

*PFE-ENSEIRB - Master recherche Bordeaux 1*  
*Compte rendu*



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

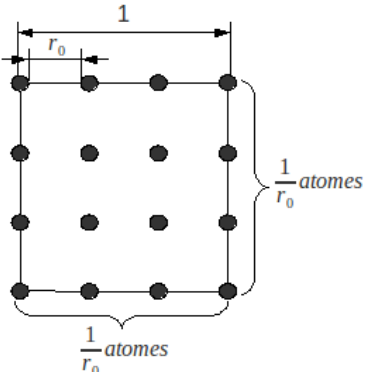
Période de stage :  
du 09 février 2009 au 30 septembre 2009

Mohamed Amine EL AFRIT  
[www.melafrit.com](http://www.melafrit.com)  
postmaster@melafrit.com

## Problématique et modélisation

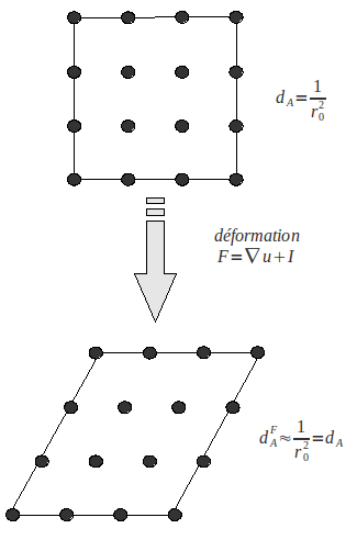
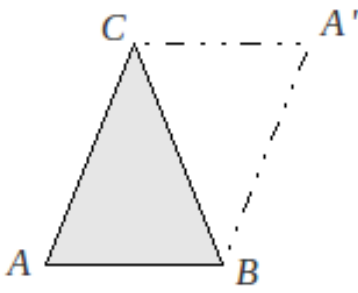
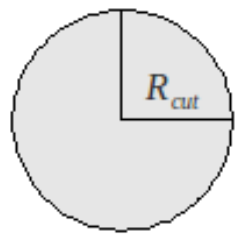
### 1.1 Calcul des coûts

#### 1.1.1 Notations

Notation	Description	Schéma	Formule
$r_0$	Distance inter-atomique pour l'Argon.		$r_0 \simeq 1.22452143392 \cdot 10^{-10} \text{ A}$ (1.1)
$d_A$	Densité atomique (Nombre d'atomes par unité de surface)	 <p>The diagram shows a square lattice of atoms. A square unit cell is outlined with side length 1. The distance between adjacent atoms is labeled <math>r_0</math>. Brackets indicate that the number of atoms per unit length is <math>\frac{1}{r_0}</math>.</p>	$d_A = \frac{1}{r_0^2}$ (1.2)

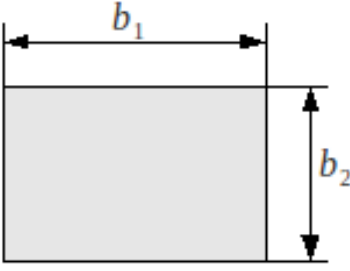
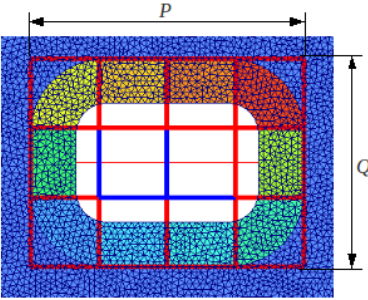
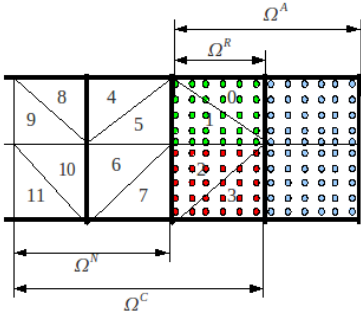
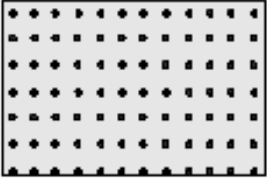
... suite à la page suivante ...

... suite de la page précédente ...

Notation	Description	Schéma	Formule
$d_A^F$	<p>Densité atomique après déformation (Nombre d'atomes par unité de surface déformé dans le cadre de l'approximation de Cauchy-Born).</p> <p>Dans le cas de faibles déformations, <b>On fera l'approximation <math>d_A^F \simeq d_A</math>.</b></p> <p>i.e <math>F = Id + \varepsilon B</math> où <math>B</math> est une perturbation.</p>	 <p>The diagram illustrates the transition from a square lattice to a deformed parallelogram lattice. The initial lattice has a side length <math>r_0</math> and an atomic density <math>d_A = \frac{1}{r_0^2}</math>. A deformation <math>F = \nabla u + I</math> is applied, resulting in a deformed lattice with side length <math>r_0^F</math> and atomic density <math>d_A^F \approx \frac{1}{r_0^F^2} = d_A</math>.</p>	$d_A^F = d_A = \frac{1}{r_0^2} \quad (1.3)$
$C_F$	<p>Coût de calcul de la force <math>F_i</math> appliquée sur les éléments à chaque pas de temps de la simulation</p>		<p>(cf. équation 1.11)</p>
$\mathcal{A}_T$	<p>Air d'un triangle <math>ABC</math> défini par 3 noeuds <math>nd1</math>, <math>nd2</math> et <math>nd3</math> ayant pour coordonnées cartésiennes <math>nd1(x_1, y_1, z_1)</math>, <math>nd2(x_2, y_2, z_2)</math> et <math>nd3(x_3, y_3, z_3)</math>. Pour simplifier on calcule l'air dans un plan (i.e en supposant que les ordonnées selon <math>z</math> sont constantes)</p>	 <p>The diagram shows a triangle with vertices <math>A</math>, <math>B</math>, and <math>C</math>. A dashed line <math>A'B'</math> is drawn parallel to the base <math>AB</math>, representing the projection of the triangle onto a plane.</p>	$\mathcal{A}_T = \frac{1}{2}  x_1 y_2 - x_1 y_3 - x_2 y_1 + x_3 y_1 + x_2 y_3 - x_3 y_2 $ <p>(cf. équation 1.10)</p>
$\mathcal{A}_{D_{Rcut}}$	<p>Air d'un disque de rayon <math>R_{cut}</math>.</p>	 <p>The diagram shows a circle with a radius <math>R_{cut}</math> indicated by a line from the center to the edge.</p>	$\mathcal{A}_{D_{Rcut}} = \pi \cdot R_{cut}^2 \quad (1.4)$

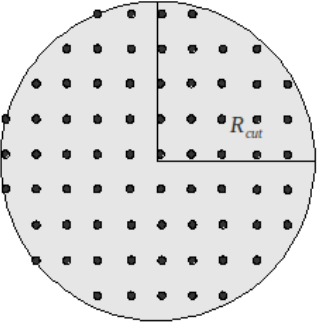
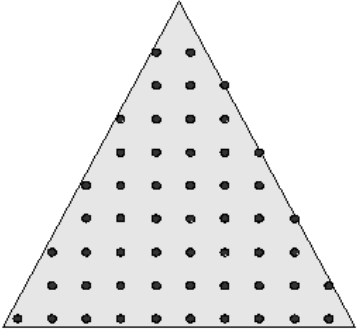
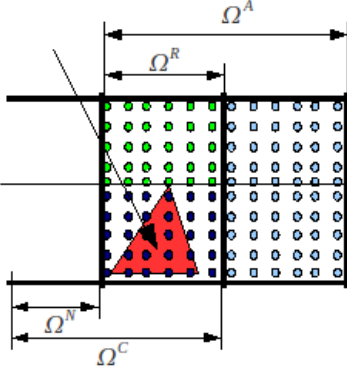
... suite à la page suivante ...

... suite de la page précédente ...

Notation	Description	Schéma	Formule
$\mathcal{A}_{Boite}$	Aire d'une boîte de dimension $b_1$ et $b_2$		$\mathcal{A}_{Boite} = b_1 \cdot b_2 \quad (1.5)$
$P$ et $Q$	Nombre de processeurs affectés à la Dynamique moléculaire respectivement selon $x$ et $y$ dans la zone de recouvrement		
$N_e^{BZ}$	Nombre d'éléments dans la zone de recouvrement avec $\mathcal{A}_{BZ}$ est la surface de la zone de recouvrement (Bridging Zone)		$N_e^{BZ} = \frac{\mathcal{A}_{BZ}}{\mathcal{A}_T} \quad (1.6)$
$N_{Boites}^A$	Nombre d'atomes dans une boîte de dimension $b_1$ et $b_2$		$N_{Boites}^A = \mathcal{A}_{Boite} \cdot d_A = \frac{b_1 \cdot b_2}{r_0^2} \quad (1.7)$

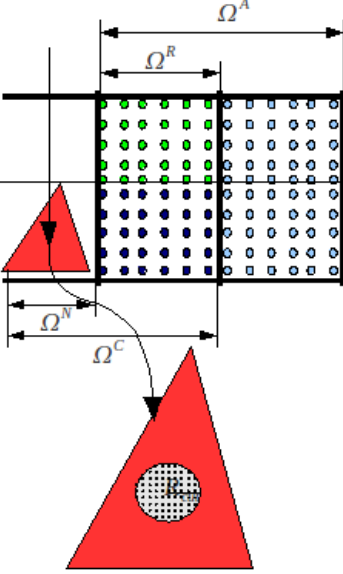
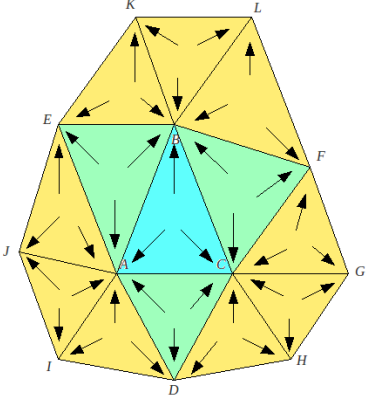
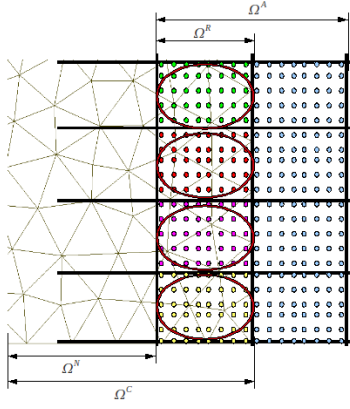
... suite à la page suivante ...

... suite de la page précédente ...

Notation	Description	Schéma	Formule
$N_{D_{Rcut}}^A$	Nombre d'atomes dans un disque de rayon $R_{cut}$		$N_{D_{Rcut}}^A = \mathcal{A}_{D_{Rcut}} \cdot d_A \quad (1.8)$
$N_T^A$	Nombre d'atomes dans un triangle $ABC$ formé par les noeuds $nd1$ , $nd2$ et $nd3$		$N_T^A = \mathcal{A}_T \cdot d_A \quad (1.9)$
$C_e$	Coût de calcul pour un élément fini dans la zone normale (représenté par un sommet de l'hypergraphe)		cf. équation 1.12

... suite à la page suivante ...

... suite de la page précédente ...

Notation	Description	Schéma	Formule
$C_e^{BZ}$	Coût de calcul pour un élément fini dans la zone de recouvrement (représenté par un sommet de l'hypergraphe)		cf. équation 1.13
$C_h$	Coût de calcul pour une hyper-arête normale (dans la zone normale ou dans la zone de recouvrement)		cf. équation 1.14
$C_h^{BZ}$	Coût de calcul pour une hyper-arête de couplage (qui est donc dans la zone de recouvrement)		cf. équation 1.15

Tab. 1.1: Outils pour le calcul des coûts.

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_T &= \frac{1}{2} \cdot \|\vec{AB} \wedge \vec{AC}\| \\
&= \frac{1}{2} \cdot \left| \det \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \right| \\
&= \frac{1}{2} \cdot |x_1(y_2 - y_3) - y_1(x_2 - x_3) + x_2y_3 - x_3y_2| \\
&= \frac{1}{2} \cdot |x_1y_2 - x_1y_3 - x_2y_1 + x_3y_1 + x_2y_3 - x_3y_2|
\end{aligned} \tag{1.10}$$

### 1.1.2 Coût de calcul de la force $F_I$

Reprenons l'algorithme d'intégration en temps de la mécanique des milieux continus  $T_S^C$ .

$$T_S^C \left\{ \begin{array}{l} \dot{u}_I^{n+\frac{1}{2}} = \dot{u}_I^n + \frac{\Delta t}{2M_I} F_I^n \\ u_I^{n+1} = u_I^n + \Delta t \dot{u}_I^{n+\frac{1}{2}} \\ \text{calcul de } F_I^{n+1} \\ \dot{u}_I^{n+1} = \dot{u}_I^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2M_I} F_I^{n+1} \end{array} \right\} \begin{array}{l} * \text{ boucle sur les sommets} \\ ** \text{ boucle sur les triangles} \\ *** \text{ boucle sur les sommets} \end{array}$$

La boucle **\*\*** sur les triangle contient les étapes suivantes :

- Déformation du cristal,
- Calcul du tenseur de Piola,
- Accumulation de la force sur les sommets du triangle.

On note la complexité de cette boucle  $C_F$ . Cette complexité est prédominante devant les complexités des boucles **\*** et **\*\*\***

$$\begin{aligned}
C_F &= \dots \\
&= \dots
\end{aligned} \tag{1.11}$$

### 1.1.3 Coût de calcul des sommets de l'hypergraphe

Les poids qu'on mettra sur les sommets de l'hypergraphe modélise le coût de calcul nécessaire pour un élément fini. Il y a deux types de sommets (modélisant les éléments) dans l'hypergraphes : les sommets qui sont dans la zone de recouvrement et les sommet hors de cette zone (i.e dans la zone normale). Les coûts de calcul sont calculés en fonction du nombre d'atomes.

**Dans la zone normale** C'est le coût du calcul de la force au centre de gravité d'un triangle (élément) dans les conditions de l'approximation de Cauchy-Born. Cela correspond au nombre d'atomes dans un disque de rayon  $R_{cut}$  (Cf. tableau 1.1).

$$\begin{aligned}
C_e &= \mathcal{A}_{D_{R_{cut}}} \cdot d_A^F \\
&= \pi \left( \frac{R_{cut}}{r_0} \right)^2
\end{aligned} \tag{1.12}$$

**Dans la zone de recouvrement** En plus du coût normal (calculé au paragraphe précédent) on rajoute le coût de couplage qui est le nombre 'atomes par éléments (Cf. tableau 1.1). On supposera que les triangles sont isométriques sur la zone de recouvrement.

$$\begin{aligned}
 C_e^{BZ} &= C_e + N_T^A \\
 &= \mathcal{A}_{D_{Rcut}} \cdot d_A^F + \mathcal{A}_T \cdot d_A \\
 &= \frac{\pi R_{cut}^2 + \mathcal{A}_T}{r_0^2}
 \end{aligned} \tag{1.13}$$

### 1.1.4 Coût de calcul des hyper-arêtes de l'hypergraphe

Les coûts qu'on mettra sur les hyper-arêtes de l'hypergraphe modélisent les volumes de communication entre les hyper-arêtes.

**Dans la zone normale** Une hyper-arête normale contient 4 éléments.

$$\begin{aligned}
 C_h &= \dots \\
 &= \dots
 \end{aligned} \tag{1.14}$$

**Dans la zone de recouvrement** Comme on a décrit précédemment, une hyper-arête de couplage regroupe les éléments de la zone de couplage qui sont dans une même boîte d'atomes.

Reprenons l'algorithme d'intégration en temps de couplage  $T_C^R$  (cf. section ?? page ??)

$$T_C^R \left\{ \begin{array}{l}
 (1a) \quad rhs_i^A = -d_\alpha^{n+1} \\
 (1b) \quad rhs_i^C = \sum_J \varphi_J(X_\alpha) \dot{u}_J^{n+1} \\
 (2) \quad rhs_i = rhs_i^A + rhs_i^C \\
 (3) \quad \lambda = A^{-1} rhs \\
 (4a) \quad \dot{d}_\alpha^{n+1} \leftarrow \dot{d}_\alpha^{n+1} - \frac{\Delta t}{2m_\alpha \alpha_\alpha} \lambda \\
 (4b) \quad \dot{u}_i^{n+1} \leftarrow \dot{u}_i^{n+1} + \frac{\Delta t}{2m_i \alpha_i} \sum_i \varphi_i(X_\alpha) \lambda_\alpha
 \end{array} \right. \left. \begin{array}{l}
 \} \text{ Calcul du second membre} \\
 \} \text{ Calcul des multiplicateurs} \\
 \} \text{ Correction des vitesses}
 \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned}
 C_h^{BZ} &= \frac{N_e^{BZ}}{P.Q} \cdot N_T^A \cdot C_h \\
 &= \dots
 \end{aligned} \tag{1.15}$$

### 1.1.5 Etude d'un exemple

Les détails de calculs seront évalués sur l'exemple de la figure 1.1 après la validation et la finalisation du calcul théorique des coûts.

\*\*\*\*\*  
 \*\*\*\*\* TODO : details de calcul pour un exemple simple \*\*\*\*\*  
 \*\*\*\*\*



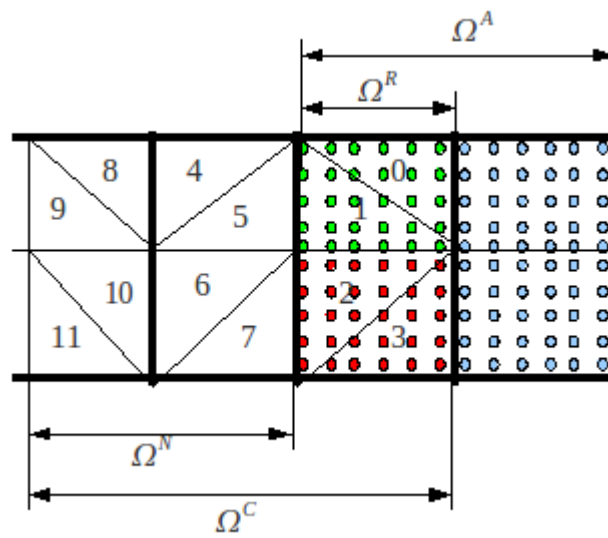


Fig. 1.1: Exemple de calcul de coût.