

Auteurs de la proposition : Olivier Coulaud, Jean Roman
E-mail : Olivier.Coulaud@inria.fr , Jean.Roman@labri.fr
Téléphone : 05 24 57 4080, 05 24 57 4033

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

Equipe-Projet : ScAlApplix (<http://www.labri.fr/projet/scalapplix/scalapplix.html>)

Contexte de 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 MégaJoule), 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.

Description de l'activité du projet de fin d'étude :

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 ne permettrait pas de mieux décrire le couplage. Dans le cadre de la propagation de fissures et à l'aide de la bibliothèque Libmultiscale [1], il s'agira 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 remis en cause ; nous ne pouvons 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 nœuds 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 [2] ou d'hypergraphes ZOLTAN [3] pour analyser, implémenter et tester les différentes stratégies.

Ce travail sera rémunéré, il pourra faire l'objet d'un stage de Master Recherche et pourra être poursuivi dans le cadre d'une thèse.

[1] Libmultiscale <http://libmultiscale.gforge.inria.fr/>

[2] SCOTCH, <http://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch/>

[3] ZOLTAN, <http://www.cs.sandia.gov/Zoltan/>

Compétences et aptitudes requises : algorithmique parallèle, couplage de codes, partitionnement de graphes et d'hypergraphes.

Pour plus d'informations, contactez : Olivier.Coulaud@inria.fr, Jean.Roman@labri.fr