



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

| | |
|--|-----------|
| Table des figures | iv |
| Chapitre 1 Présentation de l'entreprise | 1 |
| 1.1 L'INRIA en bref | 1 |
| 1.2 Quelques chiffres | 2 |
| Chapitre 2 Présentation du projet et motivations | 3 |
| 2.1 Contexte de la recherche | 3 |
| 2.2 Objectifs | 3 |
| Chapitre 3 Description de l'existant | 5 |
| 3.1 La dynamique moléculaire | 5 |
| 3.1.1 Formulation du problème | 5 |
| 3.1.2 Intégration en temps | 5 |
| 3.2 La mécanique des milieux continus | 7 |
| 3.3 Le couplage | 8 |
| 3.3.1 Système d'équation couplées | 8 |
| 3.3.2 Description algorithmique du coupleur | 8 |
| 3.4 Parallélisme | 9 |
| 3.4.1 Problématique du couplage parallèle | 9 |
| 3.4.2 Décomposition de domaine | 9 |
| 3.5 Résultats actuels : exemple dans le cas de propagation d'une fissure (Cas du cristal d'argon en dimension 2) | 10 |
| Chapitre 4 Rappel sur la théorie des graphes et des hypergraphes | 12 |
| 4.1 Les graphes | 12 |
| 4.2 Les Hypergraphes | 12 |
| Glossaire | 14 |
| Bibliographie | 15 |

Table des figures

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Un cas de propagation de fissure | 4 |
| 3.1 | Tâches d'intégration du modèle de dynamique moléculaire | 6 |
| 3.2 | Graphe de tâches d'un pas de temps avec les complexités associées. | 8 |
| 3.3 | Décomposition par macro-boîte du domaine utilisé par la plupart des codes de dynamique moléculaire | 10 |
| 3.4 | Décomposition de domaine obtenue par bipartitionnement récursif d'un maillage non structuré | 10 |
| 3.5 | Un cas de propagation de fissure | 11 |
| 4.1 | Exemple d'hypergraphe | 13 |



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^e *PCRD* et 40 actions dans le cadre du 7^e *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 et motivations

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.

2.2 Objectifs

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**¹ ne permettrait pas de mieux décrire le couplage. Dans le cadre de la propagation de fissures et à l'aide de la bibliothèque **Libmultiscale** [3], 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

¹cf. Glossaire

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** [6] ou d'hypergraphes **ZOLTAN** [8] pour analyser, implémenter et tester les différentes stratégies.

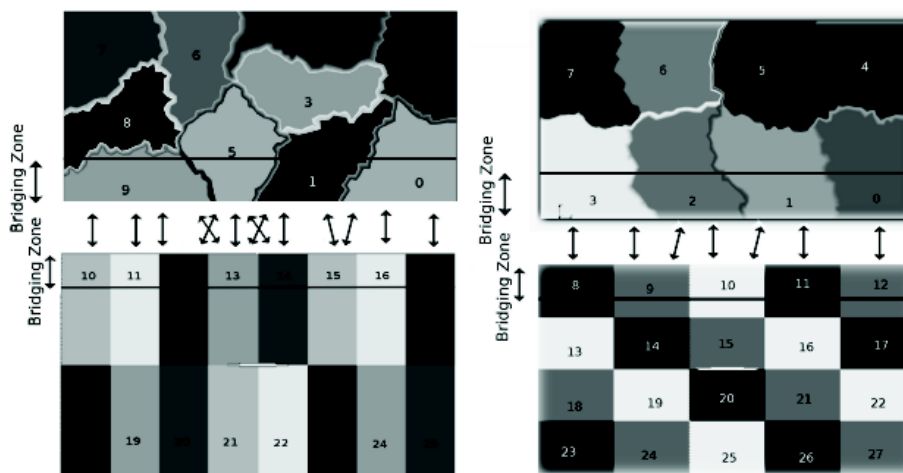


Fig. 2.1 – Un cas de propagation de fissure

On constate un comportement anormal concernant les coûts des corrections des DDL^2 s. Ceci peut s'expliquer par l'analyse des partitions³ comme nous pouvons le voir sur la figure 2.1. En effet dans le cas présenté sur la figure 2.1, les nombres de DDLs couplés attribué 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,
- Modélisation du couplage sous forme de graphe ou d'hypergraphe.
- Amélioration du parallélisme,
- Validation du modèle.

²cf. Glossaire

³se référer au 3.4.2 pour plus de détails sur la décomposition des domaines

3

Description de l'existant

3.1 La dynamique moléculaire

La **dynamique moléculaire**¹ 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.

3.1.1 Formulation du problème

Pour un système de m atomes on écrit l'équation de Newton classique :

$$\dot{P} = M\ddot{d} = -f^{int} + f^{ext} \quad (3.1)$$

$$\text{avec } f_i^{int} = \frac{\partial W}{\partial d_i} = -(\nabla_d W)_i \quad (3.2)$$

L'équation sur chaque atome est donc :

$$m_i \ddot{d}_i = -f_i^{int} + f_i^{ext} \quad (3.3)$$

On utilise ici une description Lagrangienne peu commune qui définit d à l'instant t tel que $x_t = X + dt$ où X est le vecteur des positions atomiques initiales, et dt est donc le vecteur des déplacements atomiques.

L'énergie potentielle interne $W(x)$ a une expression tirée d'une description de la nature des interactions entre les atomes, et la densité électronique.

On force le système à suivre une contrainte désirée. Soit le système de contraintes défini par :

$$\forall i \in [1, C] \quad g_i(x) = 0 \quad (3.4)$$

Les équations de mouvement contraint qui en découlent sont :

$$m_i \ddot{d} = -f_i^{int} + f_i^{ext} - \sum_j \frac{\partial g_j}{\partial d_i} \quad (3.5)$$

3.1.2 Intégration en temps

Schéma d'intégration

Le schéma d'intégration en temps généralement utilisé en dynamique moléculaire est le schéma appelé *Velocity Verlet* [2]. Il permet de calculer l'évolution du système de particules dans l'espace des phases. Le

¹cf. Glossaire

schéma d'intégration couramment utilisé pour les dynamiques sous contraintes est l'algorithme de *SHAKE* [2]. Ce schéma est découpé en quatre étapes :

$$\left\{ \begin{array}{l} p^{n+\frac{1}{2}} = p^n + \frac{\Delta t}{2} F^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial g_j}{\partial d}(d^n) \lambda_{(n)}^r \\ \text{avec } \lambda_{(n)}^r \text{ sont choisis afin que } g(d^{n+1}) = 0 \\ x^{n+1} = x^n + \Delta t M^{-1} p^{n+\frac{1}{2}} \\ \text{évaluation de } F^{n+1} = -\nabla W(x^{n+1}) + f^{ext} \\ p^{n+1} = p^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} F^{n+1} - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial g_j}{\partial d}(d^{n+1}) \lambda_{(n)}^r \end{array} \right.$$

Ici on va utiliser plutôt le schéma *Velocity Verlet* (voir fig 3.1) et faire des corrections sur les déplacements et les vitesses pendant de la phase de couplage

$$\boxed{\begin{array}{l} \dot{d}_i^{n+\frac{1}{2}} = \dot{d}_i^n + \frac{\Delta t}{2m_i} f_i^n \\ d_i^{n+1} = d_i^n + \Delta t \dot{d}_i^{n+\frac{1}{2}} \\ \text{calcul de } f_i^{n+1} \\ \dot{d}_i^{n+1} = \dot{d}_i^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2m_i} f_i^{n+1} \end{array}}$$

Fig. 3.1 – Tâches d'intégration du modèle de dynamique moléculaire

évaluation de la force f_i

Le calcul de la force fait intervenir en général² plusieurs potentiels qui sont dûs aux interaction intermoléculaires et intramoléculaires :

- **Interaction intramoléculaire,**
 - Potentiel de *liaison* $V_l(l_i) = \frac{1}{2} K_l^l (l_i - l_i^0)^2$,
 - Potentiel *angulaire* $V_a(\theta_i) = \frac{1}{2} K_i^\theta (\theta_i - \theta_i^0)^2$,
 - Potentiel de *torsion* $V_t(\phi_i) = \frac{1}{2} K_i^\phi (\phi_i - \phi_i^0)^2$.
- **Interaction intermoléculaire.**

²ici pour l'évaluation de la force, on va se limiter au potentiel *Lennard-Jones*

- Potentiel electrostatique $V_{elec}(r) = \frac{q_i \cdot q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}$,
- Potentiel de *répulsion-dispersion* :
 - Potentiel de *Lennard Jones* $V_{ij}(r) = 4\epsilon[(\frac{\sigma}{r})^{12} - (\frac{\sigma}{r})^6]$,
 - Potentiel *Buckingham* $V_B(r) = A \cdot e^{-\frac{r}{\rho}} - \frac{C}{r^6}$.

3.2 La mécanique des milieux continus

La [mécanique des milieux continus](#)³ 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.

On se donne les équations de la conservation

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \text{div} \sigma = f \quad \text{dans } \Omega \\ \sigma \cdot n = t \quad \text{sur } \Gamma_1 \\ u = 0 \quad \text{sur } \Gamma_2 \end{array} \right.$$

- Γ_1 Partie du contour de Ω sur lequel s'exerce les efforts
- Γ_2 Partie du contour fixe de Ω
- u Champ de déplacement lagrangien
- ρ Masse volumique
- f Densité volumique des efforts externes
- t Densité surfacique des efforts externes

On définit les notions suivantes :

$Z_k = \{K; K \in \Omega\}$: triangulation du domaine Ω avec la [méthode des éléments finis](#)⁴ (espace discret)

$V_h = \{w \in C^1(\Omega) / w|_K \in P_1\}$

$h = \max_{K \in Z_k} (\text{taille de } K)$ $\{\varphi_i\}$: base de l'espace des fonctions continues, φ_i est un polynome de degré 1.

$\Rightarrow \forall w \in V_h \exists (w_k)_k / W(X) = \sum_{k=1}^N w_k \varphi_k(X)$

$$\text{avec } \left\{ \begin{array}{l} N = \dim(V_h) = \text{nombre de noeuds du mayage} \\ w_k = w(x_k) \\ \varphi_k(x_k) = \delta_{kl} \end{array} \right.$$

On multipli l'équation de conservation par une fonction test et on integre sur tout le domaine :

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \cdot w d\Omega - \int_{\Omega} \text{div} \sigma \cdot w d\Omega = \int_{\Omega} f \cdot w d\Omega \quad (3.6)$$

en utilisant le théoreme de Stocks :

$$\int_{\Omega} \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \cdot w d\Omega - \int_{\Omega} \sigma \nabla w d\Omega - \int_{\Gamma} \sigma \cdot n \cdot w ds = \int_{\Omega} f \cdot w d\Omega \quad (3.7)$$

Discretisation

$u \in V_h = \{V; V|_K \in P_1 \text{ et } V = 0 \text{ sur } \Gamma_2\}$ ($\dim(V_h) = N$)

u décomposée sur la base $\varphi_i \Rightarrow$ *représente les lments* $\rightarrow u(x, t) = \sum_{k=1}^N u_k(t) \cdot \varphi_k(x)$

³cf. Glossaire

⁴cf. Glossaire

3.3 Le couplage

3.3.1 Système d'équation couplées

Les contraintes appliquées servent à recoller ensemble les deux modèles. Les équations de mouvement sont donc modifiées par des multiplicateurs de Lagrange. Le système d'équations final décrit dans [9] est :

$$\bar{M}_I \ddot{u}_I = -f_I^R + \sum_k \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial u_I} \quad (3.8)$$

$$\bar{m}_i \ddot{d}_i = f_i^R + \sum_k \lambda_k \frac{\partial g_k}{\partial d_i} \quad (3.9)$$

avec :

- $\bar{M}_I = \alpha(X_I)M_I$,
- $\bar{m}_i = (1 - \alpha(X_i))m_i$,
- M_I est la masse condensée sur le noeud I ,
- m_i la masse de l'atome i .

3.3.2 Description algorithmique du coupleur

On ne s'intéresse qu'aux tâches de la boucle principale d'intégration et aux tâches effectuées lors d'un pas de temps de simulation. Sur ce diagramme, on peut observer un détail que nous n'avons pas évoqué jusqu'à présent et qui est la synchronisation des codes à chaque pas de temps. En effet, les deux codes doivent se trouver dans une situation équivalente pour pouvoir être couplés.

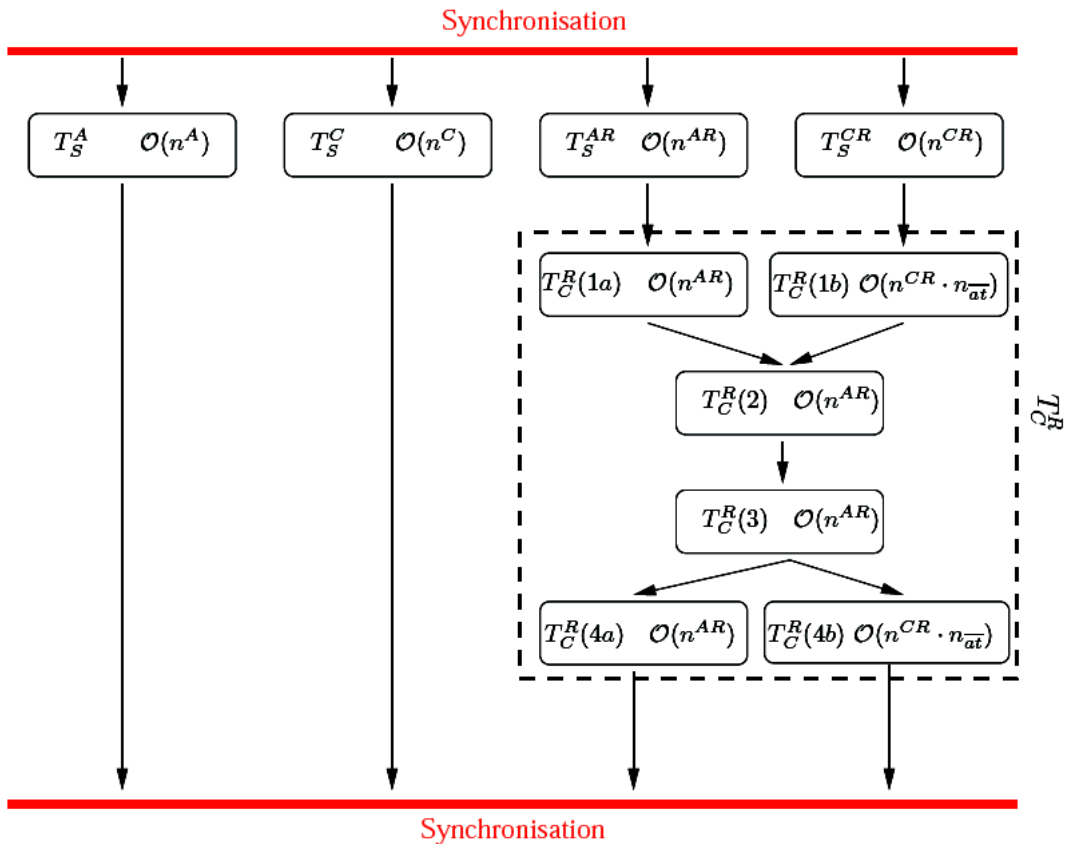


Fig. 3.2 – Graphe de tâches d'un pas de temps avec les complexités associées.

- n^A atomes non présents dans la zone de couplage,
- n^{AR} atomes qui sont contenus dans la zone de recouvrement,
- n^C noeuds non présents dans le recouvrement,
- n^{CR} noeuds présents dans le recouvrement,
- On a apporté alors la distinctions entre T_S^A , T_S^C et TAR_S , TCR_S où les tâches assignées d'un R supplémentaire désigne l'intégration par le schéma de Verlet des inconnues contenues dans la zone de recouvrement.

3.4 Parallélisme

3.4.1 Problématique du couplage parallèle

Soit $(P_i)_{i=1..N}$ un ensemble de N processeurs à notre disposition. Nous désirons distribuer les domaines de calcul des deux codes couplés sur l'ensemble des processeurs pour minimiser le temps total de la simulation.

Considérons dans un premier temps le cas non couplé de ce problème. Dans ce cas de figure, on suppose que l'on connaît une solution optimale du problème de partition pour chacun des modèles. On nomme S_C^n (resp. S_A^n) la solution du problème de partitionnement (décomposition de domaine) du modèle continu (resp. atomique) sur n processeurs. On note $T(S)$ le temps de calcul et de communication total pour la décomposition de domaine S .

Pour simplifier notre problème, on considère les deux stratégies suivantes.

- Soit on donne à chaque processeur des calculs distribués pour les deux modèles,
- soit on découpe l'ensemble des processeurs en deux parties non nécessairement égales et chacune prend la charge d'un seul modèle.

Dans le premier cas, le temps de calcul est $T(S_C^N) + T(S_A^N)$, et dans le deuxième cas on souhaite trouver n_1 et n_2 t.q. $N = n_1 + n_2$ et t.q. $T(S_C^{n_1}) = T(S_A^{n_2})$.

Pour choisir entre les deux stratégies, il faut connaître la scalabilité des codes et le volume de calcul de chaque modèle.

Si on ajoute le surcoût de calcul dû au couplage, on introduit un déséquilibre inévitable du fait de la localisation des calculs liés au couplage.

On comprend donc que l'enjeu majeur réside dans l'équilibrage des charges des deux codes. On verra dans la partie résultat que le coût de calcul du couplage est loin d'être insignifiant et qu'il doit être pris en compte dès le début dans le partitionnement.

Il existe une autre option pour le placement des domaines sur les processeurs qui sera qualifiée d'hybride. En effet, on pourra placer les modèles sur deux sous ensembles de processeurs qui pourront avoir une intersection : certains processeurs pourraient calculer pour les deux domaines.

3.4.2 Décomposition de domaine

Décomposition de domaine pour des modèles de dynamique moléculaire

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

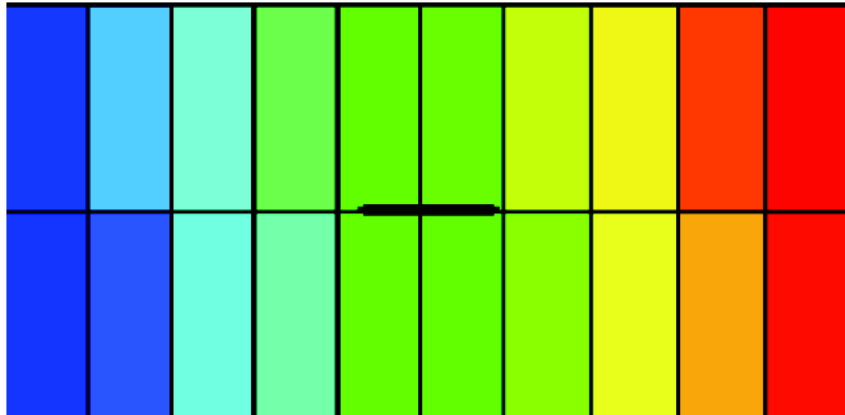


Fig. 3.3 – Décomposition par macro-boîte du domaine utilisé par la plupart des codes de dynamique moléculaire

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

le domaine est entièrement discrétisé par un maillage. Une technique couramment utilisée est celle basée sur un bipartitionnement récursif de l'espace.

La figure 3.4 présente le découpage d'un domaine rectangulaire discrétisé par un maillage non structuré et produit par METIS [1].

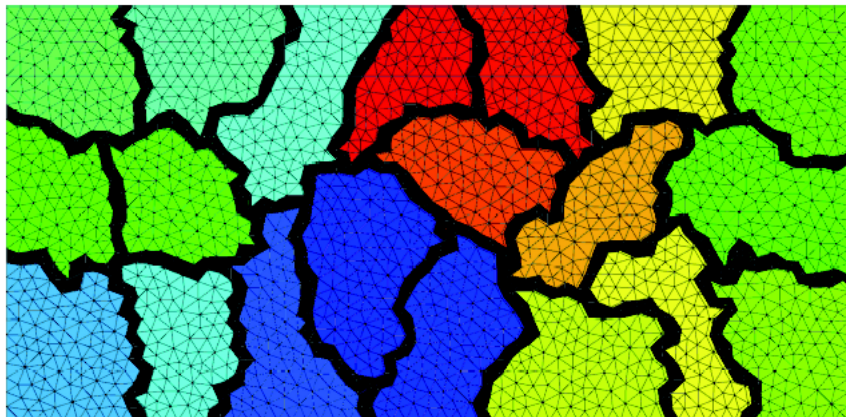


Fig. 3.4 – Décomposition de domaine obtenue par bipartitionnement récursif d'un maillage non structuré

3.5 Résultats actuels : exemple dans le cas de propagation d'une fissure (Cas du cristal d'argon en dimension 2)

Un cas de propagation d'une fissure avec des conditions limites mélangées est présenté sur la figure 3.5. Nous avons une zone atomique rectangulaire de 300×600 constituée de 135 000 atomes d'argon modélisés comme un cristal parfait

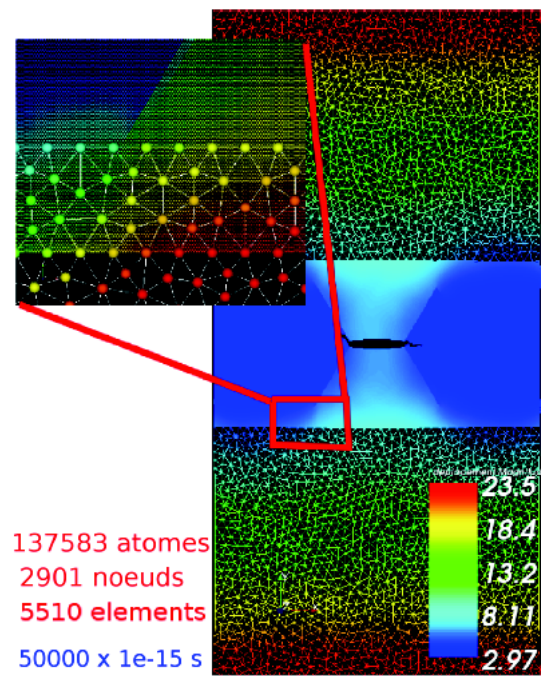


Fig. 3.5 – Un cas de propagation de fissure

4

Rappel sur la théorie des graphes et des hypergraphes

4.1 Les graphes

La théorie des graphes s'est développée dans diverses disciplines telles que la chimie, la biologie, les sciences sociales. Depuis le début du XXe siècle, elle constitue une branche à part entière des mathématiques, grâce aux travaux de *König*, *Menger*, *Cayley* puis de *Berge* et d'*Erdős*.

De manière générale, un graphe permet de représenter la structure, les connexions d'un ensemble complexe en exprimant les relations entre ses éléments : réseau de communication, réseaux routiers, interaction de diverses espèces animales, circuits électriques,...

Pésentation générale

Dans la [Théorie des graphes](#)¹, un graphe est un ensemble de points, dont certaines paires sont directement reliées par un lien. Ces liens peuvent être orientés, c'est-à-dire qu'un lien entre deux points u et v relie soit u vers v , soit v vers u : dans ce cas, le graphe est dit *orienté*. Sinon, les liens sont symétriques, et le graphe est *non-orienté*.

Définition

Un graphe simple G est un couple formé de deux ensembles : un ensemble $X = \{x_1; x_2; \dots; x_n\}$ dont les éléments sont appelés sommets, et un ensemble $A = \{a_1; a_2; \dots; a_m\}$, partie de l'ensemble $\mathcal{P}_2(X)$ des parties à deux éléments de X , dont les éléments sont appelés s arêtes. On notera $G = (X; A)$. Lorsque $a = \{x; y\} \in A$, on dit que a est l'arête de G d'extrémités x et y , ou que a joint x et y , ou que a passe par x et y . Les sommets x et y sont dits adjacents dans G .

4.2 Les Hypergraphes

Pésentation générale

Les hypergraphes généralisent la notion de graphe dans le sens où les arêtes ne relient plus un ou deux sommets, mais un nombre (Un nombre est un concept caractérisant une unité, une collection d'unités ou une fraction d'unité.) quelconque de sommets (compris entre un et le nombre de sommets de l'hypergraphe). De nombreux théorèmes de la théorie (Le mot théorie vient du mot grec *theorein*, qui signifie « contempler, observer, examiner ». Dans le langage...) des graphes se généralisent naturellement aux hypergraphes, par exemple le théorème (Un théorème est une proposition qui peut être mathématiquement démontrée, c'est-à-dire une assertion qui peut être...) de Ramsey.

¹cf. Glossaire

Les hypergraphes ont des applications dans tous les domaines où on utilise la théorie des graphes : résolution de problèmes de satisfaction de contraintes, traitement d'images, optimisation d'architecture (L'architecture, terme issu du latin *architectura*, mot tiré du grec...) réseaux, modélisation, etc.

Définition

Soient $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ un ensemble, $E = \{E_1, E_2, \dots, E_m\}$ une famille de parties de V , avec $(m, n) \in \mathbb{N}_*^2$ deux entiers non nuls.

Un hypergraphe H est un couple (V, E) tel que :

– $\forall i \in ([1, m] \cap \mathbb{N}) \quad E_i \neq \emptyset$

– $\bigcup_{i=1}^m E_i \subseteq V$.

À l'instar des graphes, on dit que :

– Les éléments de V sont les sommets de H ,

– Le nombre de sommets n est l'ordre de l'hypergraphe,

– Les éléments de E sont les arêtes de H .

Les hypergraphes correspondent précisément aux matrices à coefficients 0 ou 1 (dont chaque colonne a au-moins un 1). En effet, tout hypergraphe H correspond de manière univoque à la matrice $\mathcal{A}_{n,m}$, telle que :

$$\forall a_{i,j} \in \mathcal{A}, \quad a_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si } v_i \in E_j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

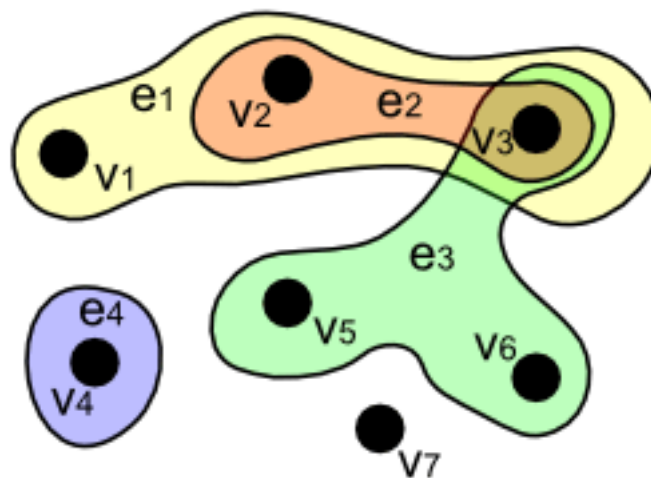


Fig. 4.1 – Exemple d'hypergraphe

Un exemple d'hypergraphe est dans la figure 4.1 où $V = \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6, v_7\}$, $E = \{e_1, e_2, e_3, e_4\} = \{\{v_1, v_2, v_3\}, \{v_2, v_3\}, \{v_3, v_5, v_6\}, \{v_4\}\}$.

DDL

Degré De Liberté : ce sont les inconnus du problème

Théorie des graphes

C'est une branche commune à l'informatique et aux mathématiques étudiant les graphes et les objets qui lui sont propres, comme par exemple les chemins. Le concept de graphe, à ne pas confondre avec le graphe d'une fonction, permet d'étudier les propriétés de certaines structures comme les réseaux (réseau social, réseau informatique, etc.) ou, plus largement, les relations binaires. Les algorithmes de la théorie des graphes ont ainsi de nombreuses applications importantes. Enfin, la nature particulière des relations entre les objets de cette théorie, ou les propriétés structurelles qu'elle révèle, ont influencé considérablement l'optimisation combinatoire.

[http://fr.wikipedia.org/wiki/Graphe_\(théorie_des_graphes\)](http://fr.wikipedia.org/wiki/Graphe_(théorie_des_graphes))

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. (voir 4.1 pour les définitions)

<http://fr.wikipedia.org/wiki/Hypergraphe>

mécanique des milieux continus

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] M.P. Allen and D.J. Tildesley. Computer simulation of liquids. Oxford University Press, 1989.
- [3] Guillaume ANXIAUX. Libmultiscale, 2007. .
- [4] A. Athanasiadis. Three-dimensional hybrid grid generation and application to Navier-Stokes computations. PhD thesis, Université Libre de Bruxelles, 2004. PhD thesis.
- [5] 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.
- [6] François PELLEGRINI. Scotch, 2008.
- [7] Parikh Rainald, Lohner and Paresh. Generation of three-dimensional unstructured grid by the advancing-front method. International Journal for Numerical Methods in Fluids. pages 1135-1149.
- [8] SANDIA. Zoltan. .
- [9] S.P. Xiao T. Belytschko. Coupling methods for continuum model with molecular model. International Journal for Multiscale Computational Engineering, 2003. 1(1) :115-126, 2003.
- [10] N.P Weatherill. Delaunay triangulation in computational fluid dynamics. Computational Mathematics and Applications. pages 129-150.
- [11] 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.