

RÉSUMÉ

Titre : Parallélisation du code de transport réactif MIN3P-THCm
Rapport n° : NWMO-TR-2015-23
Auteurs : Danyang Su¹, K. Ulrich Mayer¹ et Kerry T.B. MacQuarrie²
Société : ¹Département des sciences de la Terre, des océans et de l'atmosphère,
Université de la Colombie-Britannique
²Département de génie civil, Université du Nouveau-
Brunswick,
Date : Octobre 2015

Résumé

La modélisation du transport réactif peut nécessiter beaucoup de temps et d'espace mémoire, particulièrement pour les simulations à grande échelle et à long terme où interviennent un grand nombre de composants chimiques et d'interactions. Cette recherche avait pour objectif de mettre au point une version à exécution parallèle du code MIN3P-THCm, un code de transport réactif multicomposant polyvalent adapté aux médias poreux à saturations variables.

Le programme obtenu, nommé ParMIN3P-THCm, est capable de traiter les lourds calculs associés aux simulations du transport réactif se rapportant à de grands espaces et à de longues périodes de temps et peut être aisément exécuté sur un large éventail d'appareils, allant des ordinateurs de bureau et stations de travail à mémoire partagée aux superordinateurs à mémoire distribuée.

La parallélisation du code MIN3P-THCm (ParMIN3P-THCm) s'est effectuée suivant la méthode de décomposition de domaine basée sur des algorithmes de la bibliothèque PETSc (Portable Extensible Toolkit for Scientific Computation). La bibliothèque PETSc est également utilisée comme solveur parallèle ainsi que pour la structure des données et la communication des messages. Une approche de programmation hybride faisant appel aux bibliothèques de communication parallèle MPI et OpenMP est implantée dans le code pour tirer profit des superordinateurs de pointe qui combinent des architectures de mémoire partagée et de mémoire distribuée. Le code a comme éléments caractéristiques un fichier de configuration parallèle, une fonction d'E/S parallèle potentiellement évolutive qui permettra bientôt d'intégrer des fonctionnalités supplémentaires telles que les E/S haute performance recourant aux bibliothèques d'exécution parallèle HDF5, ainsi que des méthodes multigrille et à grilles non structurées. ParMIN3P-THCm a été créé à partir de la base pour obtenir une évolutivité sur le plan de l'exécution parallèle et jusqu'à 768 processeurs ont été utilisés simultanément pour l'exécuter et résoudre des problèmes pouvant compter jusqu'à 100 millions d'inconnues. Le code a pu générer des gains de rapidité considérables en résolution de problèmes de simulation du transport réactif, ayant été exécuté par 8 processeurs à partir d'une station de travail locale à mémoire partagée, puis par 128 processeurs sur le superordinateur WestGrid en utilisant la bibliothèque MPI et encore par le Westgrid en utilisant la parallélisation hybride MPI-OpenMP. Le code a démontré une grande évolutivité dans la modélisation de problèmes de transport réactif d'envergure.