

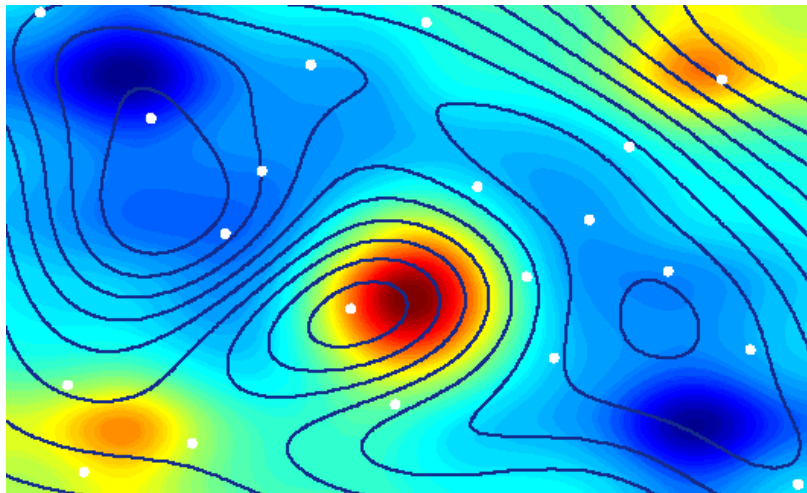


8^{ème} École Thématique de Simulation Numérique

**« Validation de la simulation numérique
et qualité des codes de calcul »**

23 – 27 avril 2018

Institut d'Études Scientifiques de Cargèse



Organisation :

LRC MESO

(CMLA – ENS Paris Saclay et CEA-DAM Ile-de-France)

Objectifs

Organisée par le Laboratoire de Recherche Conventionné de Modélisation Mésoscopique (LRC MESO), l'École Thématique de Simulation Numérique (ETSN) réunit chaque année les participants autour des sujets suivants :

- modélisation ;
- analyse numérique ;
- vérification et validation ;
- calcul haute performance.

Le but de cette école est de permettre à des ingénieurs physiciens, numériciens et informaticiens de partager leur expérience sur des thèmes d'intérêt commun, et de développer leur expertise en simulation numérique en confrontant leurs points de vue à ceux de partenaires du monde académique.

Le format retenu – cours, tables rondes, travaux dirigés et groupes de travail – est destiné à permettre d'aborder de nombreux aspects de la simulation numérique appliquée aux écoulements complexes et à favoriser les échanges.

La huitième édition de l'ETSN se déroulera du 23 au 27 avril 2018 dans le cadre de l'Institut d'Études Scientifiques de Cargèse, et le thème en est : « Validation de la simulation numérique et qualité des codes de calcul ».

Elle bénéficie du soutien de laboratoires universitaires de premier plan, et concrétise le partenariat entre Recherche et Industrie.

Conférenciers

J.B. Blanchard (CEA, DEN)

D. Bouche (CEA, DAM)

Y. Chatelain (Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines)

F. Févotte (EDF R&D)

G. Perrin (CEA, DAM)

E. Petit (Intel Corp.)

P. Sagaut (Aix-Marseille Université)



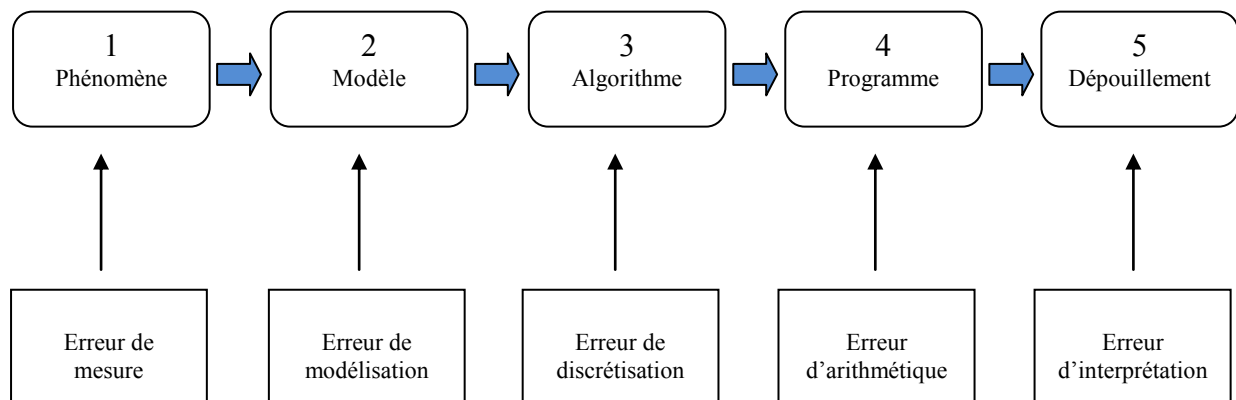
Présentation

La simulation numérique consiste en la recherche d'une solution approchée à un problème physique donné.

On peut la décomposer en cinq étapes principales :

1. Mesure du phénomène physique à simuler.
2. Modélisation de ce phénomène au moyen d'équations mathématiques.
3. Discrétisation de ces équations mathématiques.
4. Résolution sur ordinateur de ce modèle discret.
5. Comparaison des résultats avec les mesures.

A chacune de ces étapes sont attachées des erreurs d'approximation, qui traduisent le caractère approché de la simulation numérique :



Pour accréditer les résultats d'une simulation, ces erreurs d'approximation doivent être identifiées, quantifiées et minimisées dans le cadre d'un processus de Vérification et de Validation (V&V).

C'est à la gestion de ces différents types d'erreur que cette école s'intéressera, avec pour objectif de permettre aux participants d'acquérir des notions pour mieux maîtriser le processus de validation de leurs simulations numériques et accroître la qualité de leurs codes de calcul.

Programme

	23/04/2018	24/04/2018	25/04/2018	26/04/2018	27/04/2018
09h00 – 10h30	Les approches V&V pour la garantie de systèmes complexes par la simulation (1) G. PERRIN	Les approches V&V pour la garantie de systèmes complexes par la simulation (2) G. PERRIN	La plate-forme URANIE (1) J.B. BLANCHARD	Artefacts numériques et convergence (1) D. BOUCHE	Validation, vérification, quantification des erreurs et des incertitudes (1) P. SAGAUT
	Pause	Pause	Pause	Pause	Pause
11h00 – 12h30	Vérification de la qualité numérique des codes de simulation (1) E. PETIT	Vérification de la qualité numérique des codes de simulation (2) F. FEVOTTE	La plate-forme URANIE (2) J.B. BLANCHARD	Artefacts numériques et convergence (2) D. BOUCHE	Validation, vérification, quantification des erreurs et des incertitudes (2) P. SAGAUT
12h30 – 14h00	Déjeuner	Déjeuner	Déjeuner	Déjeuner	Déjeuner
14h00 – 16h30					
16h30 – 18h30	TD VERIFICARLO E. PETIT F. FEVOTTE Y. CHATELAIN	TD VERROU E. PETIT F. FEVOTTE Y. CHATELAIN		TD VERROU E. PETIT F. FEVOTTE Y. CHATELAIN	

Les approches vérification/validation pour la garantie de systèmes complexes par la simulation – 23 et 24/04

Guillaume Perrin, CEA, DAM, DIF

Profitant de l'essor considérable des puissances de calcul disponibles et de progrès importants en modélisation des phénomènes physiques, la simulation numérique s'impose actuellement comme un outil majeur pour la conception, l'optimisation et la garantie de systèmes physiques de plus en plus complexes. Le rôle de la simulation n'est ainsi plus seulement descriptif, mais prédictif. Pour remplir cette fonction, il est primordial que la simulation soit capable d'intégrer l'ensemble des sources d'incertitudes la caractérisant, qu'elles soient associées aux modèles physiques implémentés, aux schémas et à la précision numériques utilisés pour les résoudre, ou au calage imparfait des paramètres les caractérisant.

Ainsi, cette présentation introduira les approches vérification/validation comme des outils efficaces permettant d'associer une confiance aux résultats de simulation. Ces approches proposent en effet des méthodes permettant d'intégrer aux mieux les informations disponibles (avis d'expert, mesures expérimentales...) pour la caractérisation des incertitudes, puis de propager ces incertitudes au sein des modèles sur lesquels se base la simulation.

La seconde partie de cet exposé se concentrera sur la garantie de systèmes complexes à partir d'un modèle prédictif vérifié et validé. Dans un premier temps, on montrera les différences fondamentales entre la garantie dite déterministe, qui refuse le risque malgré la présence d'incertitudes, et la garantie dite probabiliste, qui cherche à contrôler le risque en raison de la présence d'incertitudes. En particulier, on verra que cette garantie probabiliste demande l'estimation d'une double probabilité. Dans un second temps, plusieurs méthodes d'échantillonnage seront présentées pour l'estimation de cette probabilité, en insistant sur leurs atouts et leurs faiblesses.

Vérification de la qualité numérique des codes de simulation – 23, 24 et 26/04

Eric Petit, Intel Corp., DCG

François Févotte, EDF R&D, PERICLES

Yohan Chatelain, UVSQ, ECR Lab.

L'évolution récente des systèmes HPC - parallélisme massif, cœurs tirant parti de la vectorisation, hiérarchies mémoire - et l'accroissement des capacités de calcul permettent la simulation à plus haute résolution de temps physiques plus longs. Ces avancées posent toutefois un certain nombre de défis au-delà de l'aspect programmation parallèle. L'un de ces enjeux est la validation de la qualité numérique des simulations.

Le résultat d'une simulation numérique subit plusieurs approximations effectuées lors de la modélisation mathématique depuis le problème physique jusqu'à la résolution numérique réalisée en arithmétique flottante. Les processus de Vérification et Validation (V&V) évaluent communément des erreurs liées à la modélisation, ainsi que celles provenant de la résolution approchée des modèles mathématiques.

Cependant, les instabilités et pertes de qualité provoquées par l'utilisation de l'arithmétique flottante, et en particulier la propagation des erreurs d'arrondi, sont plus rarement étudiées. Pourtant, l'accroissement de la taille des calculs réalisés et la complexité des systèmes supportant l'exécution, amplifient de manière critique les effets de l'arithmétique sur la précision, la reproductibilité, et la stabilité des résultats des simulations numériques.

Après un cours introduisant les éléments essentiels pour comprendre la problématique de l'utilisation de l'arithmétique flottante, nous présenterons dans cette formation les outils Verificarlo et Verrou, qui visent à faciliter le diagnostic et la correction des erreurs de calcul dans les codes de simulation industriels.

Nous verrons comment utiliser ces outils, basés sur des techniques d'arithmétique stochastique, afin de détecter et quantifier les erreurs dues à l'arithmétique flottante.

Dans un second temps, nous présenterons les fonctionnalités d'analyse plus avancées qui permettent de localiser dans le code source l'origine des erreurs.

Nous étudierons enfin quelques techniques permettant de corriger les problèmes détectés et d'améliorer la qualité numérique des codes étudiés.

La plate-forme Uranie – 25/04

Jean-Baptiste Blanchard, CEA, DEN

Uranie est une plate-forme open-source dédiée au traitement des incertitudes, aux analyses de sensibilité, à la génération et à la calibration de modèles ou de méta-modèles (surrogate-model), aux optimisations. Cette plate-forme est écrite en C++ et est basée sur le framework ROOT, développé au CERN depuis la fin des années 90. Uranie enrichit la plate-forme ROOT en la dotant de classes permettant:

- la génération de plans d'expériences ;
- le lancement de codes de calcul avec récupération automatique des résultats ;
- l'apprentissage et la génération de méta-modèles ;
- l'analyse de sensibilités ;
- des visualisations spécifiques aux incertitudes ;
- des études d'optimisation paramétriques (mono et multicritères, avec et sans contraintes).

Il existe différents types d'analyses possibles en utilisant Uranie, schématiquement ces dernières peuvent être regroupées ainsi :

- Propagation des incertitudes : les incertitudes sur les entrées sont propagées aux quantités d'intérêt, ce qui peut être fait, par exemple, par une approche statistique de type Monte-Carlo, *via* des plans d'expériences ;
- Quantification inverse des sources d'incertitudes : à partir d'un jeu de données fourni, il est possible sous certaines hypothèses de calibrer des modèles physiques et de représenter par des variables aléatoires leurs incertitudes épistémiques ;
- Analyse de sensibilité : ce type d'analyse permet de hiérarchiser les variables d'entrée quant à leur impact sur l'incertitude d'une quantité d'intérêt (fournissant une hiérarchie ou une estimation quantitative de cet impact).

Le but de cette présentation est d'introduire les concepts de base nécessaires à la prise en main de la plateforme Uranie, aussi bien d'un point de vue technique, que méthodologique. Pour cela, une description de l'organisation de la plateforme sera faite, enrichie d'exemples pratiques (pour la plupart disponibles dans les sources de la plateforme) illustrant l'usage des différents niveaux de documentation comme référence. Un cas physique jouet sera décrit et servira de support, montrant l'utilisation possible des méthodes proposées, au fur et à mesure de leur introduction.

Artefacts numériques et convergence – 26/04

Daniel Bouche, CEA, DAM, DIF

Les théorèmes de convergence d'une solution numérique vers la solution exacte d'une équation aux dérivées partielles hyperbolique, comme le théorème de Lax, garantissent que l'erreur d'un schéma consistant et d'ordre p est d'ordre h^p , c'est-à-dire qu'elle est majorée par $C h^p$, où h est la taille de maille. Mais ces théorèmes ne s'appliquent que pour des solutions suffisamment régulières. Or, nous avons souvent à traiter de solutions discontinues, donc hors du champ d'application de ces théorèmes.

Nous verrons comment les schémas peuvent, dans le cas de solutions discontinues, introduire des artefacts numériques qui dégradent l'ordre de convergence nominal du schéma.

Nous présenterons quelques-uns de ces artefacts : diffusion numérique, oscillations parasites, perte de symétrie de rotation :

- la diffusion numérique étale les fronts, particulièrement pour les équations linéaires, où la largeur du front croît avec le temps ;
- les oscillations parasites générées par la dispersion peuvent générer des valeurs négatives de quantités positives, comme la densité ;
- la perte de symétrie de rotation peut être amplifiée par des instabilités. Il faut donc autant que possible réduire ces artefacts.

Nous étudierons les artefacts numériques en fonction de l'ordre et des propriétés dispersives et dissipatives des schémas.

Nous montrerons comment ces artefacts affectent la convergence, et passerons en revue quelques-uns des moyens proposés pour les réduire.

Simulation numérique : validation, vérification, quantification des erreurs et des incertitudes – 27/04

Pierre Sagaut, Université Aix-Marseille

La simulation numérique des écoulements est devenue un outil indispensable pour la recherche fondamentale et l'ingénierie. Son emploi est aujourd'hui massivement répandu, ce qui entraîne une hausse de l'exigence en termes de fiabilité des résultats obtenus.

Le cours portera sur les différentes sources d'erreur et d'incertitude rencontrées en mécanique des fluides numérique. L'accent sera mis sur les méthodologies et les outils récents disponibles pour l'estimation et la réduction de celles-ci, avec une attention particulière pour les écoulements turbulents dont le caractère chaotique renforce ces problématiques.

Plus précisément, on abordera :

- les erreurs associées aux méthodes numériques. On mettra ici en avant les résultats récents portant sur l'intérêt des schémas qui préservent des propriétés des équations (symétries/invariants physiques) ;
- les erreurs liées aux modèles de turbulence et aux conditions aux limites. Ici, outre l'analyse par des méthodes classiques, on abordera la propagation des incertitudes induites par les sous-modèles physiques (modèles de turbulence, conditions aux limites, modèles de combustion simplifié ...) et les outils modernes seront introduits ;
- le couplage implicite entre les erreurs numériques et les modèles, avec des conséquences contre-intuitives, comme la dégradation des résultats lors de l'augmentation de l'ordre de précision des schémas numériques dans certains cas.

Les méthodologies de validation des modèles et de vérification des simulations seront discutées, ainsi que les difficultés rencontrées lors de la comparaison de données expérimentales et de résultats de simulation.