

Etude de la qualité numérique de codes numériques industriels : problématique, premiers résultats et perspectives.

Christophe DENIS, EDF R&D SINETICS

Mots-clés : code numérique industriel, calcul haute performance, qualité numérique.

Le résultat d'un code de simulation numérique subit plusieurs approximations effectuées lors de la modélisation mathématique du problème physique, de la discrétisation du modèle mathématique et de la résolution numérique en arithmétique flottante. Les deux premières approximations sont bien connues et maîtrisées par l'ingénieur numérique. L'usage de l'arithmétique flottante génère des erreurs d'arrondi à chaque expression arithmétique flottante ce qui peut entraîner des pertes de propriétés mathématiques. Par exemple, l'addition flottante n'est plus associative. L'étude de la qualité numérique (c'est-à-dire sa capacité à produire des résultats précis malgré les erreurs d'arrondi) indique si le calcul flottant s'est effectué sans perte de précision indépendamment des autres approximations. La qualité numérique d'un code est primordiale pour des codes industriels tels que ceux développés à EDF R&D. Ceci est encore plus important sur des architectures massivement parallèles où des trillions d'opérations arithmétiques flottantes sont exécutées chaque seconde. Il existe plusieurs méthodes de validation numérique. Citons à titre d'exemple la méthode directe et inverse, et l'arithmétique d'intervalles. A EDF R&D, il est nécessaire d'utiliser une méthode la moins intrusive possible pour éviter de ré-écrire un code industriel de plusieurs milliers de lignes pour étudier sa qualité numérique. La bibliothèque CADNA développée par le Laboratoire d'Informatique de Paris 6 apparaît la plus adaptée dans un contexte industriel [1] [2]. CADNA est basée sur la méthode CESTAC qui effectue chaque opération arithmétique N fois avec un mode d'arrondi aléatoirement choisi pour étudier la propagation des erreurs d'arrondi.

Le code industriel TELEMAT-2D est utilisé dans cet exposé pour illustrer nos propos [4]. Ce code est développé par le département LNHE d'EDF R&D. Il permet de simuler les écoulements à surface libre en résolvant les équations de Saint-Venant discrétisées avec la méthode des éléments finis. La version parallèle de TELEMAT-2D a été testée récemment sur un maillage de 25 millions d'éléments finis sur 16 384 processeurs (accélération de 3.4 entre 1024 et 4096 processeurs) montrant le potentiel de ce code pour simuler des phénomènes hydrodynamiques à grande échelle. Cependant, la performance parallèle ne doit pas masquer le fait qu'il est nécessaire d'estimer la précision finale des résultats [3]. Nous avons développé l'approche $xD + p$ qui consiste à ajouter une dimension supplémentaire p sur un champ de calcul représenté en xD dimensions. La dimension p indique le nombre de chiffres décimaux non entachés d'erreur d'arrondi. On peut ainsi visualiser par exemple l'influence de la propagation des erreurs d'arrondi lors d'une étude de sensibilité du maillage.

Le plan de l'exposé est le suivant. La problématique du contrôle de la qualité numérique des codes industriels est tout d'abord exposée. Nous présentons ensuite succinctement le code TELEMAT-2D et l'approche $xD + p$ sur un exemple. Les perspectives de ce travail portant sur d'autres codes industriels sont décrites.

Références

- [1] Jean-Luc Lamotte, Jean-Marie Chesneaux, and Fabienne Jézéquel. CADNA_C: A version of CADNA for use with C or C++ program. In *Computer Physics Communications*, volume 181(11), pages 1925–1926, 2010.
- [2] Fabienne Jézéquel, , Jean-Marie Chesneaux, and Jean-Luc Lamotte. A new version of the CADNA library for estimating round-off error propagation in Fortran programs. In *Computer Physics Communications*, volume 181(11), pages 1927–1928, 2010.
- [3] Christophe Denis, Charles Moulinec, Nathalie Durand, Robert W. Barber, David R. Emerson, Xiaojun J. Gu, Emile. Razafindrakoto, Rezza. Issa and Jean-Michel Hervouet. Simulate Accurately and Efficiently Large Scale Hydrodynamic Events. In *34th World Congress of the International Association for Hydro-Environment Engineering and Research*, Australia, 2011.
- [4] Jean-Michel Hervouet. Hydrodynamics of Free Surface Flows: Modelling with the Finite Element Method. In *John Wiley & Sons*, Chichester, 2007.