



Equilibrage de charge et distribution de données pour des simulations parallèles irrégulières couplées : application à la propagation multi-échelle de fissures dans les matériaux.

Maîtres de stage :  
Olivier COULAUD  
Jean ROMAN

Encadrant pédagogique :  
François PELLEGRINI



# Table des matières

<b>Table des figures</b>	<b>iv</b>
<b>Chapitre 1 Présentation de l'entreprise</b>	<b>1</b>
1.1 L'INRIA en bref . . . . .	1
1.2 Quelques chiffres . . . . .	2
<b>Chapitre 2 Prsentation du projet</b>	<b>3</b>
2.1 Contexte de la recherche . . . . .	3
<b>Chapitre 3 Description du projet</b>	<b>4</b>
3.1 État de l'art . . . . .	4
3.1.1 Modélisation des matériaux . . . . .	4
3.1.2 Méthode de couplage utilisée : <i>approche de couplage par recouvrement</i> . . . . .	5
3.2 Description de l'existant . . . . .	6
3.3 Parallélisation . . . . .	7
<b>Chapitre 4 Prestations attendues</b>	<b>9</b>
<b>Glossaire</b>	<b>11</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>12</b>

# Table des figures

3.1	Description lagrangienne du mouvement d'un milieu continu. . . . .	5
3.2	Présentation d'une zone de recouvrement du domaine continu avec le domaine atomique. . .	6
3.3	Diagramme en tâches du déroulement d'une simulation couplant deux modèles. . . . .	7
3.4	Décomposition par macro-boite du domaine utilisé par la plupart des codes de dynamique moléculaire . . . . .	8
3.5	Décomposition de domaine obtenue par bipartitionnement récursif d'un maillage non structuré	8
4.1	Un cas de propagation de fissure . . . . .	9



# Présentation de l'entreprise

## 1.1 L'INRIA en bref

Créé en 1967 à Rocquencourt près de Paris, l'*INRIA* (Institut national de recherche en informatique et en automatique) est un établissement public à caractère scientifique et technologique (EPST) placé sous la double tutelle du ministère de la recherche et du ministère de l'économie, des finances et de l'industrie.

Les principales missions de l'*INRIA* sont décrites par le décret du 2 août 1985 portant sur l'organisation et le fonctionnement de l'institut.

L'*INRIA* a l'ambition d'être au plan mondial, un institut de recherche au coeur de la société de l'information.

L'*INRIA*, institut national de recherche en informatique et en automatique, placé sous la double tutelle des ministères de la recherche et de l'industrie, a pour vocation d'entreprendre des recherches fondamentales et appliquées dans les domaines des sciences et technologies de l'information et de la communication (STIC). L'institut assure également un fort transfert de technologie en accordant une grande attention à la formation par la recherche, à la diffusion de l'information scientifique et technique, au développement, à l'expertise et à la participation à des programmes internationaux.

Jouant un rôle fédérateur au sein de la communauté scientifique de son domaine et au contact des acteurs industriels, l'*INRIA* est un acteur majeur dans le développement des STIC en France. L'*INRIA* accueille 3 800 personnes réparties dans ses 8 centres de recherche situés à Rocquencourt, Rennes, Sophia Antipolis, Grenoble, Nancy, Bordeaux, Lille et Saclay. 2 800 d'entre elles sont des scientifiques de l'*INRIA* et d'organismes partenaires (CNRS, universités, grandes écoles) qui travaillent dans plus de 150 équipes-projets de recherche communes. Un grand nombre de chercheurs de l'*INRIA* sont également enseignants, et leurs étudiants (environ 1 000) préparent leur thèse dans le cadre des équipes-projets de recherche de l'*INRIA*.

L'*INRIA* développe de nombreux partenariats avec le monde industriel et favorise le transfert technologique et la création d'entreprises dans le domaine des STIC. Plus de 90 entreprises ont été créées grâce au soutien de sa filiale *INRIA-Transfert*, spécialisée dans l'accompagnement, l'évaluation, la qualification et le financement des jeunes entreprises innovantes de haute technologie informatique. L'*INRIA* est actif au sein d'instances de normalisation comme l'*IETF*, l'*ISO* ou le *W3C* dont il a été le pilote européen de 1995 à 2002.

Enfin, l'institut entretient d'importantes relations internationales : en Europe, l'*INRIA* est membre du consortium *ERCIM*, qui regroupe des instituts de recherche de 19 pays européens. L'*INRIA* participe à environ 120 actions dans le cadre du 6<sup>e</sup> *PCRD* et 40 actions dans le cadre du 7<sup>e</sup> *PCRD*, essentiellement dans le domaine des *STIC*. à l'international, l'institut collabore avec de nombreuses institutions scientifiques et universitaires (laboratoires de recherche conjoints tels que *LIAMA*, équipes de recherche associées, programmes de formation et de stages, etc.).

Le budget de l'*INRIA* s'élève à 186 millions d'euros, dont 20 % proviennent de ses propres contrats de recherche et produits de valorisation.

La stratégie de l'institut repose sur la combinaison étroite de l'excellence scientifique et du transfert tech-

nologique. L'objectif essentiel de l'*INRIA* pour les années 2008-2012 est de réaliser des percées scientifiques et technologiques dans sept domaines prioritaires :

- Modélisation, simulation et optimisation de systèmes dynamiques complexes,
- Programmation : sécurité et fiabilité des systèmes informatiques,
- Communication, information et calcul ubiquitaires,
- Interaction avec des mondes réels ou virtuels,
- Ingénierie numérique,
- Sciences numériques,
- Médecine numérique.

## **1.2** Quelques chiffres

- Ressources budgétaires (janvier 2008),
  - budget total : 186 M Euros HT,
  - ressources propres : 1/5.
  
- Ressources humaines (janvier 2008),
  - 3 800 personnes, dont 2 100 rémunérées par l'*INRIA*,
  - 2 800 scientifiques, dont 1 300 chercheurs et enseignants-chercheurs, 1 000 doctorants, et 500 post doctorants et contractuels.
  
- Activités scientifiques (janvier 2008),
  - 150 équipes-projets de recherche,
  - 4 000 publications scientifiques,
  - 24 conférences internationales organisées ou co-organisées par l'*INRIA* ayant mobilisé 2 500 participants dont 1 700 étrangers,
  - 14 300 heures d'enseignement.
  
- Relations industrielles (janvier 2008).
  - 790 contrats de recherche actifs,
  - 230 brevets actifs,
  - 80 logiciels déposés à l'Agence pour la Protection des Programmes,
  - 89 sociétés de technologie issues de l'*INRIA*, depuis Ilog, aujourd'hui cotée au Nasdaq, jusqu'aux 9 dernières créées en 2007.

# 2

## Présentation du projet

### 2.1 Contexte de la recherche

La simulation du comportement physico-chimique des matériaux, comme le suivi de la propagation de fissures ou encore l'étude de propriétés macroscopiques de matériaux hybrides, nécessite de modéliser les phénomènes à des échelles d'espace et de temps très différentes. Dans ces simulations, on couple une échelle macroscopique à une échelle microscopique, celle-ci pouvant être une échelle atomique voire électronique dans certains couplages. Ce couplage " **micro-macro** " est indispensable pour obtenir une bonne description de la matière, la modélisation par une échelle plus grossière (plus macroscopique) permettant de modéliser essentiellement des échantillons de tailles plus importantes. Ces nouvelles simulations numériques sont développées en couplant différents codes parallèles représentant chacun différents modèles physiques.

Si l'on considère la propagation de fissures par exemple (cas des lentilles de focalisation du Laser Méga-Joule), la méthode multi-échelle qui a été développée suppose que deux modèles soient couplés finement : un modèle atomique (*en dynamique moléculaire*) et un modèle continu (*approximation par éléments finis*). La transmission de l'information entre ces deux modèles se fait par une zone de recouvrement où les deux modèles vont cohabiter.

Dans le cadre d'un couplage en parallèle, un découpage des données est réalisé afin de les distribuer sur les processeurs disponibles et ce découpage a une très grande influence sur la performance du coupleur. Les découpages des données de chacun des codes considérés séparément sont réalisés pour obtenir un meilleur équilibrage de charge respectif, mais une fois couplées, ces décompositions de domaines induisent couramment un mauvais équilibrage global et cela notamment pour les processeurs ayant en charge la zone du couplage. En effet, il faut en fait maximiser le nombre de processeurs en charge du couplage pour diminuer le temps de calcul de celui-ci, tout en minimisant le nombre de domaines connectés entre les modèles pour diminuer les communications entre les codes parallèles sous-jacents.

Un enjeu important dans ces simulations multi-physiques mais aussi dans toute simulation impliquant un couplage de codes complexes (météorologie, climatologie, ...) est de conserver le caractère " **scalable** " de l'exécution parallèle globale des codes couplés.

# 3

## Description du projet

On veut simuler certains phénomènes dans les matériaux. Souvent il y a une zone dans le matériau qu'on veut étudier en détails et avec plus de précision. Par exemple l'étude de propagation des fissures, les variations évoluent fortement dans la zone de fissure et très faiblement hors de la zone de fissure. On veut donc conserver une description fine aux alentours de la zone concernée par le phénomène étudié et une description plus grossière ailleurs. Donc on va suivre à la loupe le comportement d'une zone particulière donc avec un coût de calcul élevé alors que le reste sera étudié avec moins de détails pour que le coût global de la simulation ne soit pas énorme.

### 3.1 État de l'art

#### 3.1.1 Modélisation des matériaux

La modélisation des matériaux est utile à différents niveaux. On peut représenter un matériau de différentes manières, avec différents modèles. Selon la propriété que l'on désire observer et le degré de précision voulu, il faudra choisir parmi les deux grands types de représentation des matériaux. La distinction porte naturellement sur l'échelle à laquelle on modélise le matériau sachant que chacune des représentations possède des défauts et des avantages.

L'*échelle macroscopique*, qui est l'échelle de l'observable, possède une description continue de la matière. En effet, les propriétés de la matière convergent vers une telle description pour des phénomènes macroscopiques. On utilise couramment cette vision dans l'industrie. Dans ce domaine, on utilise un modèle continu d'*élasticité*<sup>1</sup> que l'on discrétise par la *méthode des éléments finis*<sup>2</sup>.

À une échelle plus fine, comme l'*échelle microscopique*, on décrit la matière de manière discrète pour obtenir une meilleure précision indispensable si on veut capturer les phénomènes de déformations tels les fissures ou les dislocations. Dès lors, les simulateurs gèrent chaque atome et les déplacent à l'aide d'un champ de force tiré de la physique. La précision apportée par la dynamique moléculaire se révèle incontournable malgré le temps de calcul prohibitif causé des échantillons utilisés en industrie. Par exemple, l'étude des fissures, des nano structures, ou encore des problèmes de frictions ne peuvent trouver actuellement une précision adéquate que dans la définition atomique.

A cause des coûts de calcul important on se dirige naturellement vers des solutions couplant ces deux échelles. On voudrait utiliser les bénéfices des deux : **la précision de la dynamique moléculaire et le traitement d'échantillons de taille réelle pour la mécanique des milieux continus.**

---

<sup>1</sup>cf. Glossaire

<sup>2</sup>cf. Glossaire



### La dynamique moléculaire

La [dynamique moléculaire](#)<sup>3</sup> consiste à étudier la trajectoire d'une molécule en appliquant les lois de la mécanique classique, et a pour but de simuler le mouvement des atomes au cours du temps, à partir de l'énergie potentielle calculée par la mécanique moléculaire.

Dans le cadre de la dynamique moléculaire on simule, sous un champ de force, l'évolution d'un système de particules au cours du temps.

### La mécanique des milieux continus

Dans le cadre de la [mécanique des milieux continus](#)<sup>4</sup> On souhaite modéliser un solide **S** dont on se donne le contour  $\Gamma$ . Le solide est alors défini par la matière contenue dans l'espace délimité par ce contour. La matière est supposée avoir des propriétés continues dans cet espace. Chaque volume infinitésimal du solide est déplacé dans le temps par les contraintes propres au matériau étudié. On définit donc naturellement la fonction d'évolution du solide par  $\phi_t$  qui varie en fonction de temps  $t$  (c.f. figure 3.1) :

$$\begin{aligned} \phi_t &: \Omega_0 \longrightarrow \Omega_t \\ X &\longrightarrow \phi_t(X) = x_t = X + u(t) \end{aligned}$$

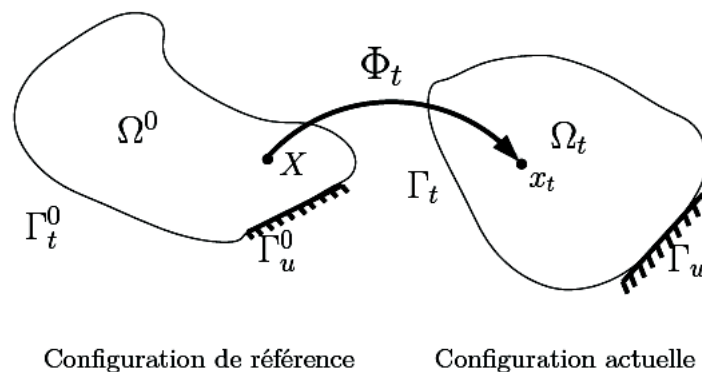


Fig. 3.1 – Description lagrangienne du mouvement d'un milieu continu.

La principale difficulté de ce type de méthode provient de la gestion des discontinuités. Ces deux approches permettent de décrire les discontinuités, mais pas de décrire la progression ou la création de telles discontinuités.

la mécanique des milieux continus permet de traiter des problèmes de fissuration de taille inabordable par la dynamique moléculaire.

#### 3.1.2 Méthode de couplage utilisée : approche de couplage par recouvrement

Les méthodes basées sur un recouvrement utilisent la séparation des échelles pour définir une projection plus ou moins complexe qui puisse éliminer des [DDL](#)<sup>5</sup> dans une zone de l'espace, et non plus brutalement comme le font les méthodes sans couture.

La méthode utilisée est **BM - Bridging Method**, elle considère que les deux modèles sont "mélangés". Ils possèdent une zone de recouvrement où un couplage adapté va pouvoir transférer convenablement les propriétés du matériau d'un modèle à l'autre en retirant l'information non représentable de l'échelle fine.

<sup>3</sup>cf. Glossaire

<sup>4</sup>cf. Glossaire

<sup>5</sup>cf. Glossaire

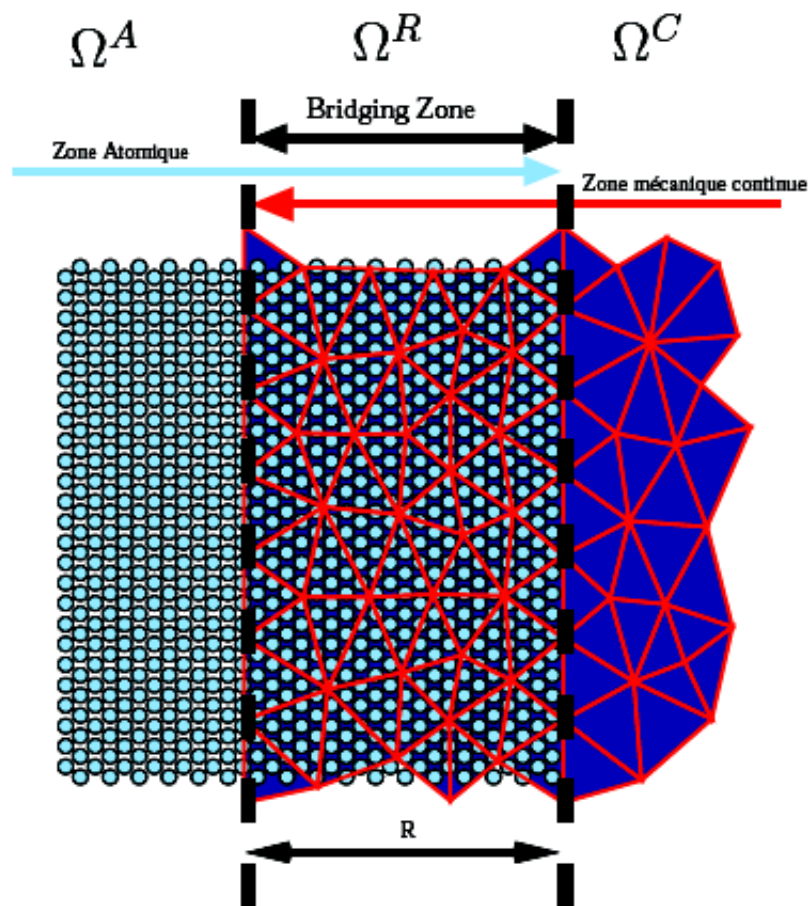


Fig. 3.2 – Présentation d'une zone de recouvrement du domaine continu avec le domaine atomique.

## 3.2 Description de l'existant

Le diagramme des tâches de la figure 3.3 décrit le déroulement de la résolution des équations du système couplé. Tout d'abord, chaque modèle a besoin d'une phase d'initialisation spécifique pour construire les structures informatiques des modèles numériques. Pour les modèles utilisés<sup>6</sup>, un maillage et un ensemble d'atomes sont construits<sup>6</sup>.

<sup>6</sup>les techniques de génération de maillages utilisées qui constituent déjà un point commun à un bon nombre d'études [3], [6], [8], [9], [4]

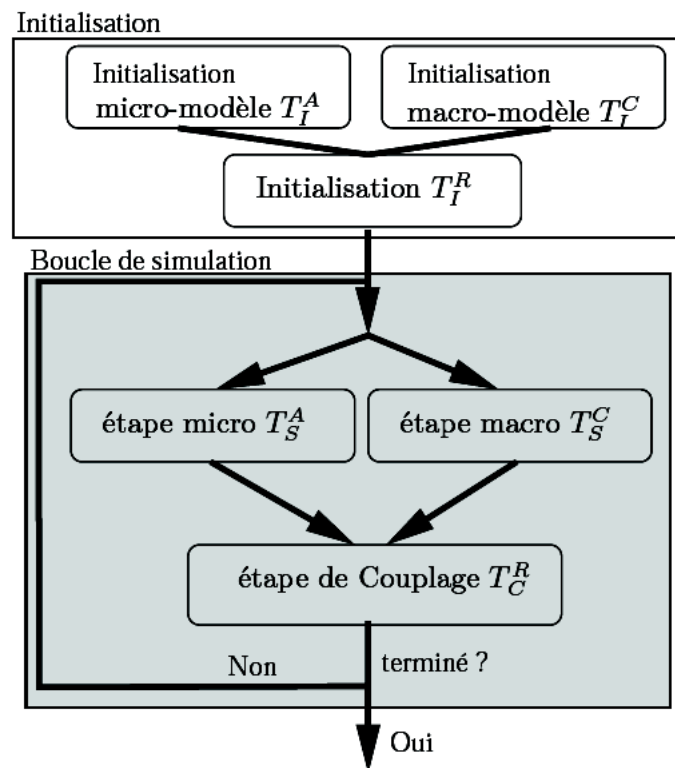


Fig. 3.3 – Diagramme en tâches du déroulement d'une simulation couplant deux modèles.

### 3.3 Parallélisation

#### Décomposition de domaine pour des modèles de dynamique moléculaire

Les codes de dynamique moléculaire et d'élasticité sont couramment utilisés pour des applications de grande taille (en nombre d'inconnues), et elles ont été naturellement parallélisées. Une approche par décomposition de domaine est utilisée. C'est l'espace de simulation qui est divisé en boîtes. On note que les atomes ne sont pas affectés à des boîtes mais ils peuvent migrer d'une boîte à l'autre.

Cette décomposition est avant tout régulière. Le cas présenté est celui d'une initiation de fissure

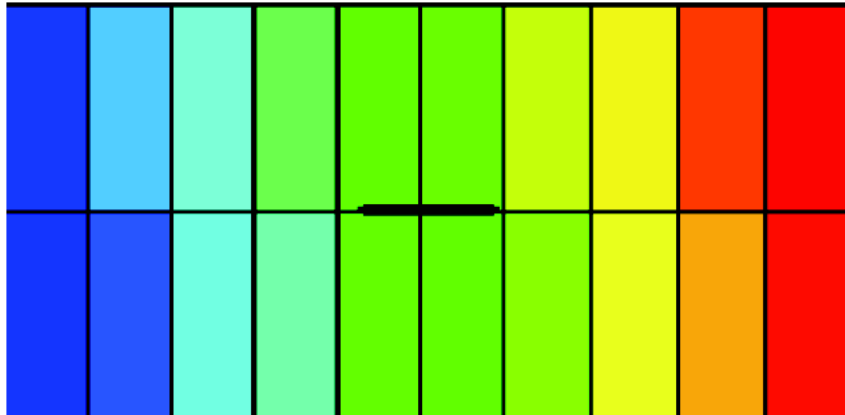


Fig. 3.4 – Décomposition par macro-boîte du domaine utilisé par la plupart des codes de dynamique moléculaire

### Décomposition de domaine des modèles de mécanique des milieux continus utilisant les éléments finis

Le domaine est entièrement discrétisé par un maillage. De manière classique en éléments finis on utilise une méthode de décomposition du domaine pour le parallélisme. Pour une bonne *scalabilité* les domaines doivent être de taille homogène et avec des bords réguliers.

Une technique de partitionnement couramment utilisée est celle basée sur un bipartitionnement récursif de l'espace.

La figure 3.5 présente le découpage d'un domaine rectangulaire discrétisé par un maillage non structuré et produit par METIS [1].

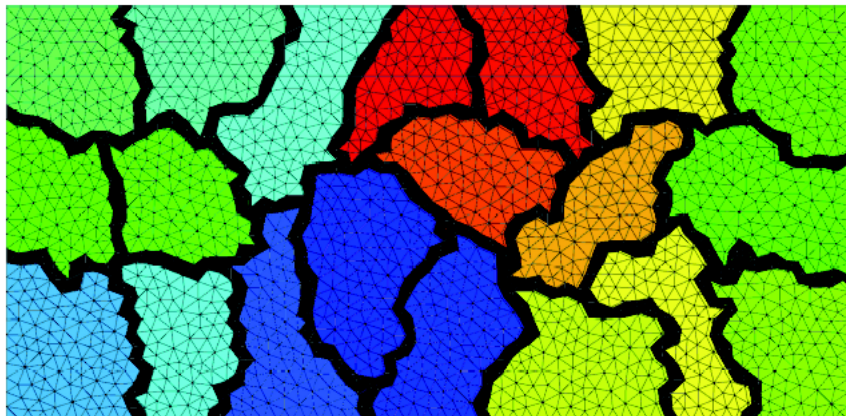


Fig. 3.5 – Décomposition de domaine obtenue par bipartitionnement récursif d'un maillage non structuré

# 4

## Prestations attendues

L'objectif de ce projet est de proposer des solutions génériques basées sur des modélisations du problème à base de graphes et d'étudier d'autre part si le modèle d'[hypergraphes](#)<sup>1</sup> ne permettrait pas de mieux décrire le couplage. Dans le cadre de la propagation de fissures et à l'aide de la bibliothèque [Libmultiscale](#) [2], il s'agit d'étudier différentes stratégies d'équilibrage de charge pour améliorer les performances du coupleur.

Dans le couplage *milieu atomique - milieu continu*, la décomposition algorithmique en boîtes de l'espace de simulation de la dynamique moléculaire ne peut être remise en cause ; on ne peut donc essentiellement jouer que sur la nature des partitionnements du maillage d'éléments finis du modèle continu. Les stratégies envisagées consistent, d'une part à pondérer les éléments et les noeuds en fonction des tâches de calcul et d'autre part, de contraindre le partitionnement du maillage par un découpage de la frontière.

D'un point de vue logiciel, nous utiliserons le logiciel de partitionnement de graphes [SCOTCH](#) [5] ou d'[hypergraphes ZOLTAN](#) [7] pour analyser, implémenter et tester les différentes stratégies.

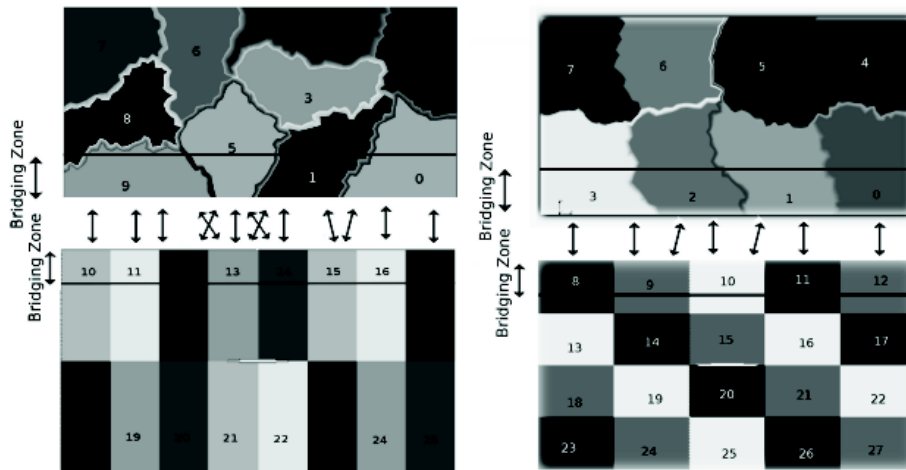


Fig. 4.1 – Un cas de propagation de fissure

On constate un comportement anormal concernant les coûts des corrections des DDLs. Ceci peut s'expliquer par l'analyse des partitions comme nous pouvons le voir sur la figure 4.1. En effet dans le cas présenté sur la figure 4.1, les nombres de de DDLs couplés attribués aux processeurs 9 et 0 sont trop grands, attribuant trop d'inconnus (atomes) au système de contraintes. Dès lors la distribution de la charge n'est pas complètement équilibrée sur les processeurs dédiés aux éléments finis.

- Les points qui seront abordés dans ce projet sont :
- État de l'art du partitionnement et du couplage,
  - Analyse algorithmique et évaluation des coûts,

<sup>1</sup>cf. Glossaire

- Modélisation du couplage sous forme de graphe ou d'hypergraphe.
- Amélioration du parallélisme,
- Validation du modèle.

## DDL

Degré De Liberté : ce sont les inconnus du problème

## élasticité

C'est la qualité à un objet à être déformable tout en reprenant sa forme d'origine lorsque la contrainte qu'on lui applique disparaît.

## dynamique moléculaire

Elle consiste à étudier la trajectoire d'une molécule en appliquant les lois de la mécanique classique, et a pour but de simuler le mouvement des atomes au cours du temps, à partir de l'énergie potentielle calculée par la mécanique moléculaire.

## hypergraphes

Les hypergraphes sont des objets mathématiques généralisant la notion de graphes

## mécanique des milieux continus

C'est le domaine de la mécanique qui s'intéresse à la déformation des solides et à l'écoulement des fluides, nous nous intéresserons ici essentiellement à la déformation des solides.

## méthode des éléments finis

Elle est utilisée en analyse numérique pour résoudre des équations aux dérivées partielles. Celles-ci peuvent représenter le comportement dynamique de certains phénomènes physiques

# Bibliographie

- [1] Metis - serial graph partitioning. Technical report. .
- [2] Guillaume ANXIAUX. Libmultiscale, 2007. .
- [3] A. Athanasiadis. Three-dimensional hybrid grid generation and application to Navier-Stokes computations. PhD thesis, Université Libre de Bruxelles, 2004. PhD thesis.
- [4] H. Jin and R.I. Tanner. Generation of unstructured tetrahedral meshes by advancing front technique. International Journal for Numerical Methods in Engineering. pages 1805-1823.
- [5] François PELLEGRINI. Scotch, 2008.
- [6] Parikh Rainald, Lohner and Paresh. Generation if three-dimensional unstructured grid by the advancing-front method. International Journal for Numerical Methods in Fluids. pages 1135-1149.
- [7] SANDIA. Zoltan. .
- [8] N.P Weatherill. Delaunay triangulation in computational fluid dynamics. Computational Mathematics and Applications. pages 129-150.
- [9] N.P. Weatherill and O. Hassan. Efficient three-dimensional delaunay triangulation with automatic point creation and imposed boundary constraints. International Journal for Numerical Methods in Engineering. pages 2005-2039.