

RENCONTRES ARCANE 3^{ÈME} ÉDITION

17 AVRIL 2023



ROADMAP ET POINT SUR L'OPEN SOURCE



- Evolution d'Arcane au cours de l'avenant n°6 (2021-2024)
 - Développer une application Arcane
 - Développer une application modulaire
 - Développer une application performante
- Feuille de route produits Open Source
 - Alien
 - Les collaborations
 - Documentation
- Travaux futurs
 - Deuxième moitié avenant Arcane 2023-2024
 - Pistes de réflexion futur avenant
 - PEPR NumPEx



ROADMAP ET POINT SUR L'OPEN SOURCE



- Evolution d'Arcane au cours de l'avenant n°6 (2021-2024)
 - Développer une application Arcane
 - Mise en Open Source : Septembre 2021
 - Développement de mini-app/démonstrateurs
 - ShArc
 - QAMA (Quick-Silver)
 - FemTest1
 - Développer une application modulaire
 - Nouveaux maillages
 - Utilisation directe d'Arcane
 - Développer une application performante
 - API GPU

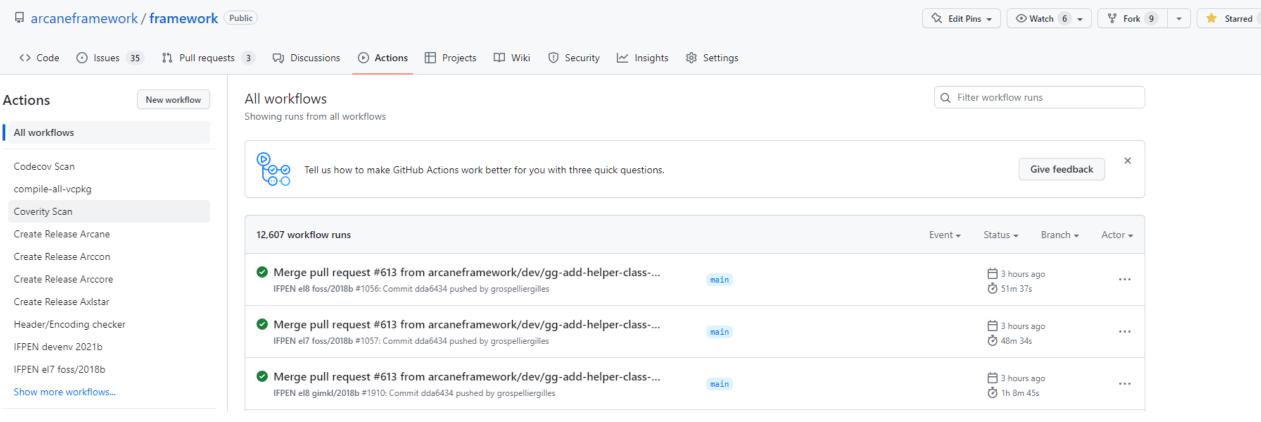




- Développer une application Arcane
 - Mise en Open Source : Septembre 2021 (ouverture publique du dépôt GitHub)
 - Mise en place d'un CI complet pour toute la chaine
 - Les Pull requests sont testées avant le merge
 - Mise en place de docker représentatifs de nos environnements de travail
 - Centos 7, Rocky 8
 - Ubuntu 20 et 22
 - Windows 10
 - Utilisation de ressources gratuites uniquement (pour l'instant ;-))
 - Ressources GitHub et CircleCI
 - L'accès aux GPU (payant) pourrait être intéressant
 - Suivi de la qualité des développements
 - Codacy et Coverity (analyse statique de code)
 - Codecov (couverture de test)



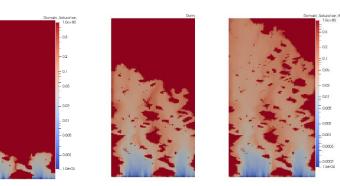


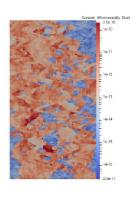






- Mini-Application/Démonstrateur : ShArc
- Qu'est-ce que ShArc ?
 - Une appli de simulation d'un écoulement en milieu poreux diphasique
 - Résolu par des outils numériques classiques :
 - Discrétisation Fully-implicit
 - Schémas volume finis 2-points
 - Solveur de Newton (ArcGeoSim)
 - Alien pour les solveurs linéaires
- Sur quel outillage s'appuie-t-il ?
 - Gump : un outil de génération de modèle de données d'un système physique
 - Law: un outil de génération pour l'évaluation des lois physiques
 - Audi : un outil de différenciation automatique
- Ces outils sont inclus dans la bibliothèque partagée ArcGeoSim









Outillage de ShArc – couplage des outils

Tous ces outils concourent au montage de la jacobienne du problème

```
const Arcane::Integer iequation = iphase.index();
if (cell_k.isOwn()) {
   residual[iequation][cell_k] += flux_kl;
   jacobian[iequation][cell_k][stencil] += flux_kl;
}
if (cell_l.isOwn()) {
   residual[iequation][cell_l] -= flux_kl;
   jacobian[iequation][cell_l][stencil] -= flux_kl;
}
```

Calcul du flux (Gump + Lois + Audi)

Ajout du flux au résidu et à la jacobienne



Evolution d'Arcane au cours de l'avenant n°6



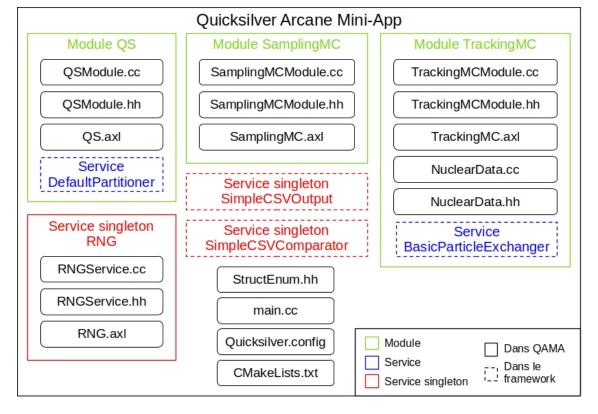
- Mini-Application/Démonstrateur : QuickSilver Arcane Mini-App (QAMA)
 - Simulation de transport de particule Monte-Carlo simplifiée
 - Portage de QuickSilver (LLNL) (https://github.com/LLNL/Quicksilver)
 - Représente les éléments principaux du code Mercury (gros code Monte-Carlo du LLNL)
- Disponible sur GitHub : https://github.com/arcaneframework/arcane-benchs



Evolution d'Arcane au cours de l'avenant n°6



Mini-Application/Démonstrateur : QuickSilver Arcane Mini-App (QAMA)



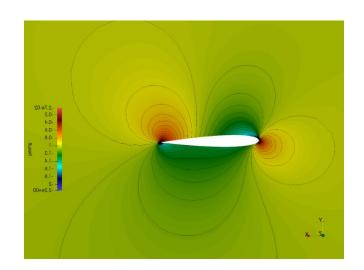


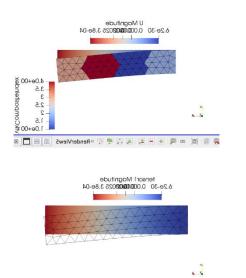


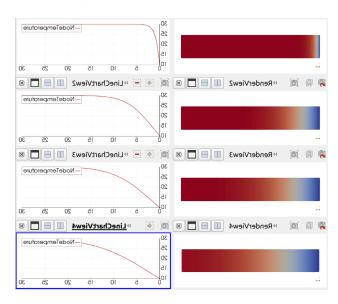
- Mini-Application/Démonstrateur : FEMTEST1 (https://github.com/arcaneframework/femtest1)
- Collaboration avec le CEA/DES (Direction des Énergies)
 - Démonstrateur pour ajouter des mécanismes pour gérer les éléments finis dans Arcane
 - Plusieurs exemples: calcul de structures, aérodynamique, équation de la chaleur

■ A terme servira de base pour un code de calcul de structures pour simuler l'impact des

séismes sur les bâtiments











- Mini-Application/Démonstrateur : Athena
- Ocode interne CEA/DAM de transport de particules
 - Neutronique déterministe
 - Implémentation MPI/TBB ou MPI/GPU

 P.Anguill, P.Cargo, C.Enaux, P.Hoch, E.Labourasse, G.Samba: An asymptotic preserving method for the linear transport equation on general meshes, Journal of Computational Physics 450 (2022) 110859

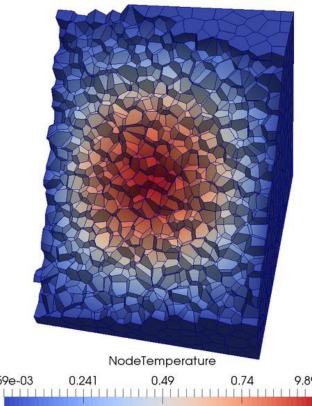


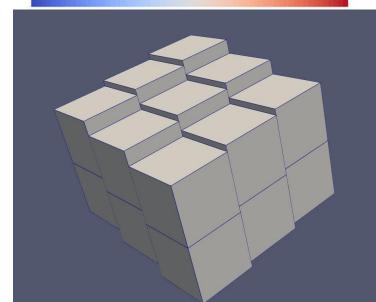
Rencontres Arcane
17 avril 2023

- Développer une application modulaire
 - Nouveaux maillages
 - Utilisation directe d'Arcane



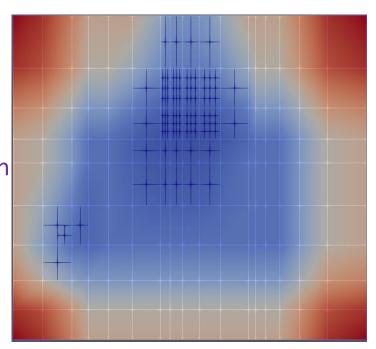
- Nouveaux maillages : polyédrique
- Import format Vtk, export Ensight, en cours de finalisation
- Quelques maillages de tests
 - « Vrai » polyédriques
 - Maillage mis en conformité
- Représentatifs des deux types de use case en géosciences
 - Génération pour mieux prendre en compte géométries complexes
 - Thèse Alexandre Marin (Laurent Astart Alexandra Bac)
 - Mise en conformité de maillages CPG (raccord sur des failles)







- Nouveaux maillages : AMR cartésien par patch
- Enrichi la notion de maillage cartésien en ajoutant la notion de Patch
 - Un patch est une zone rectangulaire du maillage sur laquelle on raffine les mailles
 - Plusieurs patchs sont possibles
- Utilise les fonctionnalités AMR disponibles dans Arcane
- Évolutions planifiées
 - Structure de données spécifique pour l'AMR cartésien par patch
 - Optimisation mémoire
 - Duplication des nœuds et faces dans les patchs
 - Numérotation des entités optimisé pour le cartésien







- Utilisation directe d'Arcane
 - API GPU utilisable directement
 - Possibilité d'utiliser Arcane
 - sans passer par la boucle en temps
 - sans utiliser de jeu de données
- Plusieurs exemples dans le code source
 - mini_nbody
 - odirect_cartesian
 - standalone_accelerator



- Développer une application performante
 - Ajout d'une API pour cibler les accélérateurs
 - Implémentation actuelle avec CUDA
 - Boucle de calcul unifiée entre séquentiel, multi-thread et accélérateur
 - Un seul exécutable avec la possibilité de choisir lors de l'exécution le support d'exécution
 - Démonstrateur MaHyCo (https://github.com/cea-hpc/MaHyCo)
- Développements planifiés
 - Support des matériaux/milieux et des maillages cartésiens et AMR par patch
 - Variables multi-dimensionnelles avec agencement spécifique (layout)
 - Optimisations diverses
 - Support d'autres API (ROCm ou oneAPI par exemple)



ROADMAP ET POINT SUR L'OPEN SOURCE

- Feuille de route produits Open Source
 - Alien
 - Les collaborations
 - Documentation

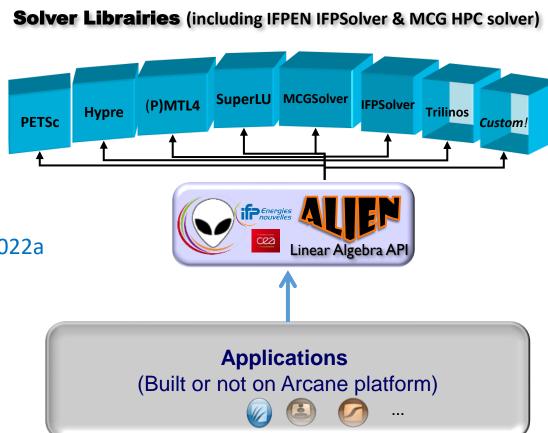




FEUILLE DE ROUTE PRODUITS OPEN SOURCE



- Alien
 - Plusieurs tests de solveurs GPU
 - Branchements Ginkgo
 - Branchement Trilinos
 - Branchement Hypre GPU
 - Communication et publication à Eccomas 2022
 - Présentation d'Alien et benchmark de solveurs
 - https://www.scipedia.com/public/Gratien_et_al_2022a
 - Travaux d'amélioration de la redistribution





FEUILLE DE ROUTE PRODUITS OPEN SOURCE



- Les collaborations
 - Andra
 - Alien : branchement dans le code Traces (transport radionucléides en milieu poreux)
 - Couplage de codes (branchement de preCICE dans un code Arcane)
 - CEA/DES
 - FemTest1
 - Enrichir le support des éléments finis dans Arcane
 - Réaliser une composante utilisable par d'autres applications : ArcaneFEM.
 - Prototype ArcaneSnSolver (voir A. Callo) : neutronique déterministe sur maillage en nid d'abeille
 - Présentation d'Arcane/Alien
 - INRIA
 - ONERA
 - BRGM





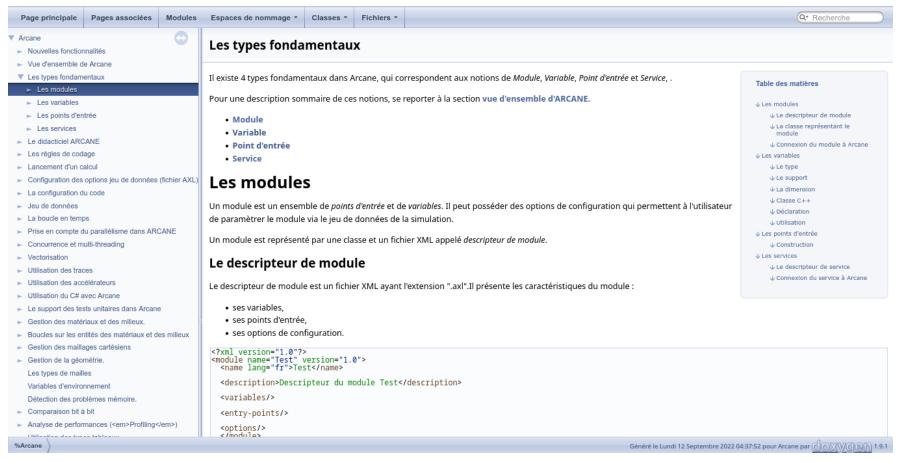
Documentation

- Grande mise à jour publiée en Octobre 2022
- Toujours générée grâce à Doxygen
- Mise à jour des pages et réorganisation des pages en chapitres
- Passage en 100 % Markdown
- Thème « Doxygen Awesome » (disponible sur GitHub) avec plusieurs ajouts
- Ajout de la possibilité, pour les utilisateurs, de personnaliser la documentation via une page dédiée
- Disponible ici : https://arcaneframework.github.io





Arcane 3.7.6.0









Documentation utilisateur



Nouveautés et changements

Personnalisation de la doc

Débuter avec Arcane

Types fondamentaux

Module

Service

Descripteur de module/service (.AXL)

Jeu de données (.ARC)

Configuration du code (.CONFIG)

Boucle en temps

Tableaux

Utilisation de la classe NumArray

Exécution, runtime

Généralités

Exemples et didacticiel

Accélérer un code

Matériaux et milieux

Debug, performance et validation

Utilisation d'autres langages

Entités, maillages et connectivités

Services et modules disponibles

Liste des éléments obsolètes

Modules

Module

Un module est un ensemble de points d'entrée et de variables. Il peut posséder des options de configuration qui permettent à l'utilisateur de paramétrer le module via le jeu de données de la simulation.

Un module est représenté par une classe et un fichier XML appelé descripteur de module.

Descripteur de module

Le descripteur de module est un fichier XML ayant l'extension ".axl". Il présente les caractéristiques du module :

- · ses variables,
- · ses points d'entrée,
- ses options de configuration.

```
1 <?xml version="1.0"?>
 2 <module name="Hydro" version="1.0">
     <name lang="fr">Hydro</name>
     <description>Descripteur du module Hydro</description>
     <variables>
     </variables>
     <entry-points>
     </entry-points>
12
       <!-- Service de type IEquationOfState. -->
     </options>
16 </module>
```

Par exemple, le fichier Hydro.ax1 ci-dessus présente le module nommé Hydro dont la classe de base, est HydroModule (cas général). TODO: ajouter doc référence sur les autres attributs du module.

Les variables, les points d'entrée et les options seront décrits dans le chapitre Descripteur de module/service (.AXL).

Classe représentant le module

%Arcane Types fondamentaux

Généré le Lundi 10 Avril 2023 02:26:45 pour Arcane par donnée 1.9.6

Table des matières

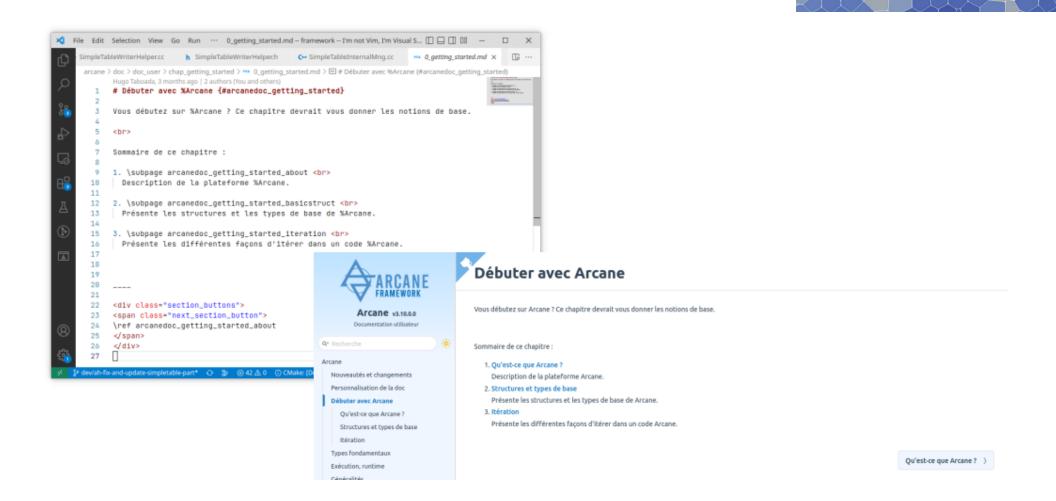
Descripteur de module

Classe représentant le

Connexion du module à

Arcane







Rencontres Arcane

Energies

17 avril 2023



Note

Les valeurs de l'instance ne sont pas initialisées lors de la construction. Il faut appeler la méthode Arcane::NumAr accessible depuis l'hôte) si on souhaite remplir le tableau avec une valeur donnée.

Il est possible de spécifier lors de la construction ou avec le méthode Arcane::NumArray::resize() le nombre d'éléments d d'arguments correspond au nombre de dimensions dynamiques de l'instance :

```
// Tableau 2D avec 2 dimensions statiques (3x4)
     Arcane::NumArray<double, Arcane::ExtentsV<3,4>> t4;
                                                           nExtent,5>> t5(8);
 Tableaux multi-dimensionnels pour les types numériques accessible sur accélérateurs.
 Definition: utils/NumArray.h:619
                                                           nExtent,7,Arcane::DynExtent>> t6(3,9);
     // Redimensionne t2 avec 6x5 valeurs
     t2.resize(6);
     // Redimensionne t3 avec 2x7x4 valeurs
10 t3.resize(2,4);
11 // Redimensionne al avec 12 valeurs
12 a1.resize(12);
13 // Redimensionne a2 avec 3x4 valeurs
14 a2.resize(3,4);
15 // Redimensionne a3 avec 2x7x6 valeurs
16 a3.resize(2,7,6);
     // Redimensionne al avec 2x9x4x6 valeurs
     a4.resize(2,9,4,6);
```

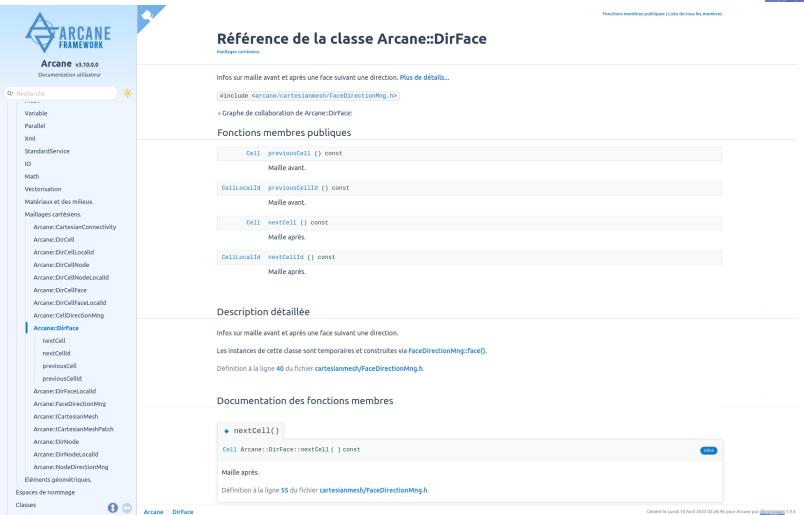
Avertissement

Le redimensionnement ne conserve pas les valeurs actuelles du tableau



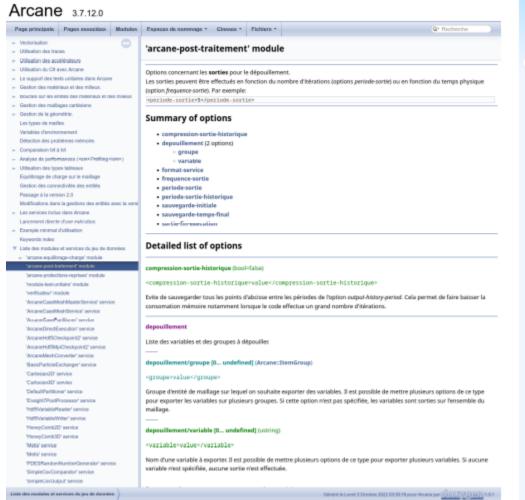
















ROADMAP ET POINT SUR L'OPEN SOURCE

Travaux futurs

- Deuxième moitié avenant Arcane 2023-2024
- Pistes de réflexion futur avenant
- PEPR NumPEx





TRAVAUX FUTURS

- Deuxième moitié de l'avenant n°6 (2023-2024)
 - Développer une application modulaire
 - Nouvelle brique de base gérant les variables
 - API de création dynamique de service ou de module
 - Multi-représentation pour le maillage
 - Développer une application performante
 - Finalisation API GPU
 - Profilage, optimisation et non régression en perf (ShArc)
 - Déploiement multi-thread et SIMD (ShArc)





TRAVAUX FUTURS



- Pistes de réflexion futur avenant
 - La réflexion démarrera à partie de mi-2023
 - Quelques pistes
 - Un volet IA (inférence efficace de réseaux de neurones)
 - Un volet R&D via NumPEX : post-doctorats commun IFPEN/CEA
 - Intégration des travaux NumPEx (ShArc)
 - Toutes vos propositions...!



TRAVAUX FUTURS

● PEPR NumPEx (Marc Pérache)





Innover les énergies

Retrouvez-nous sur:

www.ifpenergiesnouvelles.fr

y @IFPENinnovation

