





Du mercredi 9 au vendredi 11 octobre 2019 Maison de la Recherche et de la Valorisation Campus de Rangueil - Toulouse

Application d'OpenFOAM® sur supercalculateurs pour la modélisation du permafrost

Orgogozo L.¹, Grenier C.², Quintard M.^{3,4}, Prokushkin A.S.⁵, Pokrovsky O.S.^{1,6}, Viers J.¹, Audry S.¹.

- ¹ **Géosciences Environnement Toulouse (GET)**, Observatoire Midi-Pyrénées, Université Paul Sabatier, Université de Toulouse, 14 avenue Edouard Belin, 31400 Toulouse, FRANCE
- ² Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement (LSCE), Université Paris-Saclay, UMR 8212 CNRS-CEA-UVSQ, Orme des merisiers, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, FRANCE
- ³ Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT) Université de Toulouse, CNRS-INPT-UPS, Toulouse, FRANCE
 - 4 Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS); IMFT, F-31400 Toulouse, FRANCE
 - 5 V.N. Sukachev Institute of Forest, SB RAS, Akademgorodok, RUSSIAN FEDERATION
 - ⁶ BIO-GEO-CLIM Laboratory, Tomsk State University, Lenina 35, Tomsk, RUSSIAN FEDERATION









Modélisation du permafrost : impacts du changement climatique sur les régions boréales?

-100





Permafrost en cours de dégel en Sibérie (Imaggeo, Guido Grosse)



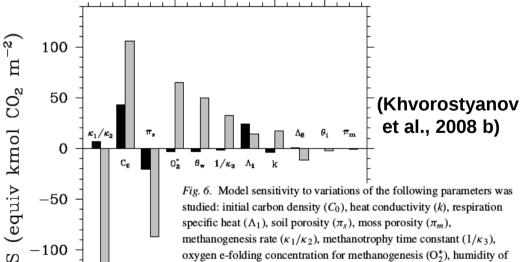
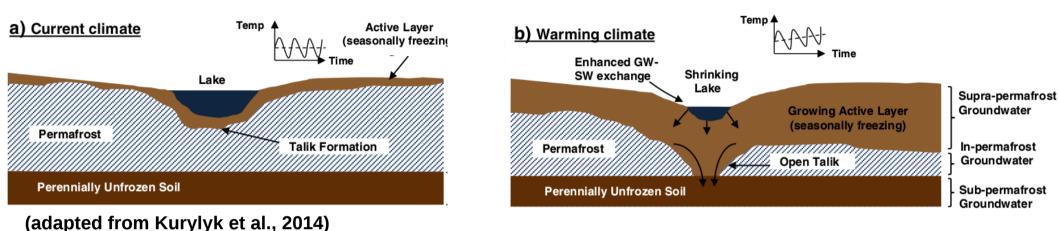


Fig. 6. Model sensitivity to variations of the following parameters was studied: initial carbon density (C_0) , heat conductivity (k), respiration specific heat (Λ_1) , soil porosity (π_s) , moss porosity (π_m) , methanogenesis rate (κ_1/κ_2) , methanotrophy time constant $(1/\kappa_3)$, oxygen e-folding concentration for methanogenesis (O₂*), humidity of frozen deep soil (θ_i) , humidity of thawed deep soil (θ_w) , methanogenesis specific heat (Λ_2). See Table 1 and the corresponding text for explanations of the parameter meaning and values. Dark bars show the differences in the CO₂ emissions (in kmol CO₂ m⁻²) between the two extreme parameter values. Grey bars show the same quantity but for CH₄ emissions multiplied by 20 (see comment in the text).

Modélisation du permafrost : impacts du changement climatique sur les régions boréales ?



Impacts potentiellement importants sur les ressources en eau souterraine



Impacts sévères sur la stabilité des constructions

Figure 2. (a) Example of structural deformation of building caused by inadequate structural design exacerbated by permafrost warming. (b) Example of cryogenic weathering of the foundation. (c) Water leakage and accumulation around foundation piles. (d) Ground settlement developed under small heated kiosk due to permafrost degradation (Photographs by V.I. Grebenets and N.I. Shiklomanov). (Shiklomanov et al., 2017)

Applications potentielles en ingénierie : les mur de glaces autour de Fukushima

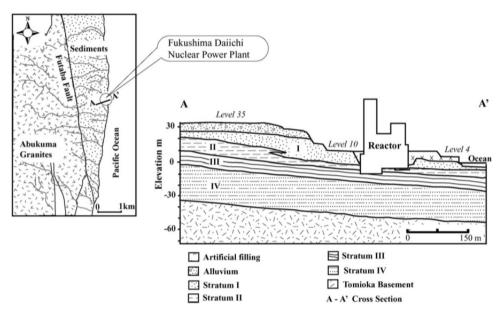
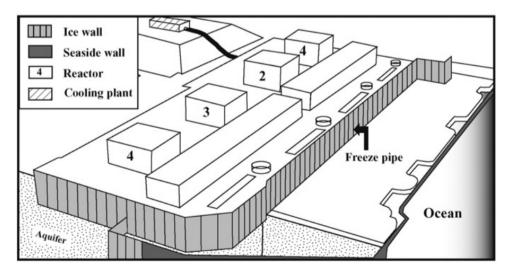


Fig. 1. Location and geological setting in vicinities of the Fukushima Daiichi nuclear power plant.



Planned Facings 37º 25' 15 Storage Tanks Legend Reactor Seaside wall Ice wall **Pacific** Bypass Ocean Subdrain Facings Coastal drain Grounwater flow Water table m 10m 410 02' 00"

Fig. 2. Plan view of storage facilities and engineering works to contain radioactively contaminated groundwater.

Fig. 6. Overview of the wall barriers around the nuclear reactors.

(d'après Gallardo and Marui, 2016)

Applications potentielles en ingénierie : gel artificiel de sols

There are numerous ways and technique of soil stabilization for deep excavation or tunneling. Some of them are grouting, heat treatment method and many more. One of the common and popular method used in the recent times is ground freezing technique.



Ground freezing is a process of converting pore water or pores into ice by continuously

(extrait de https://theconstructor.org/geotechnical/ground-freezing-technique/16944/)

Applications potentielles en ingénierie : stabilité des infrastructures



OMAINES EXPERTISES INNOVATIONS RESPONSABILITÉS CONGRÈS







Les fondations de l'usine Yamal LNG font appel à une ingénierie particulière et dédiée aux sols de type permafrost.

• • • •

(exemple tiré de https://www.ep.total.com/fr/domaines/gaz-naturel-liquefie/yamal-lng-decouvrir-notre-projet-en-russie/fondations-sur-permafrost)

Modélisation thermo-hydrologique du permafrost

Modélisation numérique des transferts couplés d'eau et d'énergie avec changement de phase dans les sols : problème complexe, vaste littérature associée (e.g.: Guymon and Luthin, 1974, Yu et al., 2018).

Long temps de calculs nécessaires : besoin de méthodes de calculs intensifs. L'utilisation du calcul massivement parallèle est requise (e.g.: Painter *et al.*, 2013, Walvoord and Kurylyk, 2016).

=> un solveur dédié développé avec l'outil de mécanique des fluides numérique généraliste open source OpenFOAM®:

PermaFoam (Orgogozo et al., 2019)

permaFoam: considered conservation equations

Transferts 3D couplés d'eau et de chaleur en milieux poreux variablement saturés avec prise en compte de l'évapotranspiration et du gel/dégel de l'eau porale (Orgogozo *et al.*, 2019)

couplages, non-linéarités

Equation de Richards avec evapotranspiration:

$$C_H \mid h \mid rac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{\cdot} \mid K_H \mid h$$
 , $T \mid \nabla \mid h + z \mid \mid + Q_{AET} \mid h$, $T \mid$

Transfert thermique avec gel/dégel:

$$\frac{\partial \mid C_{T - eq} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T} \mid \boldsymbol{T} \mid}}{\partial t} \; + \; \nabla_{\boldsymbol{\star}} \mid \boldsymbol{\mathbf{v}} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T}} \mid C_{T - eq} \mid \boldsymbol{A} \; \boldsymbol{T} \mid - \; \nabla_{\boldsymbol{\star}} \mid \boldsymbol{K}_{T - eq} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T}} \mid \nabla \boldsymbol{T} \mid \; + \; L \; \frac{\partial \theta_{+ee} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T}} \mid}{\partial t}$$

Problèmes raides, non-linéarités, couplages, peu de solutions de références :benchmark InterFrost (Grenier et al., 2018)

permaFoam: implémentation numérique

Couplages : - Séparation d'opérateurs séquentielle

- facteur d'impédance pour l'estimation de la conductivité hydraulique en conditions gelées

Non-linéarités : - une boucle de Picard pour chaque équation

- décalage temporel du terme de chaleur latente
- pas de temps adaptatifs basés sur les convergences des boucles de Picard

Equation de Richards avec evapotranspiration:

$$C_H \mid h \mid rac{\partial h}{\partial t} - \nabla_{oldsymbol{\cdot}} \mid K_H \mid h$$
 , $oldsymbol{T} \mid \nabla \mid h + z \mid \mid + Q_{AET} \mid h$, $oldsymbol{T} \mid$

Transfert thermique avec gel/dégel:

$$\frac{\partial \mid C_{T - eq} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T} \mid \boldsymbol{T} \mid}}{\partial t} \; + \; \nabla_{\bullet} \mid \textcolor{red}{\mathbf{v}} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T}} \mid C_{T - eq} \mid \boldsymbol{L} = \nabla_{\bullet} \mid \boldsymbol{K}_{T - eq} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T}} \mid \nabla \boldsymbol{T} \mid \; + \; L \; \frac{\partial \theta_{+ee} \mid \textcolor{red}{\boldsymbol{h}}, \textcolor{red}{\boldsymbol{T}} \mid}{\partial t}$$

Problèmes raides, non-linéarités, couplages, peu de solutions de références :benchmark InterFrost (Grenier et al., 2018)



The open source CFD toolbox



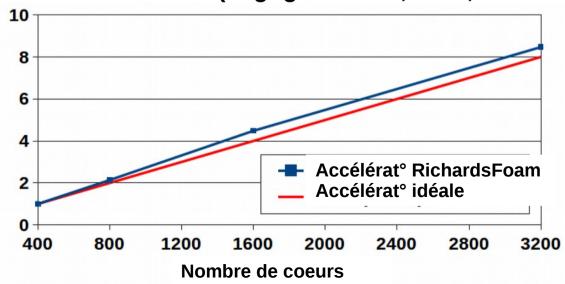
openfoam.org:



OpenFOAM®: une boite à outils réputée de mécanique des fluides numériques généraliste en open source (C++, Volumes finis, Multi-physique, Massivement parallèle)

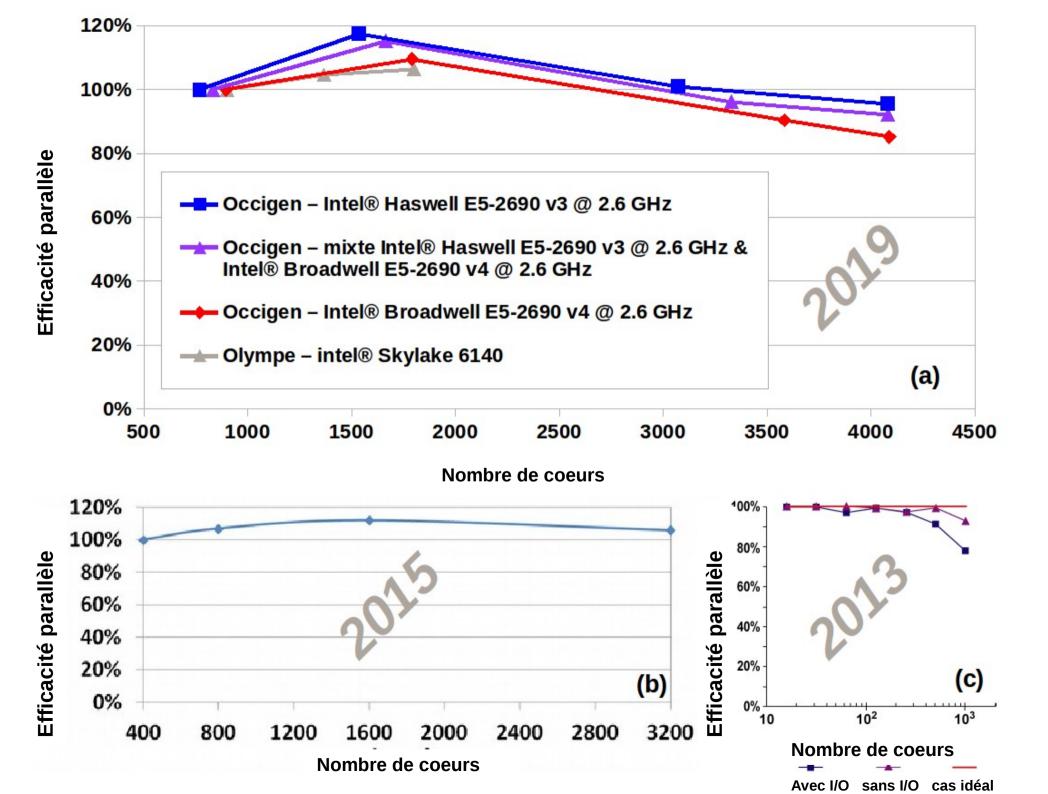
Dévelop^t collaboratifs: communauté importante et diverse, incluant des académiques (e.g.: CINECA, IHPC, HLRS) et des industriels (e.g.: Volkswagen, Huawei, FM Global)

Une capacité continuellement maintenue à utiliser efficacement les architectures de calculs modernes (Orgogozo et al., 2014, Bricteux et al., 2017)



Courbe de scalabilité extraite de Orgogozo et al., 2015

- 1.2 milliard de mailles
- De 400 à 3200 coeurs
- Obtenue sur EOS (www.calmip.univtoulouse.fr)



DOI: 10.1002/ppp.1995

RESEARCH ARTICLE

Orgogozo et al., Permafrost and Periglacial Processes 2019

Water and energy transfer modeling in a permafrostdominated, forested catchment of Central Siberia: The key role of rooting depth

Correspondence

L. Orgogozo, GET (Géosciences Environnement Toulouse), UMR 5563

Abstract

To quantify the impact of evapotranspiration phenomena on active layer dynamics in a permafrost-dominated forested watershed in Central Siberia, we performed a numerical cryohydrological study of water and energy transfer using a new open source cryohydrogeology simulator, with two innovative features: spatially distributed, mechanistic handling of evapotranspiration and inclusion of a numerical tool in

a high- performance computing toolbox for numerical simulation of fluid dynamics, OpenFOAM. In this region, the heterogeneity of solar exposure leads to strong con-

trasts in vegetation cover, which constitutes the main source of variability in hydrological conditions at the landscape scale. The uncalibrated numerical results reproduce reasonably well the measured soil temperature profiles and the dynamics of infiltrated waters revealed by previous biogeochemical studies. The impacts of thermo-hydrological processes on water fluxes from the soils to the stream are discussed through a comparison between numerical results and field data. The impact of evapotranspiration on water fluxes is studied numerically, and highlights a strong

¹GET (Géosciences Environnement Toulouse), UMR 5563 CNRS/UR 234 IRD/UPS, Observatoire Midi-Pyrénées, Université de Toulouse, Toulouse, France

²V.N. Sukachev Institute of Forest, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Krasnoyarsk, Russia

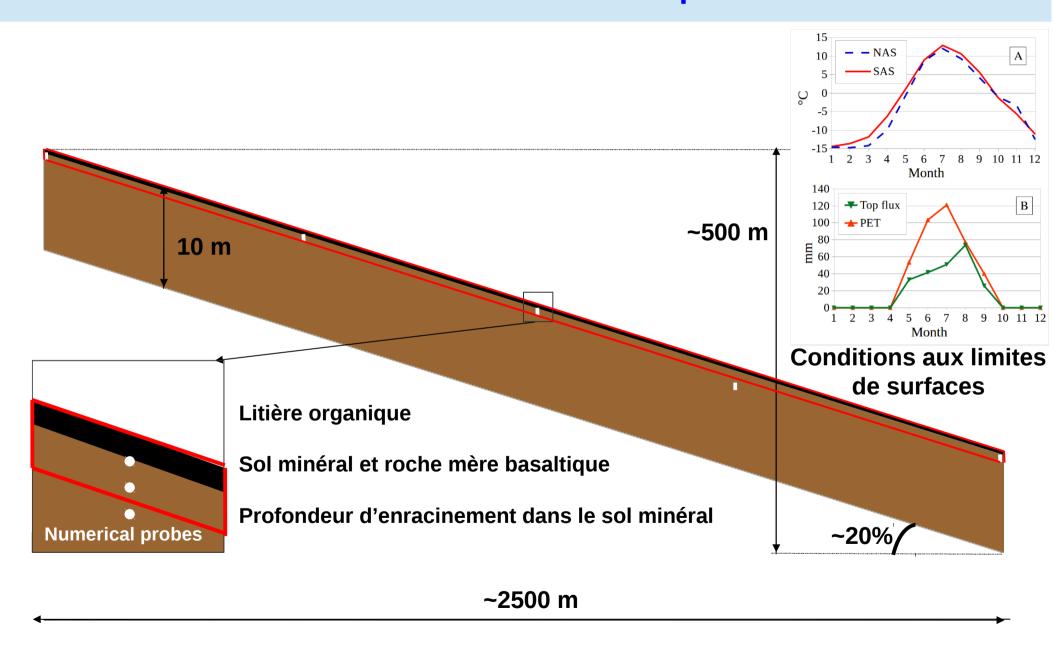
³BIO-GEO-CLIM laboratory, Tomsk State University, Tomsk, Russia

⁴Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement, Université Paris-Saclay, IPSL/LSCE, UMR 8212 CNRS-CEA-UVSQ, Ome des Merisiers, Gif-sur-Yvette Cedex, France

⁵ Université de Toulouse, INPT, UPS, IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse), Toulouse, France

⁶CNRS, IMFT, Toulouse, France

Application 2D : comparaison entre résultats numériques et observations dans un bassin versant expérimental sibérien



Maillages: 2.5 millions de cellules, épaisseurs : 5.10⁻³m (haut) - 0.2m (bas), largeur : 0.2m

Application 2D : comparaison entre résultats numériques et observations dans un bassin versant expérimental sibérien

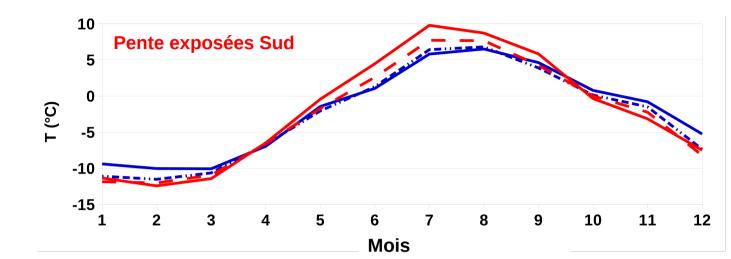
Accord raisonnable entre observations et modélisations

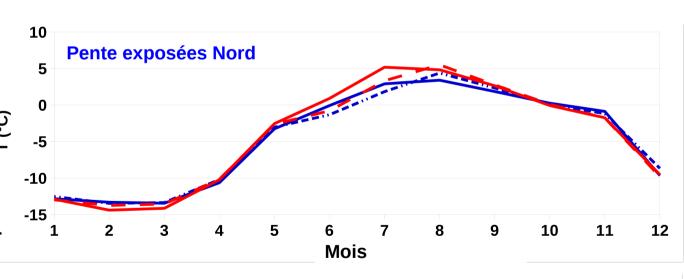
Ecart types entre mesures et résultats numériques

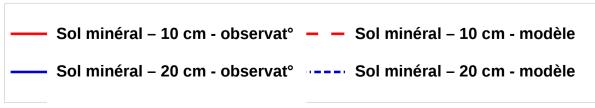
Pentes exposées Sud : 1.07 °C Pentes exposées Nord : 0.74 °C

Elements computationnels:

- Maillage: ~ 2 400 000 de cellules ତ୍ର
- Pas de temps max : 5s à 1h
- Ressources computationelles :
 Requêtes de 20 coeurs à 500
 coeurs (processeurs: Intel(r)
 IVYBRIDGE 2,8 Ghz 10-cores) sur
 le supercalculateur EOS de
 CALMIP (www.calmip.univtoulouse.fr)







Le Système de Calcul OLYMPE

(méso-centre CALMIP - tier 2)

- Cluster de calcul SEQUANA (ATOS-BULL) 1,365 Pflop/s
- 374 nœuds de calcul (36 cœurs/nœud) soit un total de 13 464 cœurs + 48 cartes GPU nvidia
- Processeurs Intel® Skylake 6140 à 2.3 Ghz 18-cores
- Cartes GPU Nvidia V100 « Volta » 7.8 TF DP
- RAM: 192, 384 et 1536 Go/nœud soit un total de 76 To de RAM
- Réseau d'interconnexion rapide (Infiniband EDR 100 Gb/s)
- Espace de stockage permanent de 60 To (NFS)
- Espace de stockage temporaire de **1 500 To** (Lustre) 40 Go/s

OCCIGEN: Bullx DLC - 3.5 Pflops

OpenFOAM CONFERENCE in Germany | OCT 15-17, 2019

3366 x B720 no des

- 50544 cores: Intel Haswell E5-2690 v3 @ 2.6 GHz
- 35 28 0 cores: Intel Broadwell E5-2690 v4 @ 2.6 GHz
- 75% of compute nodes with 2,6 GB/core, 25% with 5,3 GB/core
- Infiniband FDR
- -/scratch: Lustre, 5,2 PB @ 100 GB/s
- /home: Panasas, 400 TB @ 5 GB/s

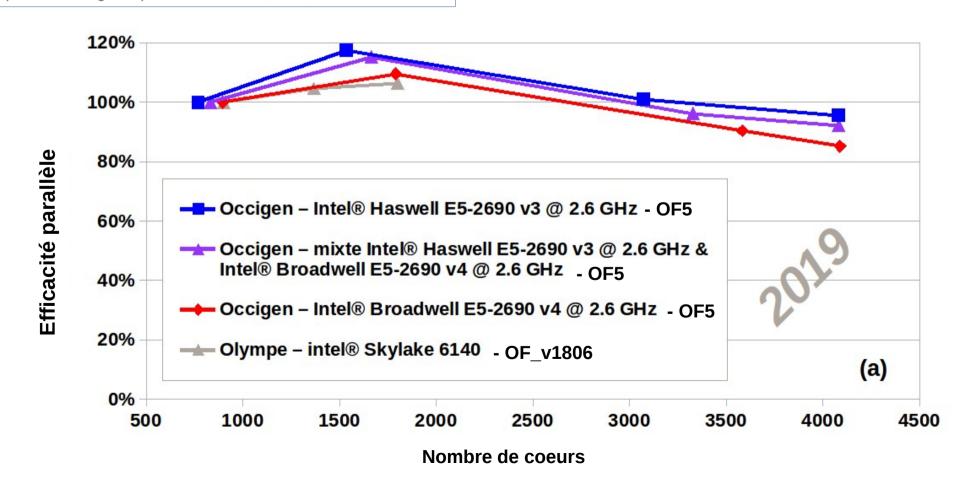
(CINES - tier 1)

Pré-Post & Visualisation

- Nœud large « Mesca »: 8 processeurs Skylake 8176 / 3 TB mémoire / 2 GPU P100
- 4 nœuds de visualisation distante :

2 Broadwell E5-2690 v4 @ 2,6 GHz

1 carte NVIDIA P100



Représentation simplifiée 3D: blockMesh, raffinement graduel

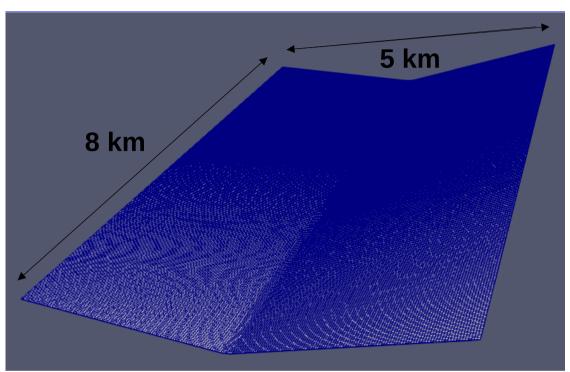
Taille du maillage: 260 millions de cellules, 50 GB

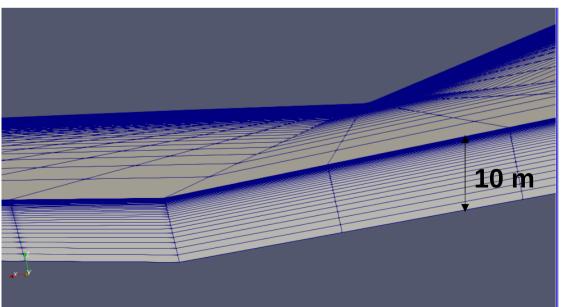
La décomposition avec decomposePar est longue! (> 24 heures pour + de 1800 coeurs sur Occigen)

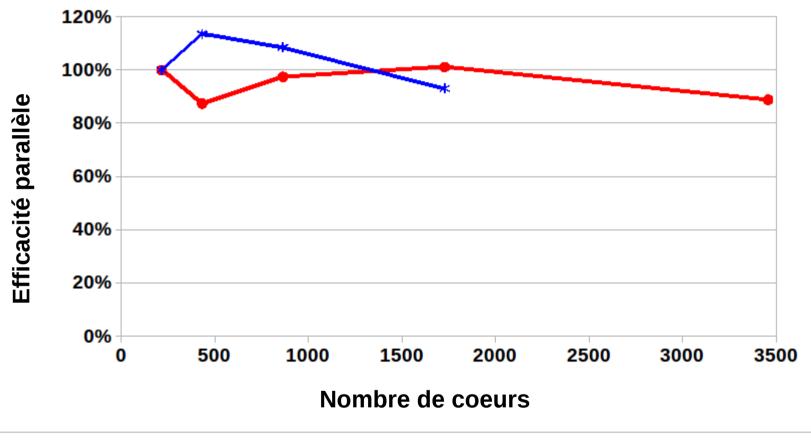
→ snappyHexMesh pour raffiner le maillage après la décomposition ?

Grand nombre de fichiers associés au calculs massivement parallèle!

→ utilisation du mode collated ?

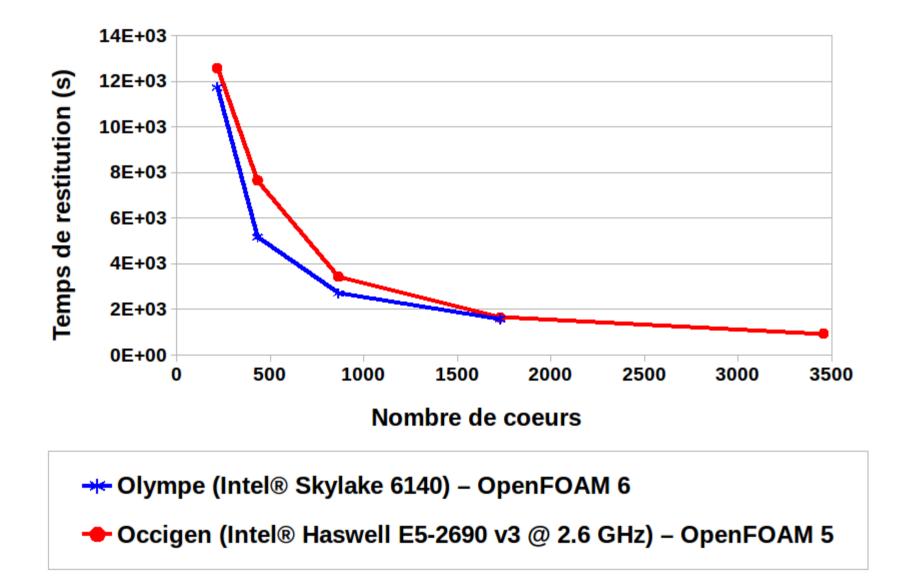




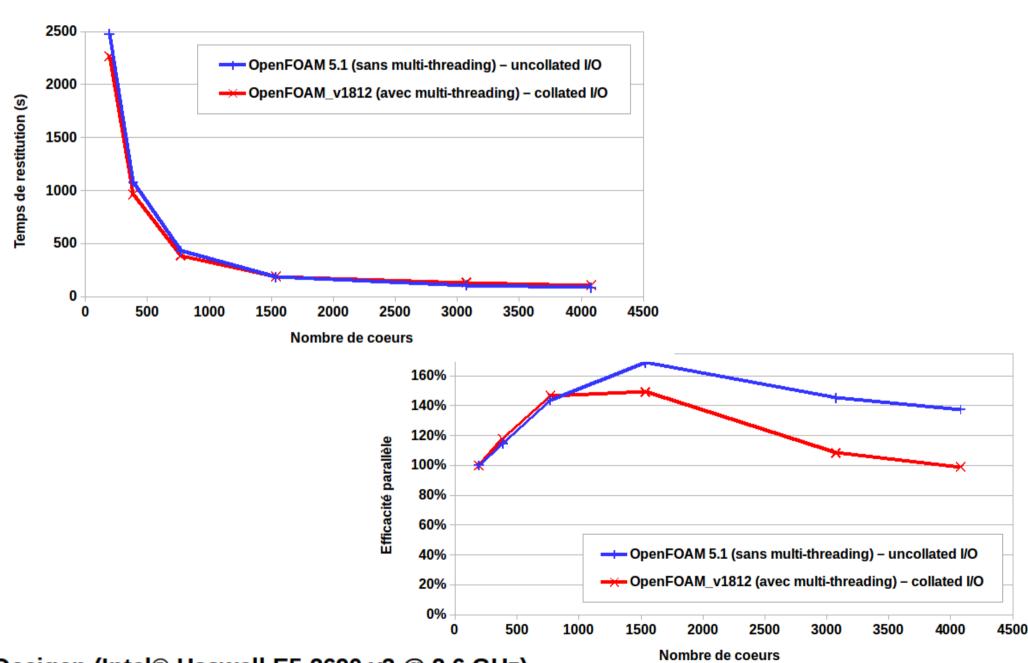


Olympe (Intel® Skylake 6140) – OpenFOAM 6
Occigen (Intel® Haswell E5-2690 v3 @ 2.6 GHz) – OpenFOAM 5

Tests préliminaires sur Olympe et Occigen



Tests préliminaires sur Olympe et Occigen



Occigen (Intel® Haswell E5-2690 v3 @ 2.6 GHz)

Projet ANR HIPERBOREA: High Performance computing for quantifying climate change impacts on Boreal Areas

Coordinateur scientifique: Orgogozo L., Geosciences Environment Toulouse

4 laboratoires partenaires : 3 à Toulouse, 1 à Paris (+ part. Internationaux de Russie et Suède):

- Geosciences Environment Toulouse (Pokrovsky O., Shirokova L., Audry S., Auda Y., Gondet E.)
- Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (Marcoux M, Quintard M., Davit Y.)
- Laboratoire des Sciences du Climat et de l'Environnement (Grenier C., Mouche M., Mügler C.)
- Centre d'Etude Spatiale de la Biosphère (Gascoin S.)

Objectif : utiliser OpenFOAM® pour permettre des simulations de la dynamique des milieux froids sans précédents en terme d'échelles et de résolutions

Budget attribué: 630 kEuros (1 post-doc, 1 PhD, students - budget consolidé de 1,7 mEuros)

Durée: 4 ans, 2020 - 2023









Objectifs techniques du projet HiPerBorea

Modéliser des évolutions centennales de bassins versants expérimentaux de quelques dizaines de km² sous changements climatiques :

- Utiliser des maillages de plusieurs dizaines de milliards de mailles
- Utiliser des dizaines de milliers de coeurs simultanément
- Faire des simulations de plusieurs centaines de milliers d'heures à plusieurs millions d'heures CPU
- Ressources computationelles: Tier-2 (CALMIP), Tier-1 (CINES), Tier-0 (PRACE)





Cones
Composition
Control
Cont

Du mercredi 9 au vendredi 11 octobre 2019 Maison de la Recherche et de la Valorisation Campus de Ranqueil - Toulouse

Merci pour votre attention.

Contact: laurent.orgogozo@get.omp.eu







