



HAL
open science

Demande Session Spéciale Joliot-Curie 2021

R. Varennes

► **To cite this version:**

| R. Varennes. Demande Session Spéciale Joliot-Curie 2021. 2023. hal-03923056

HAL Id: hal-03923056

<https://hal.science/hal-03923056>

Preprint submitted on 4 Jan 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Contexte

Une partie des ressources du calculateur Joliot-Curie précédemment dédiée au programme européen PRACE a été mise à disposition pour un usage national.

Ressources disponibles et planning

La session spéciale Joliot-Curie ROME et Joliot-Curie KNL est prévue de début mai 2021 à fin octobre 2021. Les heures disponibles pour cette session sont :

- 188 Mh sur ROME
- 54 Mh sur KNL

Critères à respecter

Les projets de la session spéciale, devront nécessairement valider les critères suivants :

- Intérêt scientifique
- Utilisation de ressources importantes, en termes de nombre d'heures, de nombre de cœurs, non accessibles dans un cadre de production standard via le DARI.
- Sur la partition ROME, les codes de calcul devront présenter une très bonne extensibilité des performances (*strong scaling*) sur **au moins 4096 cœurs**.
- Les projets doivent être de taille ≥ 10 Mh (sur les 6 mois de la session spéciale)

Processus de sélection

Chaque porteur de projet candidat remplit cette fiche de candidature en précisant les enjeux scientifiques et les ressources de calcul/stockage nécessaires à la réalisation de son projet. Cette fiche doit être transmise aux présidents du comité thématique duquel le projet relève ainsi qu'au TGCC (pour analyse technique hotline.tgcc@cea.fr). Chaque président de comité thématique analyse les candidatures de son domaine, il les transmet ensuite à GENCI et au TGCC, qui vont procéder conjointement à la sélection finale. Les demandes seront accordées dans l'ordre d'arrivée et l'appel sera clos dès que le nombre d'heures disponibles sera atteint.

Formulaire de candidature à compléter

Discipline scientifique/Comité thématique :

Recherche sur la fusion par confinement magnétique – CT5

Coordonnés du porteur de projet « Session spéciale »

Xavier Garbet: xavier.garbet@cea.fr

Institut de Recherche sur la Fusion Magnétique, CEA Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance

Tél : 04 42 25 61 19

Utilisateurs du projet :

Laure Vermare: laure.vermare@lpp.polytechnique.fr

Laboratoire de Physique des Plasmas, Ecole Polytechnique, F-91128 Palaiseau

Robin Varennes: robin.varennes@cea.fr

Guilhem Dif-Pradalier : guilhem.dif-pradalier@cea.fr

Institut de Recherche sur la Fusion Magnétique, CEA Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance

Tél : 04 42 25 61 19

Contexte, enjeux et objectifs généraux

Nom du projet : Impact du Ripple sur les Écoulements et la Turbulence dans les Tokamaks (IRETT)

Objectifs du projet et enjeu scientifique :

La compréhension de l'organisation des écoulements dans un tokamak est fondamentale pour le confinement. Les origines de ces écoulements sont multiples. Certaines sont purement thermodynamiques et dépendent des gradients spatiaux de densité et température, d'autres proviennent d'instabilités menant par exemple à la turbulence et d'autres proviennent de sources extérieures (injection de neutres, chauffage par onde ...). Notamment, les écoulements turbulents, inévitables dans les tokamaks, constituent la principale source de détérioration du confinement. Il est possible de réduire cette activité turbulente grâce à des « barrières de transport » qui sont des zones très localisées dans lesquelles le cisaillement de vitesse des écoulements est suffisamment important pour réduire la taille des structures turbulentes et le transport associé. La physique qui gouverne l'établissement des barrières de transport n'est toujours pas maîtrisée et constitue une part notable des recherches actuelles en fusion. Une question ouverte est l'impact de la modulation du champ magnétique due au nombre fini de bobines toroïdales sur la transition vers ces barrières de transport. En effet, s'il est connu que la prise en compte d'une telle perturbation, appelée « ripple », induit un freinage du plasma, son interaction avec la turbulence n'a jamais été étudiée numériquement. Les enjeux sont de taille. En

effet, dans la plupart des tokamaks dont ITER, le ripple n'est pas une perturbation négligeable et pourrait même constituer la contribution principale aux écoulements dans certaines régions du plasma.

Description de l'étude et résultats attendus :

L'étude consiste à réaliser des simulations d'un plasma de tokamak réaliste, donc turbulent, incluant des perturbations magnétiques tridimensionnelles afin de caractériser les écoulements générés par les processus turbulents et collisionnels. L'auto-organisation des écoulements et leur rétroaction sur le transport turbulent seront aussi étudiées. Le projet est envisagé en deux parties. Dans un premier temps, des simulations avec des profils « test » de perturbation magnétique, telles que l'amplitude maximale du ripple est localisée à mi-rayon, loin des parois, seront effectuées. Ces simulations permettront de se placer dans un cadre se rapprochant des approximations théoriques, permettant de comparer les résultats numériques aux prédictions analytiques.

Dans un second temps, des simulations avec des profils réalistes de ripple seront réalisées et comparées directement aux mesures expérimentales. Parmi les grandeurs importantes pour la transition, une attention particulière sera portée au champ électrique radial, à la vitesse des écoulements et à l'intensité turbulente.

De telles simulations nécessitent un code capable de prendre en compte une dynamique multi-échelle, allant de l'évolution rapide des micro-structures turbulentes à l'évolution lente des gradients thermodynamiques due aux collisions. L'évolution de la fonction de distribution des particules en 6 dimensions (3 spatiales et 3 en vitesse) pour les échelles de temps d'intérêt sont pour le moment hors de portée des calculateurs.

Une extraction de la dynamique rapide du mouvement cyclotronique permet de se ramener à deux dimensions en vitesse, dont l'une correspond à un invariant du mouvement. Cette réduction est effectuée en moyennant l'équation cinétique sur le mouvement cyclotronique des particules autour des lignes de champ magnétique. La fonction de distribution suivie n'est plus celle des particules mais celle des « gyrocentres », les centres virtuels du mouvement cyclotronique. Cependant, les phénomènes d'intérêt, c'est-à-dire la turbulence et les collisions, sont toujours bien définis et résolus dans cette description gyrocinétique. La cohérence est assurée par un couplage entre l'équation gyrocinétique et une équation de Poisson via un calcul de la densité de charge du plasma.

Le code utilisé, GYSELA-X, est un code dit gyrocinétique, faisant évoluer la fonction de distribution complète des gyrocentres dans l'ensemble du tokamak. Le maillage est 5D : le rayon r , l'angle poloidal θ et l'angle toroidal φ constituent les dimensions dans l'espace réel et la vitesse parallèle aux ligne de champ v_{\parallel} ainsi que le moment magnétique μ constituent les dimensions dans l'espace des vitesses.

La résolution spatiale est contrainte par le paramètre ρ_* qui est défini comme le rayon de Larmor ionique à mi-rayon sur le petit rayon a du tokamak. A titre d'exemple, $\rho_* = 1/1000$ pour ITER ou encore $\rho_* = 1/700$ pour le tokamak WEST (anciennement Tore Supra).

La résolution temporelle est contrainte par la fréquence de transit des particules le long du champ magnétique.

La résolution en vitesse est contrainte par les résonances ondes/particules, et la fréquence de collision, qui régularise la fonction de distribution dans l'espace des vitesses. La collisionnalité est mesurée dans le code par une grandeur sans dimension définie comme une fréquence de collision normalisée à une fréquence de transit calculée à mi-rayon, et notée ν_* . Un plasma de tokamak est chaud et peu collisionnel, ce qui fixe $0.01 < \nu_* < 0.1$ dans une vaste gamme de tokamaks.

Variables dimensionnantes du calcul :

Les simulations envisagées visent à se rapprocher de conditions réalistes.

Du point de vue de la résolution spatiale, cela revient à fixer le rayon de Larmor normalisé ρ_* . Un ρ_* réaliste est trop coûteux numériquement, mais il est possible de s'en rapprocher. Il a donc été choisi $\rho_* = 1/250$ pour l'ensemble des simulations envisagées. Un maillage adapté est alors $N_r \times N_\theta \times N_\varphi = 512 \times 1024 \times 128$ sur un huitième de tore. Un œil habitué pourrait s'étonner de la résolution élevée dans la direction toroidale : celle-ci est spécifiquement utile pour le ripple.

Du point de vue de la résolution dans l'espace des vitesses, cela revient à fixer ν_* . Il a été choisi $\nu_* = 0.1$ qui est une valeur typique des décharges dans WEST. Un maillage adapté est alors $N_{v\parallel} \times N_\mu = 128 \times 48$.

Les simulations seront effectuées avec une seule espèce ionique, du deutérium, et des électrons adiabatiques (perturbation de densité proportionnelle au potentiel électrique perturbé). En conséquence, **une seule fonction de distribution**, celle du deutérium, sera traitée.

Concernant le temps d'évolution de la fonction de distribution requis, des travaux précédents ont montré qu'il faut **6000 itérations** avec un pas de temps $\Delta t = 25$ périodes cyclotroniques pour obtenir un équilibre en présence de turbulence.

7 simulations sont envisagées :

- Une simulation type Tore Supra sans ripple servant de référence pour les comparaisons;
- Trois simulations type Tore Supra avec des perturbations "test" d'amplitudes différentes, permettant d'établir un scaling de la modification de la turbulence ainsi que de comparer aux prédictions théoriques;
- Une simulation type Tore Supra avec ripple réaliste pour comparaison avec l'expérience ainsi que l'étude des interactions avec la paroi;
- Une simulation type WEST sans ripple servant de référence pour les comparaisons;
- Une simulation type WEST avec ripple réaliste pour comparaison avec l'expérience ainsi que l'étude des interactions avec la paroi;

Moyens de calcul

Partition visée : ROME

Estimation du volume des ressources calcul nécessaires :

L'estimation des ressources nécessaires est basée sur notre expérience sur la machine Irene-SKL. Des tests de scalabilité et des comparaisons réalisées sur les différentes partitions du calculateur Joliot-Curie en janvier 2020 ont montré que le code GYSELA-X est 25% plus rapide sur la partition AMD que sur la partition SKL. Et que le code est 2.3 fois plus rapide sur la partition SKL que sur la partition KNL. Comme nous visons la partition AMD pour cette demande nous appliquons un

facteur multiplicatif de 0.75 par rapport à la simulation de référence (cf. Table 1) tournée sur la partition SKL.

Le nombre de cœurs demandé est $N_{species} \times N_r^{proc} \times N_\theta^{proc} \times N_\mu^{proc} \times N_{thread} = 1 \times 2 \times 4 \times 48 \times 32 = 12288$. L'allocation d'heures demandée est 3.4Mh pour chacune des 7 simulations envisagées, soit **24Mh au total**. Le volume de données total généré par les simulations est estimé à 75 TB. Un résumé des ressources nécessaire pour une simulation est proposé dans la Table 1.

ρ_*	1/250
3D spatial mesh	$N_r \times N_\theta \times N_\varphi = 512 \times 1024 \times 128$
2D velocity grid	$N_{v\parallel} \times N_\mu = 128 \times 48$
Nb kinetic species	$N_{species} = 1$
Time step	$\Delta t = 18$
Nb MPI process	$N_{MPI} = N_r^{proc} \times N_\theta^{proc} \times N_\mu^{proc} \times N_{species}$ $= 2 \times 4 \times 48 \times 1 = 384$
Nb thread	$N_{thread} = 32$
Nb of cores	$N_{MPI} \times N_{thread} = 12288$
Times per iteration [s]	75.0
Memory storage at each	
- all 0-2D diag:	130 MB
- the fourteen 3D diag:	7.2 GB
- two restart files	10.0 TB
GYSELA simulation of 6000 iterations :	
Nb of core hours : 3.4Mh	
- Required memory storage \sim 12 TB	
- 240 savings of 0-2D diag: 31 GB	
- 240 savings of 3D diag: 1.73 TB	
- saving of two 5D restart files: 10.0 TB	

Table 1 : Caractéristiques pour une simulation typique avec une seule espèce et un huitième de tore avec $\rho^ = 1/250$. Machine de référence : TGCC IRENE-SKL*

Codes utilisés et dépendances

Nom : GYSELA-X (successeur de GYSELA).

Historique : Depuis une vingtaine d'années, GYSELA a été graduellement développé, amélioré, vérifié, et a fait l'objet de plusieurs benchmarks. Le code est continuellement maintenu et mis à jour par une équipe interdisciplinaire de physiciens des plasmas, de mathématiciens appliqués, d'ingénieurs informatique, et d'étudiants, en fort lien avec les expérimentalistes des tokamaks. GYSELA a bénéficié de financements européens et a été sélectionné pour 7 "grand challenges" et 2 appels PRACE. GYSELA a conduit à de nombreux progrès scientifiques qui ont fait l'objet d'une centaine d'articles dans des revues à comité de lecture.

Langage : Fortran

Modèle de parallélisme : hybride (MPI + OpenMP)

Type de code : semi-Lagrangien, global, full-f, flux-driven, électrostatique

Equations discrétisées : équation de Vlasov gyrocinétique (5D) et équation de quasi-neutralité locale.

Méthodes numériques : Backward semi-Lagrangian, avec interpolation par splines cubiques, time-splitting, et prédicteur-correcteur [V. Grandgirard, et al., *Comput. Phys. Communications*, 35 (2016) 207].

Configuration et nombres de cœurs sur lesquels le code a déjà été utilisé :

Déjà utilisé sur une douzaine d'architectures HPC, dont :

(1) IRENE-KNL, IRENE-SKL et IRENE-AMD

(2) MARCONI-A3 (SKL),

(3) INTEL Xeon (Westmere, Sandy Bridge, Ivy Bridge, Haswell, Broadwell), INTEL KNL

(4) IBM Bluegene/Q, Power 8.

Nombre de cœurs : typiquement de 1024 à 16384 cœurs

Un test de "strong scaling" a été effectué début 2020 sur la partition AMD de la machine Irene-TGCC. Une efficacité relative de 80% est obtenue sur 49,152 cœurs (voir Fig. 1). Ce test a été réalisé avec un maillage 5D proche de celui que nous utiliserons pour ce projet.

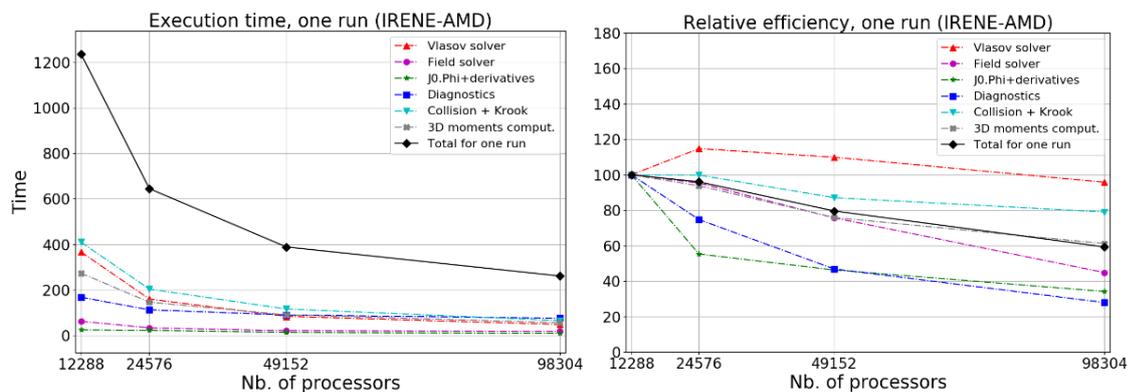


Figure 1: « Strong scaling » du code GYSELA-X sur IRENE-AMD (2020). Gauche : Temps d'exécution. Droite : efficacité relative.

Des tests ont également été conduits sur les partitions KNL et SKL de la machine IRENE-TGCC. Les résultats montrent que le code est ~25% plus rapide sur IRENE-AMD que sur IRENE-SKL (cf. Table 2). Ces tests ont également indiqué le choix optimal en termes de processus MPI (1 MPI process per socket) et d'utilisation de l'hyperthreading sur cette machine (cf. Table 3).

Nb MPI process (N_{MPI}) ($N_{proc,r} \times N_{proc,\theta} \times N_{proc,\mu}$)	384 ($2 \times 4 \times 48$)	768 ($4 \times 4 \times 48$)	1536 ($4 \times 8 \times 48$)	3072 ($8 \times 8 \times 48$)	6144 ($8 \times 16 \times 48$)
Memory per MPI process	46.1 GB	23.9 GB	13.7 GB	6.9 GB	5.2 GB
Irene SKL :					
Nb thread (N_{thread})	24	24	24	24	X
Nb MPI process / node	2	2	2	2	X
Nb cores (= $N_{MPI} \times N_{thread}$)	9216	18432	36864	73728	no enough
Memory per node	92.2 GB	47.8 GB	27.4 GB	13.8 GB	nodes
(Memory percent of the node)	(51.2 %)	(26.5 %)	(15.2 %)	(7.6 %)	X
CPU time [s] for 8 iterations	1566.23	759.09 s	450.26	no results	X
Relative efficiency [%]	100.0	103.2	87.0	no results	X
Irene AMD :					
Nb thread (with hyperthread=2)	32	32	32	32	32
Nb MPI process / node	8	8	8	8	8
Nb cores (= $N_{MPI} \times N_{thread}/2$)	6144	12288	24576	49152	98304
Memory per node	out of	191.2 GB	109.6 GB	55.2 GB	27.04 GB
(Memory percent of the node)	memory	(74.6 %)	(42.8 %)	(21.5 %)	(10.5 %)
CPU time [s] for 8 iterations	X	1183.40	606.50	366.68	236.92
Relative efficiency [%]	X	100.0	97.6	80.7	62.4

Table 2 : Etude de scalabilité sur TGCC-IRENE SKL et AMD : temps CPU pour 8 pas de temps.

	KNL	SKL	AMD
Machine characteristics :			
Nb cores/node	64	48	128
Hyperthreading	2	1	2
Memory per node in GBytes	96 GB	180 GB	256 GB
Max number of cores	52992	79488	293376
Optimal configuration for GYSELA :			
Nb threads	32	24	32
Hyperthreading	yes	no	yes
Nb MPI process / node	2	2	8

Table 3 : Choix optimal pour les simulations GYSELA sur les partitions KNL, SKL et AMD d'IRENE.

Existence ou non d'un système de protection/reprise (checkpoint/restart) : Oui, systèmes de checkpoint et de restart.

Logiciels et bibliothèques nécessaires : HDF5.

Type et Version du compilateur : de nombreux compilateurs ont été testés, typiquement : compilateur Intel.

Résultats

Le post-traitement des résultats est réalisé en Python.

