée de l'analyse : exemple de l'étape 1 (Neumann)

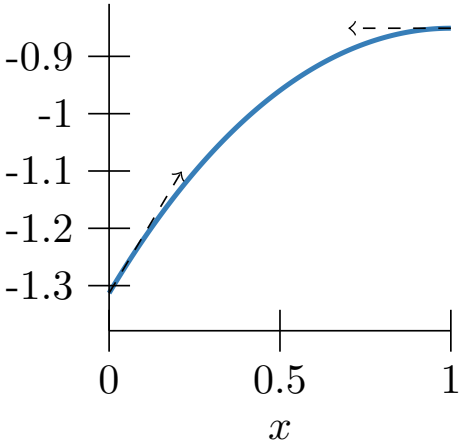
- Erreur $\delta = g - f$, restreinte au sous-domaine $\mathcal{D}_i = [x_i, x_{i+1}]$:

$$\begin{cases} \dfrac{-1}{3\,\Sigma}\,\delta''_{|\mathcal{D}_i}(x) + (1-c)\,\Sigma\,\delta_{|\mathcal{D}_i}(x) = 0, \\ \delta'_{|\mathcal{D}_i}(x_i) = -f'(x_i), \\ \delta'_{|\mathcal{D}_i}(x_{i+1}) = -f'(x_{i+1}). \end{cases}$$

- Superposition : $\delta_{|\mathcal{D}_i} = -f'(x_i)\ e^{\mathrm{l}}_{\mathrm{nn}} - f'(x_{i+1})\ e^{\mathrm{r}}_{\mathrm{nn}}$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2 e^{\mathrm{l}}_{\mathrm{nn}}}{dx^2}(x) - \tilde{\Sigma}^2\ e^{\mathrm{l}}_{\mathrm{nn}}(x) = 0, \\ \dfrac{de^{\mathrm{l}}_{\mathrm{nn}}}{dx}(0) = 1, \qquad \dfrac{de^{\mathrm{l}}_{\mathrm{nn}}}{dx}(l) = 0. \end{cases}$$

$$\tilde{\Sigma} = \sqrt{3(1-c)\,\Sigma}$$



$\tilde{\Sigma} = 1,\ l = 1$

PDSA

Après calculs...

- Majoration du rayon spectral :

$$\frac{\|\phi_{\mathrm{pdsa}}\|_2}{\|\phi_0\|_2} \leqslant \underbrace{\rho_{\mathrm{dsa}} + \frac{\|\varepsilon\|_2}{\|\phi_0\|_2}}_{\rho_{\mathrm{pdsa}}^{\max}}$$

PDSA

Après calculs...

- Majoration du rayon spectral :

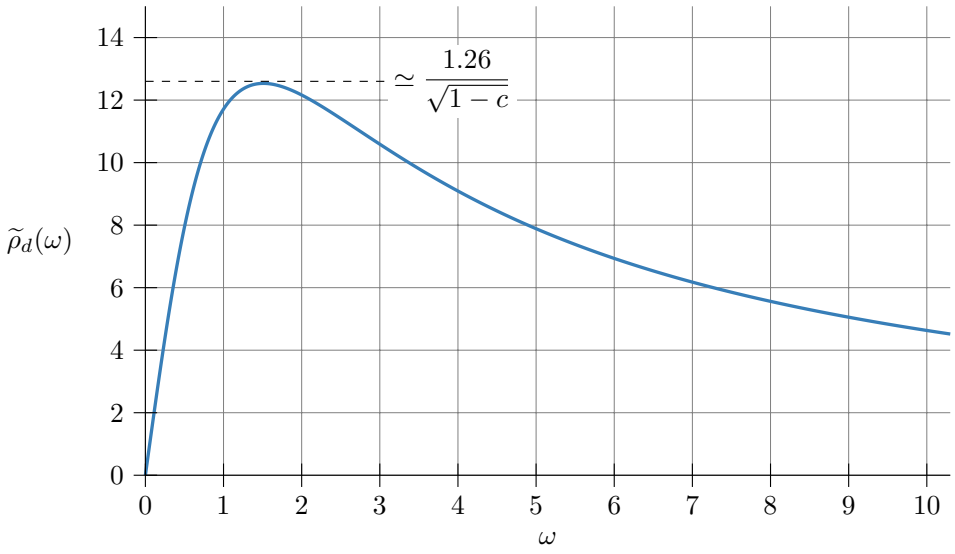
$$\frac{\|\phi_{\text{pdsa}}\|_2}{\|\phi_0\|_2} \leqslant \underbrace{\rho_{\text{dsa}} + \frac{\|\varepsilon\|_2}{\|\phi_0\|_2}}_{\rho_{\text{pdsa}}^{\max}}$$

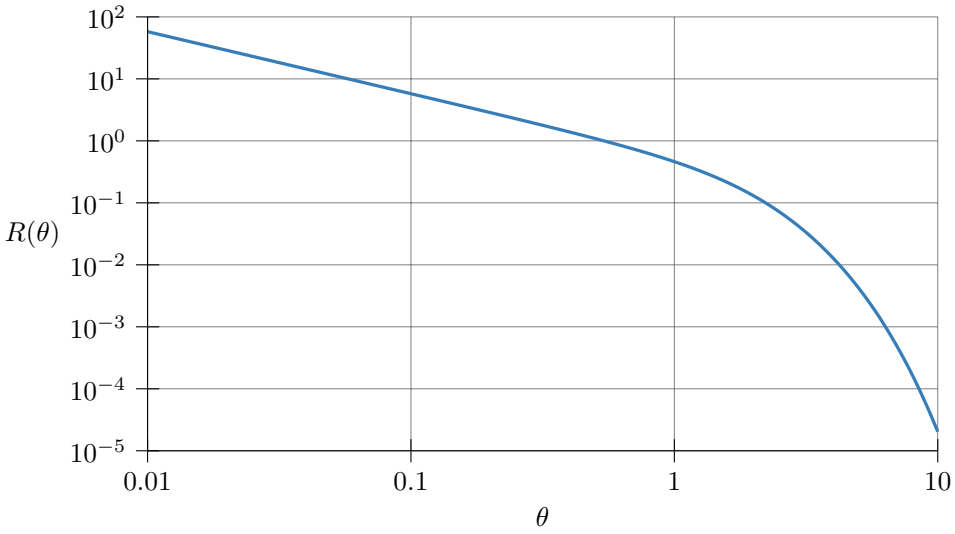
- Majoration écart par rapport à DSA :

$$\frac{\|\varepsilon\|_2}{\|\phi_0\|_2} \leqslant \underbrace{\sqrt{\frac{10}{3\,(1-c)}}\,\rho_d\,\omega}_{\widetilde{\rho}_d(\omega)}\ \underbrace{\frac{\tilde{\Sigma}\ \left|e_{\text{nn}}^{\text{l}}\left(\frac{L}{N}\right)\right|\ \|e_{\text{dd}}^{\text{l}}\|_2}{\sqrt{L/N}}}_{R}$$

Vitesse de convergence

PDSA





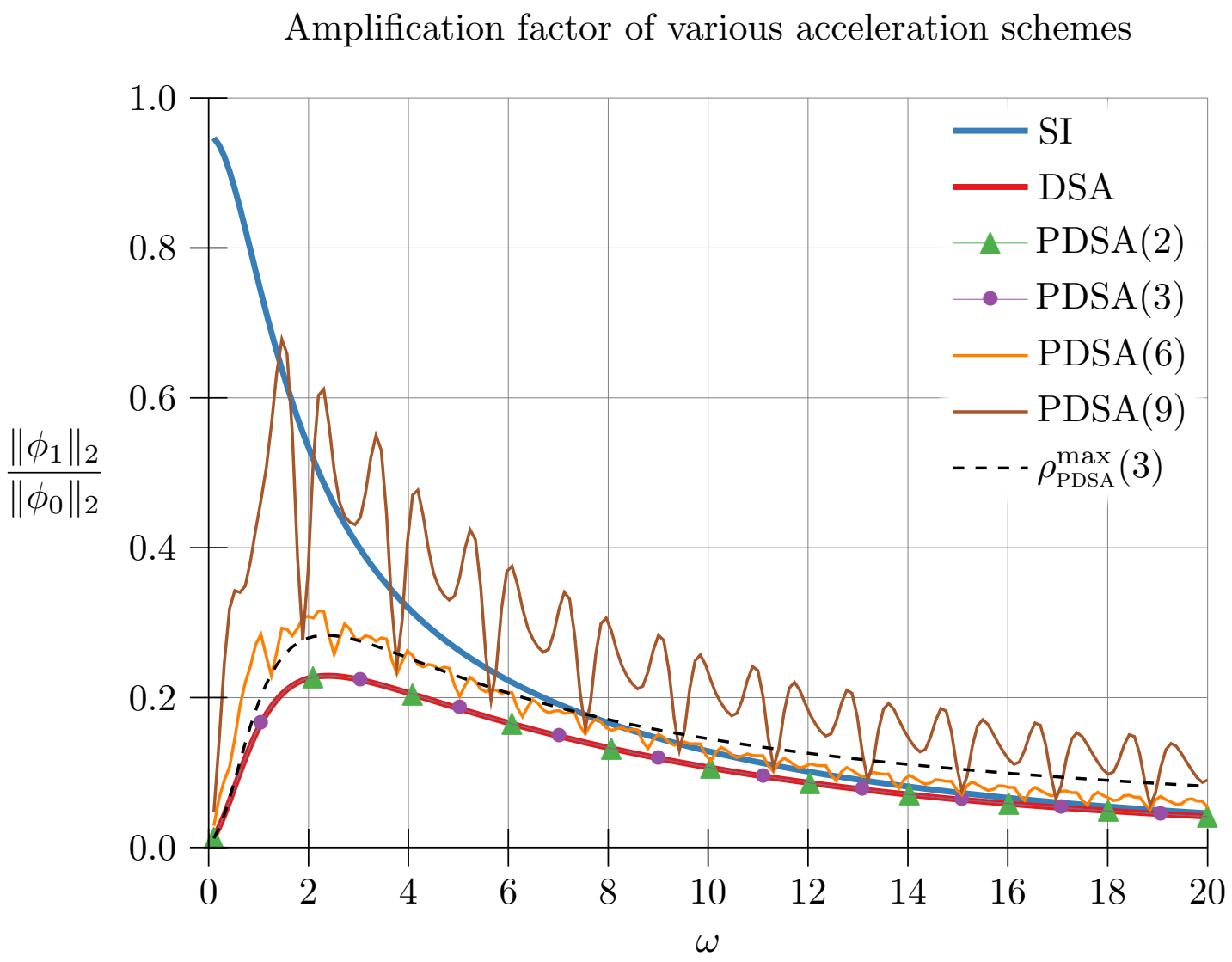
- Composante R :

$$R(\theta) = \sqrt{\frac{2\,e^{6\,\theta} - 8\,\theta\,e^{4\,\theta} - 2\,e^{2\,\theta}}{\theta\,e^{8\,\theta} - 4\,\theta\,e^{6\,\theta} + 6\,\theta\,e^{4\,\theta} - 4\,\theta\,e^{2\,\theta} + \theta}},$$

$$\theta = \frac{\tilde{\Sigma}\,L}{N}.$$

PDSA

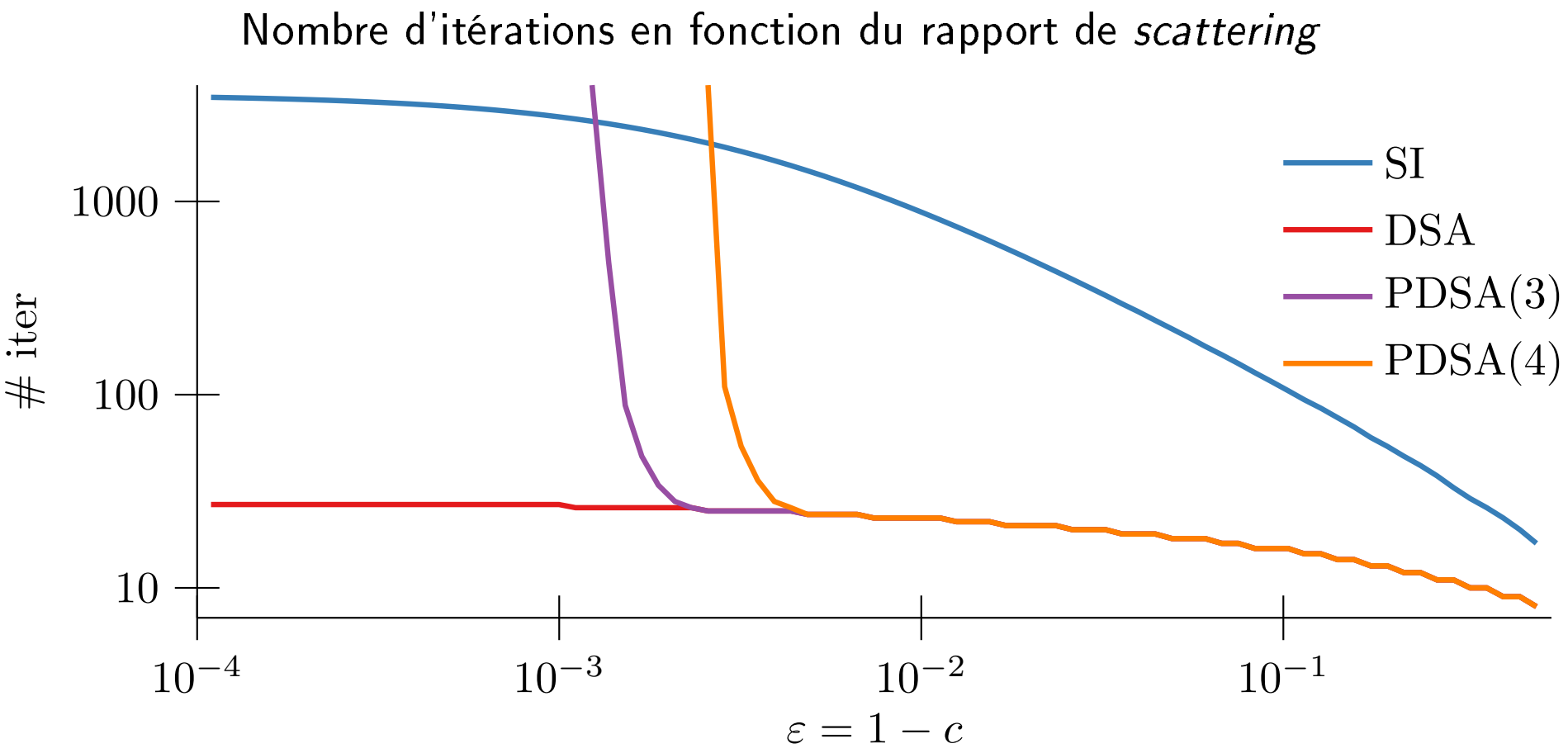
Expériences numériques 1D



$\tau = 30, \quad c = 0.95$

PDSA

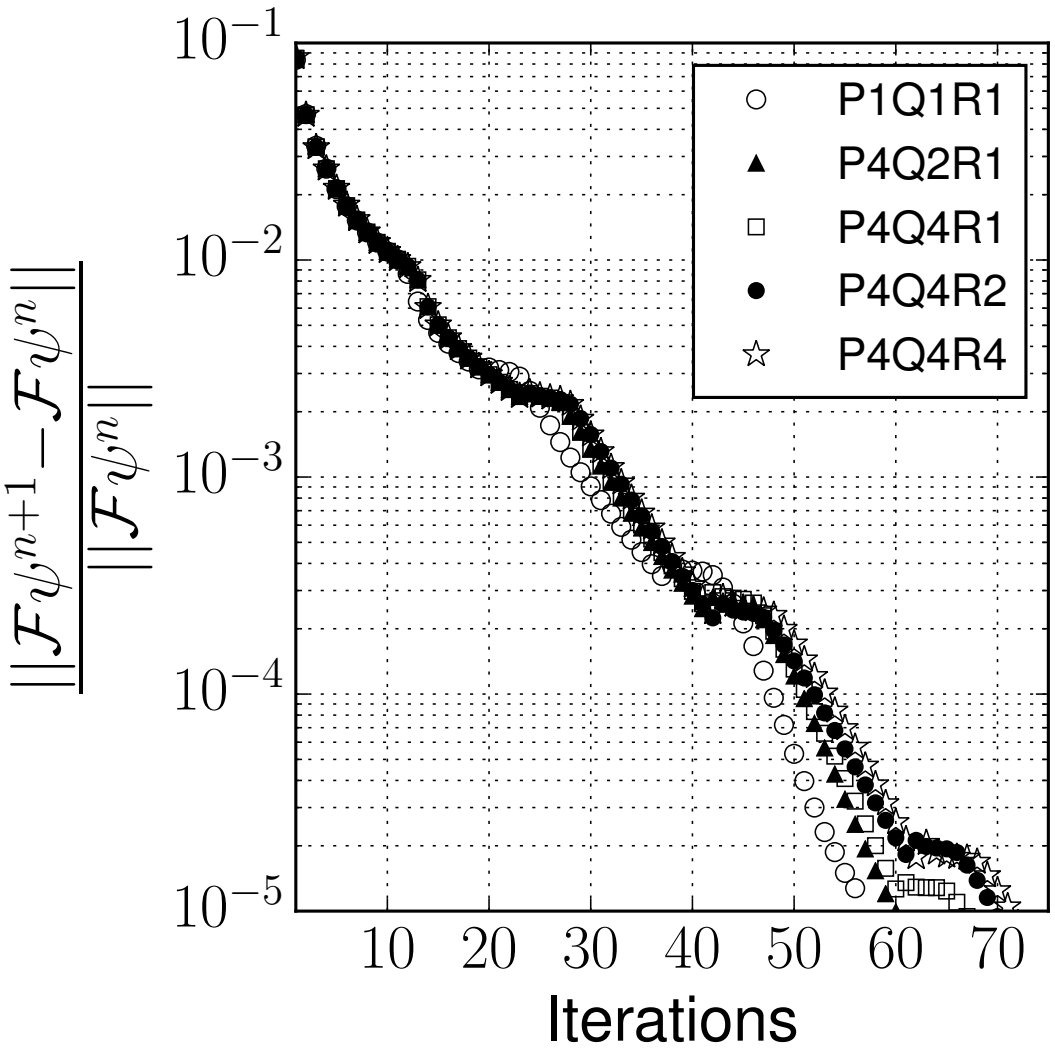
Expériences numériques 1D



$(\tau = 30)$

PDSA

Cas-test REP 3D



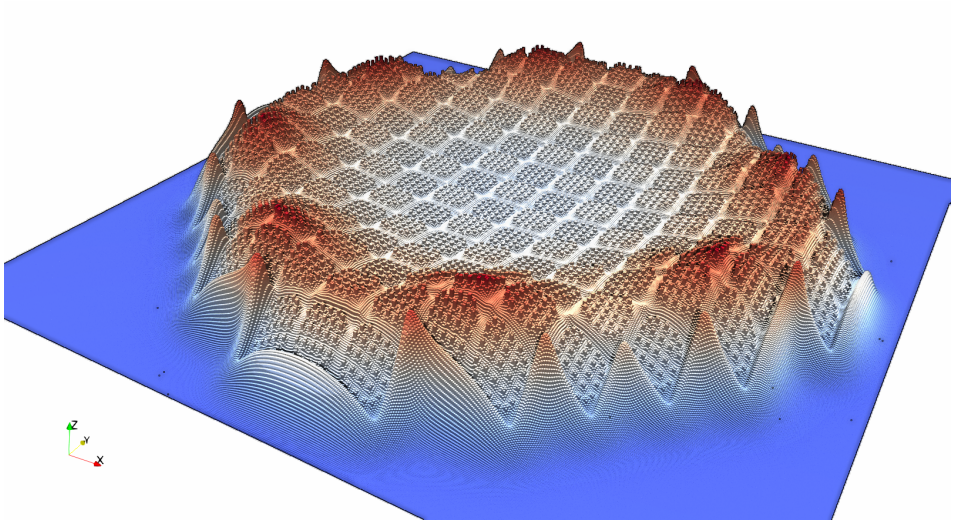
- Discrétisation
  - 2 groupes
  - S_{12}
  - 2×2 mailles par cellule
  - 756 mailles axiales
  - Total : 2.5×10^{11} DDLs
- Temps de calcul

Découpage	1,1,1	4,4,4
N_{coeurs}	24	1536
T (s)	916.4	31.1
speed-up	-	29

- Comparaison à Denovo :
  - 123 s. sur 20400 coeurs

Conclusions

- Implémentation “immédiate” :
  - conditions aux limites de Dirichlet non-homogènes
  - une communication point-à-point supplémentaire
- Peu de perte d’efficacité par rapport à DSA...
  - efficacité estimable a priori / en ligne
  - meilleur en pratique qu’en théorie
  - robuste (pas nécessaire de résoudre exactement les problèmes de diffusion)



- ...sous certaines conditions
  - géométrie suffisamment optiquement épaisse
  - semble être le cas pour les calculs REP 3D cœur complet
  - quid des calculs assemblage ?

Merci pour votre attention !

Questions ?

[1] François Févotte. Piecewise Diffusion Synthetic Acceleration scheme for neutron transport simulations in optically thick systems. *Annals of Nuclear Energy*, 118 :71–80, 2018.

[2] Salli Moustafa, François Févotte, Mathieu Faverge, Laurent Plagne, and Pierre Ramet. Efficient parallel solution of the 3D stationary Boltzmann transport equation for diffusive problems. Preprint.