

Simulation multi-échelles des solides par une approche couplée dynamique moléculaire/éléments finis. De la modélisation à la simulation haute performance.

Guillaume ANCIAUX

Université Bordeaux I
Projet ScAIApplix : INRIA Futurs et LaBRI

CEA-DAM Ile-de-France

6 juillet 2007



1 Introduction

- Contexte et objectifs
- Méthodes multi-échelles

2 Notre méthode

- Formulation initiale
- Effets indésirables
- Analyse 1D du modèle de couplage

3 Modèles informatiques

- Structures de données
- Parallélisation

4 Résultats

- Cas de propagation d'ondes
- Cas de propagation de fissure
- Mesures de performances
- Partitionnement de graphe

5 Conclusion

1 Introduction

- Contexte et objectifs
- Méthodes multi-échelles

2 Notre méthode

- Formulation initiale
- Effets indésirables
- Analyse 1D du modèle de couplage

3 Modèles informatiques

- Structures de données
- Parallélisation

4 Résultats

- Cas de propagation d'ondes
- Cas de propagation de fissure
- Mesures de performances
- Partitionnement de graphe

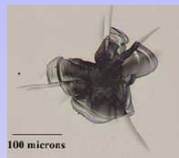
5 Conclusion

Contexte :

- Laser mégajoule et endommagement laser
- Simulation des matériaux, à différentes échelles :
 - microscopique (applications aux nano-technologies)
 - macroscopique (applications industrielles)
- Algorithmes parallèles et HPC

Objectifs :

- 1 Étude des mécanismes microscopiques sur objets de taille macroscopique.
 - Simulation de grands volumes de matière
 - Simulation des mécanismes microscopiques
- 2 Analyse des algorithmes de couplage

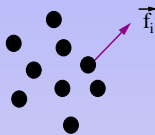


Impact sur des optiques de la LIL

Approche microscopique (dynamique moléculaire)

$$M \frac{d^2 q(t)}{dt^2} = -\nabla V(q(t)) + f^{ext}$$

V est un potentiel empirique (Lennard-Jones, EAM)

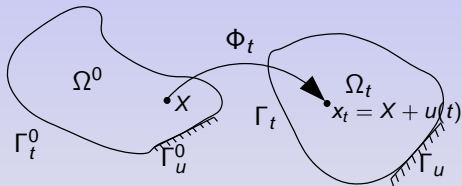


Approche macroscopique (mécanique des milieux continus)

$$\rho \frac{d^2 u(t)}{dt^2} = \text{div} \sigma + f^{ext}$$

σ dépend de la déformation et de l'histoire du matériau.

Discrétisation par éléments finis.



Configuration de référence

Configuration actuelle

Avantages et limitations de la dynamique moléculaire (DM)

- 1 Bonne description de l'ensemble des mécanismes microscopiques (dislocations, phénomènes non réversibles)
- 2 Échelle spatiale : Un cristal de $1 \mu\text{m}^3$ de silicium contient de l'ordre de 10^{11} atomes
- 3 Énormes volumes de données $\sim 6,5$ Tera-octets par pas de temps pour 10^{11} atomes simulés.
- 4 Échelle temporelle : Pas de temps = femto-seconde (10^{-15} s.)

Avantages et limitations des éléments finis (FE)

- 1 Permet de modéliser des objets macroscopiques
- 2 Discontinuité (nouvelles surfaces), singularité (pointes de fissures), lois de comportement empiriques
- 3 Nécessite un maillage très fin afin de capturer l'information pertinente.

Avantages et limitations de la dynamique moléculaire (DM)

- 1 Bonne description de l'ensemble des mécanismes microscopiques (dislocations, phénomènes non réversibles)
- 2 Échelle spatiale : Un cristal de $1 \mu\text{m}^3$ de silicium contient de l'ordre de 10^{11} atomes
- 3 Énormes volumes de données $\sim 6,5$ Tera-octets par pas de temps pour 10^{11} atomes simulés.
- 4 Échelle temporelle : Pas de temps = femto-seconde (10^{-15} s.)

Avantages et limitations des éléments finis (FE)

- 1 Permet de modéliser des objets macroscopiques
- 2 Discontinuité (nouvelles surfaces), singularité (pointes de fissures), lois de comportement empiriques
- 3 Nécessite un maillage très fin afin de capturer l'information pertinente.

Avantages et limitations de la dynamique moléculaire (DM)

- 1 Bonne description de l'ensemble des mécanismes microscopiques (dislocations, phénomènes non réversibles)
- 2 Échelle spatiale : Un cristal de $1 \mu\text{m}^3$ de silicium contient de l'ordre de 10^{11} atomes
- 3 Énormes volumes de données $\sim 6,5$ Tera-octets par pas de temps pour 10^{11} atomes simulés.
- 4 Échelle temporelle : Pas de temps = femto-seconde (10^{-15} s.)

Avantages et limitations des éléments finis (FE)

- 1 Permet de modéliser des objets macroscopiques
- 2 Discontinuité (nouvelles surfaces), singularité (pointes de fissures), lois de comportement empiriques
- 3 Nécessite un maillage très fin afin de capturer l'information pertinente.

Avantages et limitations de la dynamique moléculaire (DM)

- 1 Bonne description de l'ensemble des mécanismes microscopiques (dislocations, phénomènes non réversibles)
- 2 Échelle spatiale : Un cristal de $1 \mu\text{m}^3$ de silicium contient de l'ordre de 10^{11} atomes
- 3 Énormes volumes de données $\sim 6,5$ Tera-octets par pas de temps pour 10^{11} atomes simulés.
- 4 Échelle temporelle : Pas de temps = femto-seconde (10^{-15} s.)

Avantages et limitations des éléments finis (FE)

- 1 Permet de modéliser des objets macroscopiques
- 2 Discontinuité (nouvelles surfaces), singularité (pointes de fissures), lois de comportement empiriques
- 3 Nécessite un maillage très fin afin de capturer l'information pertinente.

Avantages et limitations de la dynamique moléculaire (DM)

- 1 Bonne description de l'ensemble des mécanismes microscopiques (dislocations, phénomènes non réversibles)
- 2 Échelle spatiale : Un cristal de $1 \mu\text{m}^3$ de silicium contient de l'ordre de 10^{11} atomes
- 3 Énormes volumes de données $\sim 6,5$ Tera-octets par pas de temps pour 10^{11} atomes simulés.
- 4 Échelle temporelle : Pas de temps = femto-seconde (10^{-15} s.)

Avantages et limitations des éléments finis (FE)

- 1 Permet de modéliser des objets macroscopiques
- 2 Discontinuité (nouvelles surfaces), singularité (pointes de fissures), lois de comportement empiriques
- 3 Nécessite un maillage très fin afin de capturer l'information pertinente.

Avantages et limitations de la dynamique moléculaire (DM)

- 1 Bonne description de l'ensemble des mécanismes microscopiques (dislocations, phénomènes non réversibles)
- 2 Échelle spatiale : Un cristal de $1 \mu\text{m}^3$ de silicium contient de l'ordre de 10^{11} atomes
- 3 Énormes volumes de données $\sim 6,5$ Tera-octets par pas de temps pour 10^{11} atomes simulés.
- 4 Échelle temporelle : Pas de temps = femto-seconde (10^{-15} s.)

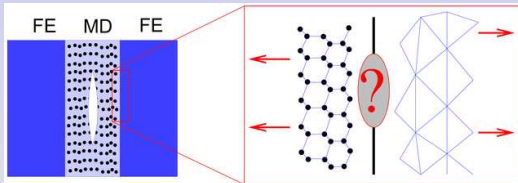
Avantages et limitations des éléments finis (FE)

- 1 Permet de modéliser des objets macroscopiques
- 2 Discontinuité (nouvelles surfaces), singularité (pointes de fissures), lois de comportement empiriques
- 3 Nécessite un maillage très fin afin de capturer l'information pertinente.

Idée : utilisation des avantages des deux modèles

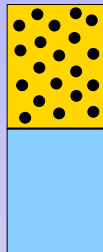
- Le modèle continu
 - Permet de gérer des domaines de grande taille.
- Modèle atomique
 - Bonne description des mécanismes microscopiques.

Comment coupler ces deux modèles ?



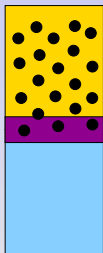
Approche couplage jointif : *seamless*

- Macroscopic, Atomistic and Ab initio Dynamics (MAAD) (Abraham et al. 1998)
- QC-method (Tadmor et al. 1996)
- CGMD (Coarse Grained Molecular Dynamics)
Agglomération de la matrice de raideur



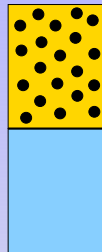
Approche avec recouvrement : *Bridging*

- Bridging Scale Method (Liu)
 - Utilisation des fonctions de Green : prédiction des positions atomiques
 - Dépendance forte à la périodicité cristalline
- Bridging Method (T. Belytschko & S. Xiao)
 - Pondération spatiale de l'énergie
 - Aucune hypothèse sur la structure de l'échantillon simulé



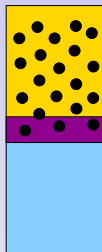
Approche couplage jointif : *seamless*

- Macroscopic, Atomistic and Ab initio Dynamics (MAAD) (Abraham et al. 1998)
- QC-method (Tadmor et al. 1996)
- CGMD (Coarse Grained Molecular Dynamics)
Agglomération de la matrice de raideur



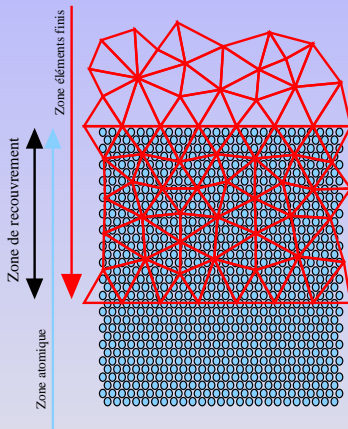
Approche avec recouvrement : *Bridging*

- Bridging Scale Method (Liu)
 - Utilisation des fonctions de Green : prédiction des positions atomiques
 - Dépendance forte à la périodicité cristalline
- Bridging Method (T. Belytschko & S. Xiao)
 - Pondération spatiale de l'énergie
 - Aucune hypothèse sur la structure de l'échantillon simulé



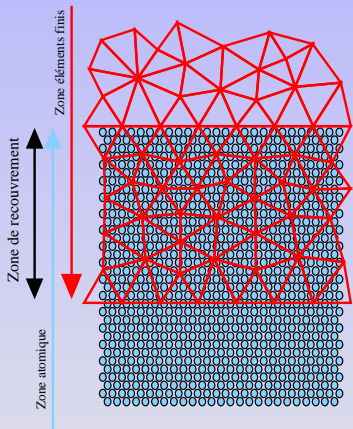
Difficultés numériques :

- Ne pas compter plusieurs fois l'énergie dans la zone de recouvrement
- Différentes échelles de temps/espace
- Réflexions des ondes acoustiques



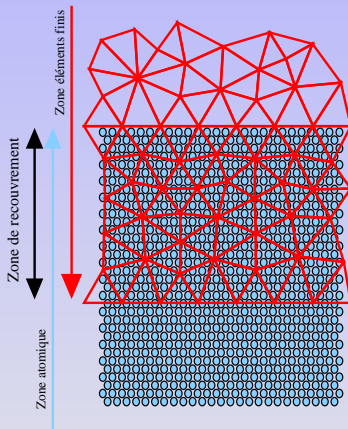
Difficultés numériques :

- Ne pas compter plusieurs fois l'énergie dans la zone de recouvrement
- Différentes échelles de temps/espace
- Réflexions des ondes acoustiques



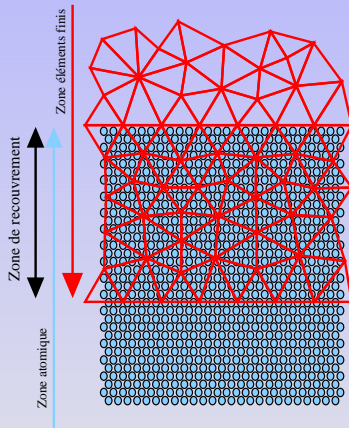
Difficultés numériques :

- Ne pas compter plusieurs fois l'énergie dans la zone de recouvrement
- Différentes échelles de temps/espace
- Réflexions des ondes acoustiques



Difficultés numériques :

- Ne pas compter plusieurs fois l'énergie dans la zone de recouvrement
- Différentes échelles de temps/espace
- Réflexions des ondes acoustiques



1 Introduction

- Contexte et objectifs
- Méthodes multi-échelles

2 Notre méthode

- Formulation initiale
- Effets indésirables
- Analyse 1D du modèle de couplage

3 Modèles informatiques

- Structures de données
- Parallélisation

4 Résultats

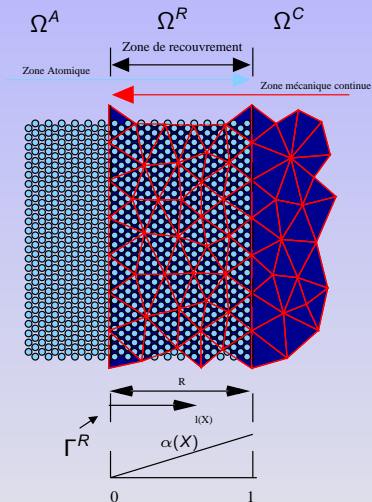
- Cas de propagation d'ondes
- Cas de propagation de fissure
- Mesures de performances
- Partitionnement de graphe

5 Conclusion

La Bridging Method est introduite par T. Belytschko & S. Xiao

Idée :

- Formulation Hamiltonienne (énergie) et schéma d'intégration (Velocity Verlet) communs pour les deux modèles
- Pondération de l'énergie des deux modèles pour lisser la transition des phénomènes dynamiques.
- Imposer des déplacements équivalents pour les deux domaines
- "Recoller" les modèles par l'application de contraintes (multiplicateurs de Lagrange)



La Bridging Method décrite par S. Xiao se base sur une formulation Hamiltonienne pondérée spatialement.

$$E = \tilde{E}^A + \tilde{E}^C + g(\mathbf{q}_{\Omega^R}, \mathbf{u}_{\Omega^R})\lambda \quad g_i = \sum_I \varphi_I(X_i)u_i - q_i = 0$$

$$\tilde{E}^A = \sum_{\mathbf{q}_i \in \Omega^A_{|\Omega^R}} E_i(\mathbf{q}_{\Omega^A}) + \sum_{\mathbf{q}_i \in \Omega^R} (1 - \alpha(\mathbf{X}_i))E_i(\mathbf{q}_{\Omega^R})$$

$$\tilde{E}^C = \sum_{\mathbf{e} \in \Omega^C_{|\Omega^R}} E_e(\mathbf{u}_{\Omega^C}) + \int_{\Omega^R} \alpha(\mathbf{X}) E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R}) d\mathbf{X}$$

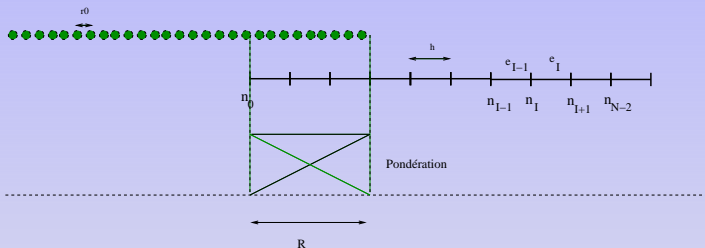
La contrainte est appliquée par résolution du système suivant :

$$\forall i, \quad g_i(\dot{u}(X_i) - \dot{q}_i) = \dot{y}(X_i) - \dot{x}_i = 0 \implies H\lambda = rhs$$

où H est la matrice des contraintes

Il existe une force résiduelle R_i due au couplage.

Nous avons mis en évidence son existence dans un contexte de la chaîne monoatomique 1D couplée avec un maillage homogène de pas h .



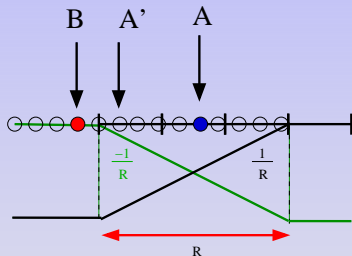
La pondération énergétique modifie l'expression des forces :

$$\tilde{\mathbf{F}}_I = \int_{\Omega^R} \alpha(\mathbf{X}) \frac{\partial E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R})}{\partial \mathbf{u}_I} d\mathbf{X}$$

$$\tilde{\mathbf{f}}_i = \sum_{\mathbf{q}_k \in \Omega^A} \left[1 - \frac{\alpha(\mathbf{X}_i) + \alpha(\mathbf{X}_k)}{2} \right] \frac{\partial E_{pot}^A(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_k)}{\partial \mathbf{q}_i}.$$

Dans une situation cristalline homogène et un domaine éléments finis sans déformation :

- Atome central (A) : force nulle
- Atome au bord du recouvrement (B,A') : force résiduelle due à la formulation non locale des interactions atomiques et la pondération spatiale.



- Si $R_{cut} \geq 2r_0$, la force résiduelle est non nulle pour des atomes proches des bords de la zone de couplage et particulièrement pour des atomes **hors de la zone de couplage**. La contrainte de Lagrange ne pourra donc en aucun cas corriger cette force résiduelle.
- Après relaxation, le cristal est déformé aux bords de la zone de couplage.

- Approximation : **négliger les forces fantômes.**

$$\tilde{\mathbf{F}}_I = \int_{\Omega^R} \alpha(\mathbf{X}) \frac{\partial E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R})}{\partial \mathbf{u}_I} d\mathbf{X} \simeq \alpha(\mathbf{X}_I) \int_{\Omega^R} \frac{\partial E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R})}{\partial \mathbf{u}_I} d\mathbf{X} = \alpha(\mathbf{X}_I) \mathbf{F}_I$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}}_i &= \sum_{\mathbf{q}_k \in \Omega^A} \left[1 - \frac{\alpha(\mathbf{X}_i) + \alpha(\mathbf{X}_k)}{2} \right] \frac{\partial E_{pot}^A(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_k)}{\partial \mathbf{q}_i} \simeq (1 - \alpha(\mathbf{X}_i)) \sum_{\mathbf{q}_k \in \Omega^A} \frac{\partial E_{pot}^A(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_k)}{\partial \mathbf{q}_i} \\ &= (1 - \alpha(\mathbf{X}_i)) \mathbf{f}_i \end{aligned}$$

- Nouvelle expression de l'équation du mouvement pour le système couplé :

$$\begin{cases} M_i \ddot{\mathbf{u}}_i = -\mathbf{F}_I + \frac{1}{\alpha(\mathbf{X}_i)} \sum_k \lambda_k \frac{\partial \mathbf{g}_k}{\partial \mathbf{u}_i} \\ m_i \ddot{\mathbf{d}}_i = \mathbf{f}_i + \frac{1}{(1-\alpha(\mathbf{X}_i))} \sum_k \lambda_k \frac{\partial \mathbf{g}_k}{\partial \mathbf{d}_i} \end{cases}$$

- Nous pouvons majorer l'erreur commise sur le calcul des forces par un terme proportionnel à l'inverse de la taille du recouvrement.

- Approximation : **négliger les forces fantômes.**

$$\tilde{\mathbf{F}}_I = \int_{\Omega^R} \alpha(\mathbf{X}) \frac{\partial E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R})}{\partial \mathbf{u}_I} d\mathbf{X} \simeq \alpha(\mathbf{X}_I) \int_{\Omega^R} \frac{\partial E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R})}{\partial \mathbf{u}_I} d\mathbf{X} = \alpha(\mathbf{X}_I) \mathbf{F}_I$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}}_i &= \sum_{\mathbf{q}_k \in \Omega^A} \left[1 - \frac{\alpha(\mathbf{X}_i) + \alpha(\mathbf{X}_k)}{2} \right] \frac{\partial E_{pot}^A(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_k)}{\partial \mathbf{q}_i} \simeq (1 - \alpha(\mathbf{X}_i)) \sum_{\mathbf{q}_k \in \Omega^A} \frac{\partial E_{pot}^A(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_k)}{\partial \mathbf{q}_i} \\ &= (1 - \alpha(\mathbf{X}_i)) \mathbf{f}_i \end{aligned}$$

- Nouvelle expression de l'équation du mouvement pour le système couplé :

$$\begin{cases} M_I \ddot{\mathbf{u}}_I = -\mathbf{F}_I + \frac{1}{\alpha(\mathbf{X}_I)} \sum_k \lambda_k \frac{\partial \mathbf{g}_k}{\partial \mathbf{u}_I} \\ m_i \ddot{\mathbf{d}}_i = \mathbf{f}_i + \frac{1}{(1-\alpha(\mathbf{X}_i))} \sum_k \lambda_k \frac{\partial \mathbf{g}_k}{\partial \mathbf{d}_i} \end{cases}$$

- Nous pouvons majorer l'erreur commise sur le calcul des forces par un terme proportionnel à l'inverse de la taille du recouvrement.

- Approximation : **négliger les forces fantômes.**

$$\tilde{\mathbf{F}}_I = \int_{\Omega^R} \alpha(\mathbf{X}) \frac{\partial E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R})}{\partial \mathbf{u}_I} d\mathbf{X} \simeq \alpha(\mathbf{X}_I) \int_{\Omega^R} \frac{\partial E_{pot}^C(\mathbf{u}_{\Omega^R})}{\partial \mathbf{u}_I} d\mathbf{X} = \alpha(\mathbf{X}_I) \mathbf{F}_I$$

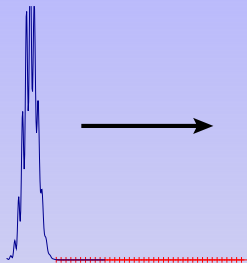
$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{f}}_i &= \sum_{\mathbf{q}_k \in \Omega^A} \left[1 - \frac{\alpha(\mathbf{X}_i) + \alpha(\mathbf{X}_k)}{2} \right] \frac{\partial E_{pot}^A(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_k)}{\partial \mathbf{q}_i} \simeq (1 - \alpha(\mathbf{X}_i)) \sum_{\mathbf{q}_k \in \Omega^A} \frac{\partial E_{pot}^A(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_k)}{\partial \mathbf{q}_i} \\ &= (1 - \alpha(\mathbf{X}_i)) \mathbf{f}_i \end{aligned}$$

- Nouvelle expression de l'équation du mouvement pour le système couplé :

$$\begin{cases} M_I \ddot{\mathbf{u}}_I = -\mathbf{F}_I + \frac{1}{\alpha(\mathbf{X}_I)} \sum_k \lambda_k \frac{\partial \mathbf{g}_k}{\partial \mathbf{u}_I} \\ m_i \ddot{\mathbf{d}}_i = \mathbf{f}_i + \frac{1}{(1-\alpha(\mathbf{X}_i))} \sum_k \lambda_k \frac{\partial \mathbf{g}_k}{\partial \mathbf{d}_i} \end{cases}$$

- Nous pouvons majorer l'erreur commise sur le calcul des forces par un terme proportionnel à l'inverse de la taille du recouvrement.

Condition initiale

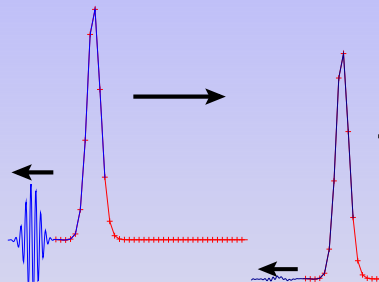


La qualité du couplage dépend de :

- 1 Taille du recouvrement
- 2 Taille des éléments
- 3 Pondération du premier élément

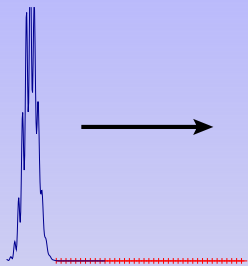
Couplage non adaptée

Couplage adapté



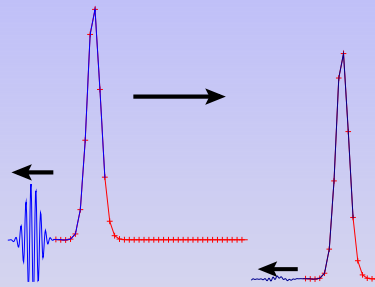
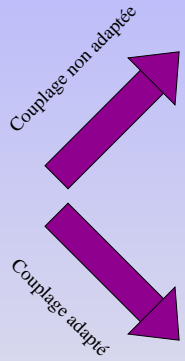
⇒ étude de la fonction de transfert

Condition initiale



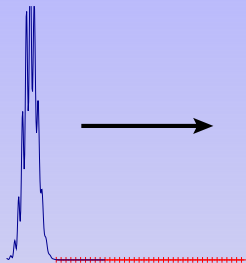
La qualité du couplage dépend de :

- 1 Taille du recouvrement
- 2 Taille des éléments
- 3 Pondération du premier élément

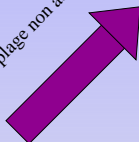


⇒ étude de la fonction de transfert

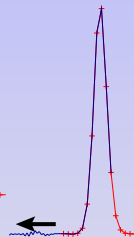
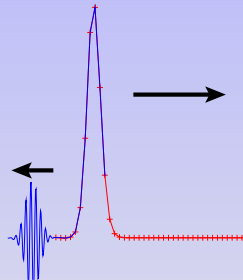
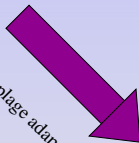
Condition initiale



Couplage non adaptée



Couplage adapté

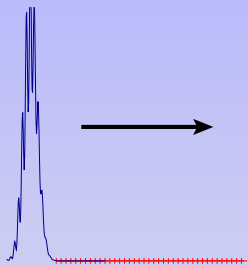


La qualité du couplage dépend de :

- 1 Taille du recouvrement
- 2 Taille des éléments
- 3 Pondération du premier élément

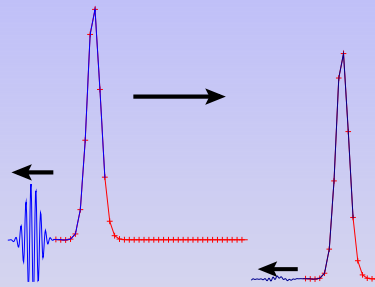
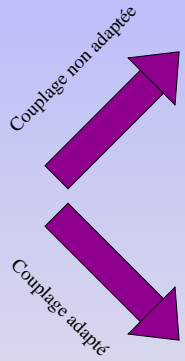
⇒ étude de la fonction de transfert

Condition initiale



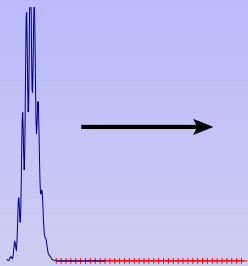
La qualité du couplage dépend de :

- 1 Taille du recouvrement
- 2 Taille des éléments
- 3 Pondération du premier élément



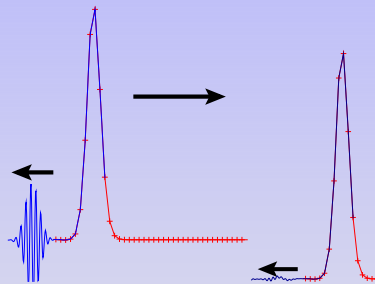
⇒ étude de la fonction de transfert

Condition initiale



Couplage non adaptée

Couplage adapté

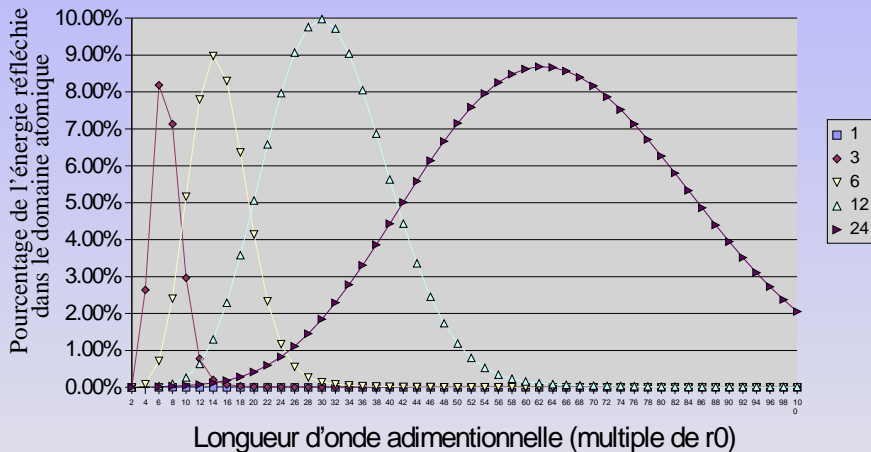


La qualité du couplage dépend de :

- 1 Taille du recouvrement
- 2 Taille des éléments
- 3 Pondération du premier élément

⇒ étude de la fonction de transfert

Coefficients de réflexion en fonction de la fréquence injectée



Équation du mouvement couplé (1)

- On souhaite trouver l'équation de la dynamique qui est calculé dans une zone de couplage
- Utilisation du schéma d'intégration *velocity verlet*
- Forme matricielle de l'accroissement des vitesses :

$$m \frac{\dot{q}(t + \Delta t) - \dot{q}(t)}{\Delta t} = \bar{f}(t) + z_{1 \rightarrow 2} \bar{F}(t) + z_{1 \rightarrow 1} \bar{f}(t) + \theta^{-1} H^{-1} \frac{g(\dot{u}(t), \dot{q}(t))}{\Delta t}$$

$$M \frac{\dot{u}(t + \Delta t) - \dot{u}(t)}{\Delta t} = \bar{F} + z_{2 \rightarrow 1} \bar{F}(t) + z_{2 \rightarrow 1} - \beta^{-1} A^t H^{-1} \frac{g(\dot{u}(t), \dot{q}(t))}{\Delta t}$$

avec : $\bar{f}(t) = \frac{1}{2}(f(t) + f(t + \Delta t))$, $A_{ij} = \varphi_j(X_i)$ et θ et β les matrices de pondérations et la matrice de contrainte $H_{ij} = \frac{\sum_J \varphi_J(X_i) \varphi_J(X_j)}{\alpha(X_J) M_J} - \frac{1}{\alpha_i m_i} \delta_{ij}$

- La contrainte n'est pas nulle lorsque l'on utilise une approche condensée $\tilde{H}_{ij} = \delta_{ij} \sum_k H_{ik}$
- Il faut pouvoir maîtriser le dernier terme pour faire tendre Δt vers 0 et ainsi trouver une équation de la dynamique.

Équation du mouvement couplé (2)

- Nous avons montré sous certaines conditions et notamment concernant les valeurs propres de la matrice $Q = (I - H\tilde{H}^{-1})$:

$$g(\dot{u}(t + n\Delta t), \dot{q}(t + n\Delta t)) = \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^n Q^i \mathcal{F}(t)$$

$$\mathcal{H}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{g(\dot{u}(t), \dot{q}(t))}{\Delta t} = (\tilde{H}H^{-1} - I)$$

- $\Delta t = 0 \implies$ minimisation de l'influence du passé de la contrainte.
- Après linéarisation des forces on peut écrire l'équation du mouvement sous la forme d'un système matriciel :

$$\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{d} \\ \ddot{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ u \end{pmatrix}$$

- On étudiera alors les modes admis par cet oscillateur harmonique sans friction.

Équation du mouvement couplé (2)

- Nous avons montré sous certaines conditions et notamment concernant les valeurs propres de la matrice $Q = (I - H\tilde{H}^{-1})$:

$$g(\dot{u}(t + n\Delta t), \dot{q}(t + n\Delta t)) = \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^n Q^i \mathcal{F}(t)$$

$$\mathcal{H}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{g(\dot{u}(t), \dot{q}(t))}{\Delta t} = (\tilde{H}H^{-1} - I)$$

- $\Delta t = 0 \implies$ minimisation de l'influence du passé de la contrainte.
- Après linéarisation des forces on peut écrire l'équation du mouvement sous la forme d'un système matriciel :

$$\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{d} \\ \ddot{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ u \end{pmatrix}$$

- On étudiera alors les modes admis par cet oscillateur harmonique sans friction.

Équation du mouvement couplé (2)

- Nous avons montré sous certaines conditions et notamment concernant les valeurs propres de la matrice $Q = (I - H\tilde{H}^{-1})$:

$$g(\dot{u}(t + n\Delta t), \dot{q}(t + n\Delta t)) = \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^n Q^i \mathcal{F}(t)$$

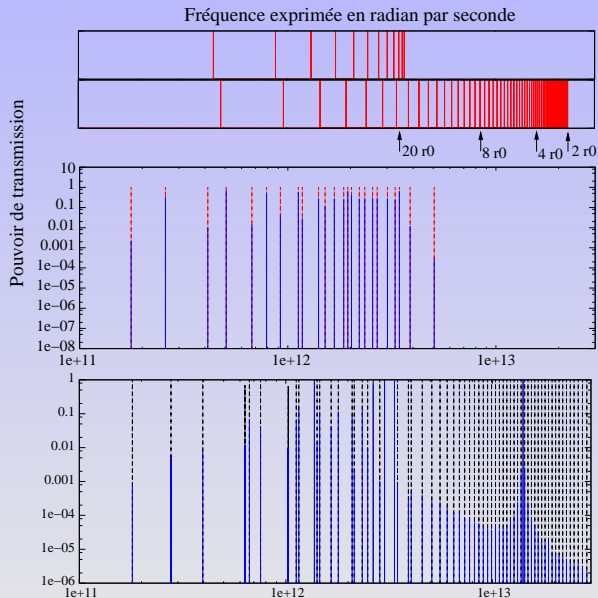
$$\mathcal{H}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{g(\dot{u}(t), \dot{q}(t))}{\Delta t} = (\tilde{H}H^{-1} - I)$$

- $\Delta t = 0 \implies$ minimisation de l'influence du passé de la contrainte.
- Après linéarisation des forces on peut écrire l'équation du mouvement sous la forme d'un système matriciel :

$$\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{d} \\ \ddot{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ u \end{pmatrix}$$

- On étudiera alors les modes admis par cet oscillateur harmonique sans friction.

Étude des modes ($R = 12h, h = 6r_0$)



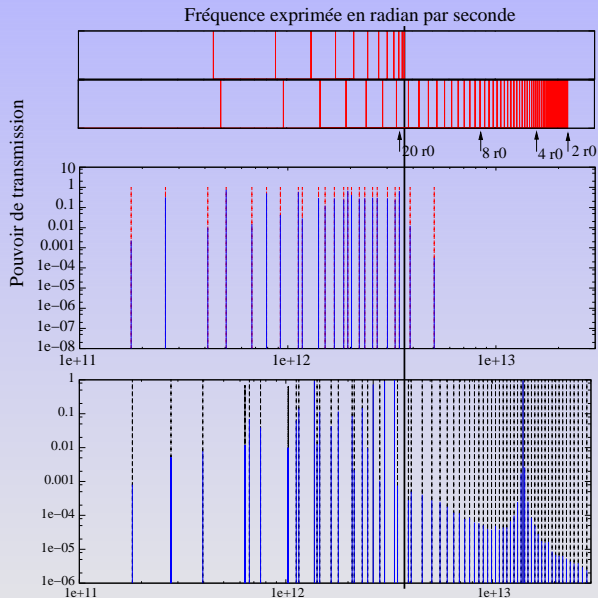
Modes éléments finis

Modes chaîne atomique

Modes modèle de couplage

Modes modèle de couplage
cas condensé

Étude des modes ($R = 12h$, $h = 6r_0$)



Modes éléments finis

Modes chaîne atomique

Modes modèle de couplage

Modes modèle de couplage
cas condensé

- Nous avons fait une approximation concernant le calcul des forces, ce qui nous a affranchi des forces fantômes
- Nous avons fait des mesures du taux de réflexion d'ondes induit par notre méthode à partir de simulations.
- Nous avons exhibé l'équation de la dynamique qui est résolue dans la zone de couplage.
- Nous avons montré que la condensation de la matrice induisait une force supplémentaire
- Nous avons pu faire le lien entre cette fréquence de coupure et les "pics" de réflexions observés et notamment la dépendance forte avec la taille des éléments finis.
- Nous avons montré le décalage de la fréquence de coupure d'une zone de couplage et particulièrement dans le cas où l'on condense la matrice de contrainte.

En revanche :

- La formulation linéaire sous forme d'oscillateur harmonique ne permet pas de quantifier la réponse des modes face à des stimulations

1 Introduction

- Contexte et objectifs
- Méthodes multi-échelles

2 Notre méthode

- Formulation initiale
- Effets indésirables
- Analyse 1D du modèle de couplage

3 Modèles informatiques

- Structures de données
- Parallélisation

4 Résultats

- Cas de propagation d'ondes
- Cas de propagation de fissure
- Mesures de performances
- Partitionnement de graphe

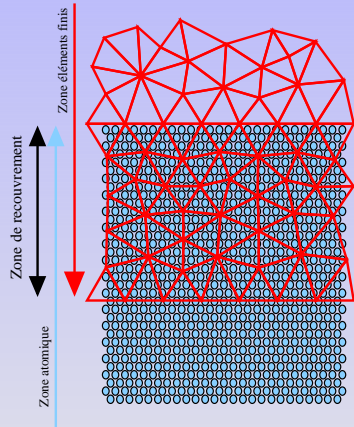
5 Conclusion

Application du couplage :

- Résolution d'un système linéaire $H\lambda = rhs$ ou bien calcul direct à l'aide de \tilde{H}
- Le second membre à pour valeur : $rhs_i = \sum_J \dot{u}_J \varphi_J(X_i) - \dot{q}_i$

Difficultés algorithmiques :

- Calcul efficace des fonctions de base éléments finis dans la zone de recouvrement ($\varphi_I(X_i)$).
- Besoin de structures de données adaptées à l'interface
- Garder la cohérence des structures de données

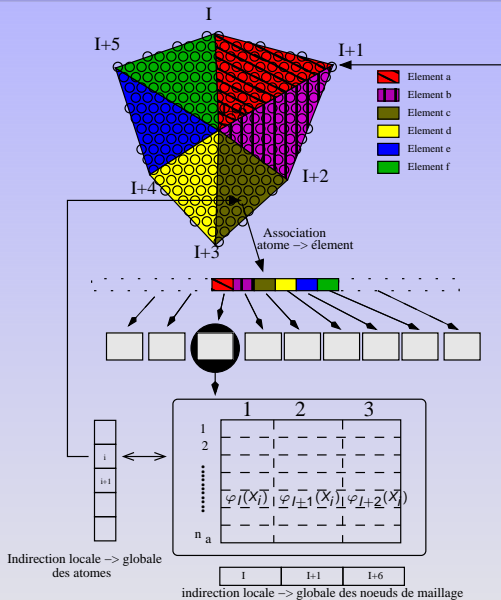


Structure de données pour l'interpolation rapide

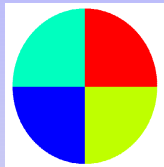
Maintient d'une association entre chaque atome et l'élément qui le contient (optimisation de son calcul par des boîtes de verlet)

Pré-calculs des fonctions de bases pour tout site atomique $\varphi_I(X_i)$

- Les fonctions de bases sont stockées dans une structure de donnée appropriée
- Cela permet, grâce à l'association atome/élément, d'accéder en temps constant aux champs interpolés.

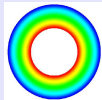
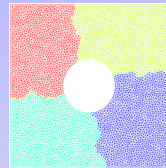


Stratégie : deux ensembles de processeurs distincts pour chaque modèle

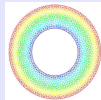


Dynamique moléculaire
(Stamp, Lammmps)

Mécanique des milieux continus
(LibMesh)



Pondération MD



Pondération FE

Intéraction
de couplage

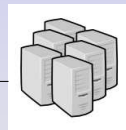
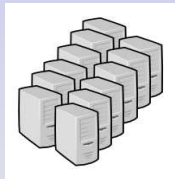
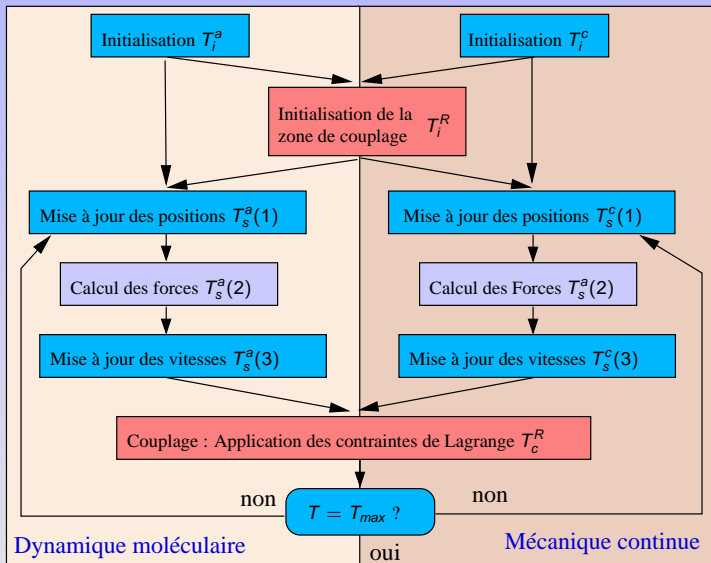
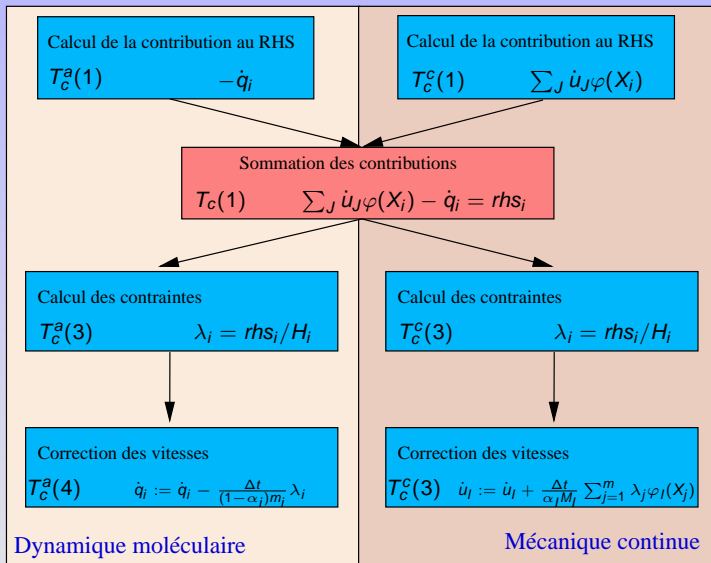


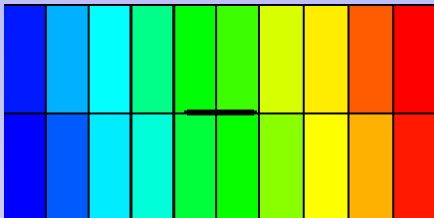
Diagramme du couplage de deux codes parallèles (SPMD)



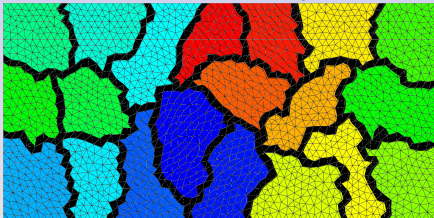
Détails de l'étape de couplage



Décomposition en boîtes ou macro-boîtes
Autorise les migrations d'atomes d'un processeur à l'autre

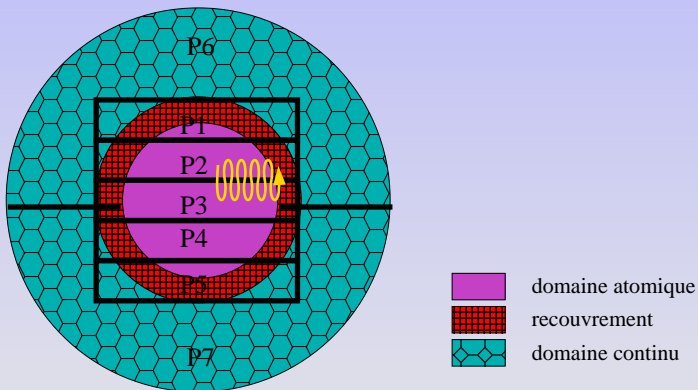


Décomposition par partitionnement de graphe (Métis, Scotch...)



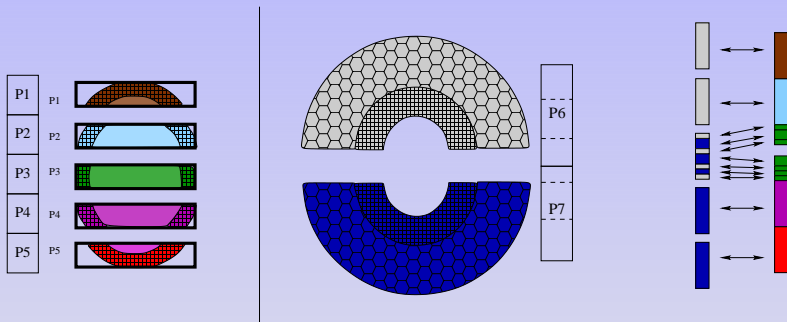
Pour illustrer nos explications, on considère la distribution suivante :

5 processeurs dédiés à la dynamique moléculaire et 2 processeurs dédiés à la mécanique des milieux continus



Redistribution des données du système de contrainte (2)

Dans le cas où le placement des modèles est fait sur deux ensembles de processeurs différents : **chacun d'eux possède un vecteur parallèle représentant le vecteur des inconnues. Ce dernier est donc dupliqué.**



- Le schéma de redistribution peut être entrelacé selon le positionnement des atomes en mémoire.
- Renumerotation des multiplicateurs de Lagrange permet de minimiser les communications
- Suites aux migrations le schéma de communication garde sa cohérence par un protocole réseau dédié

1 Introduction

- Contexte et objectifs
- Méthodes multi-échelles

2 Notre méthode

- Formulation initiale
- Effets indésirables
- Analyse 1D du modèle de couplage

3 Modèles informatiques

- Structures de données
- Parallélisation

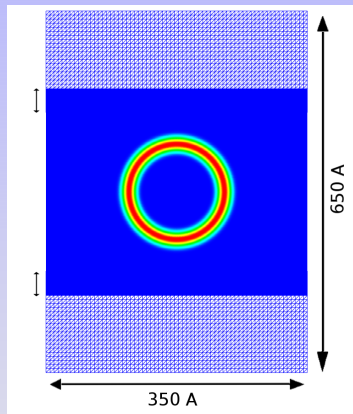
4 Résultats

- Cas de propagation d'ondes
- Cas de propagation de fissure
- Mesures de performances
- Partitionnement de graphe

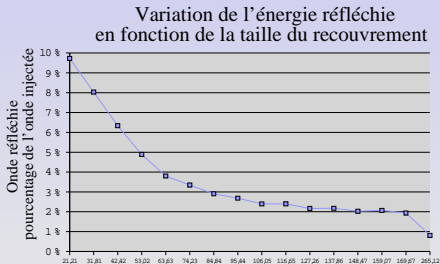
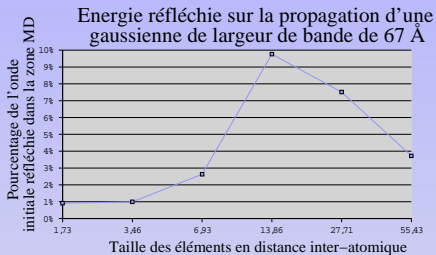
5 Conclusion

- Développement en C++
- Codes sous-jacents de dynamique moléculaire
 - Stamp (CEA), testé avec le potentiel Lennard Jones ajusté pour l'argon (1D,2D,3D), et avec le potentiel EAM ajusté pour un cristal de Cuivre en configuration CFC.
 - Lammps (Sandia), testé avec le potentiel Lennard Jones ajusté pour l'argon (2D et 3D) et avec EAM ajusté pour un cristal de cuivre en configuration CFC.
- Codes sous-jacents de mécanique des milieux continus
 - Elements finis pour l'élasticité non linéaire avec un comportement basé sur la règle de Cauchy-Born.
 - Implémentation à partir de la librairie *libMesh*.
- Plateformes de calcul utilisées
 - Grid5000 (site de Bordeaux et Sophia-Antipolis), jusqu'à 100 processeurs AMD Opterons (IBM eSeries) avec interconnection réseau Myrinet et Infiniband.
 - Linux (Debian, Gentoo, Fedora), AIX

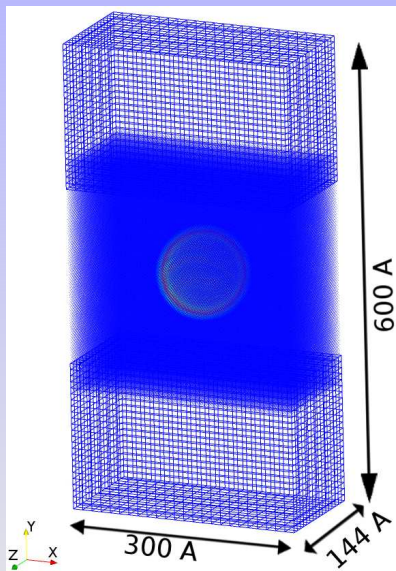
- Cristal d'argon à 0 Kelvin (Lennard Jones, 296 400 atomes)
- Maillage structuré (2×1716 nœuds, 3250 éléments), éléments P1, Cauchy-Born
- Conditions limites périodiques selon l'axe X
- Condition initiale de déplacement gaussienne ($A \cdot e^{-(\|x\| - r)^2 / \tau}$) de largeur $\tau = 67 \text{ \AA}$
- 36 processeurs, 2 secondes par pas de temps



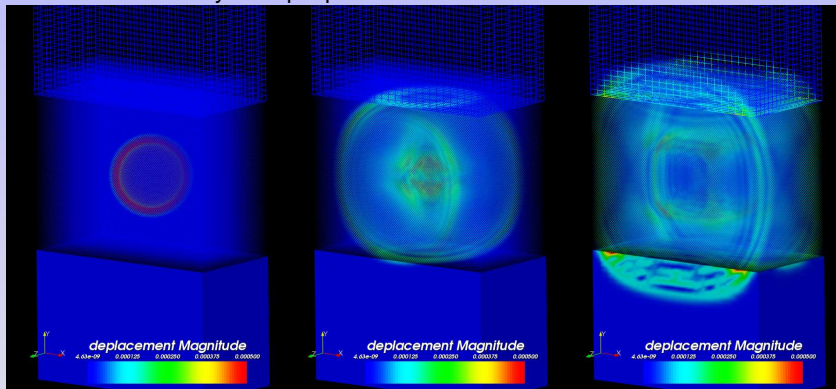
Confirmation de la problématique fréquentielle :



- Cristal de Cuivre à température nulle (Potentiel EAM, 1 024 000 atomes).
- Maillage structuré ($2 \times 9\,216$ éléments, 10 625 nœuds), éléments P1, Cauchy-Born.
- Conditions limites périodiques selon l'axe X et Z.
- Condition initiale de déplacement gaussienne ($A \cdot e^{-(\|x\| - r)^2 / \tau}$) de largeur $\tau = 67 \text{ \AA}$.

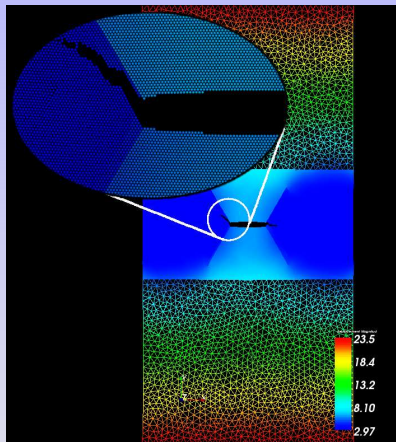
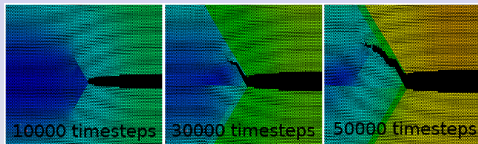


Perturbation de la dynamique par les ondes miroirs dues aux conditions limites.



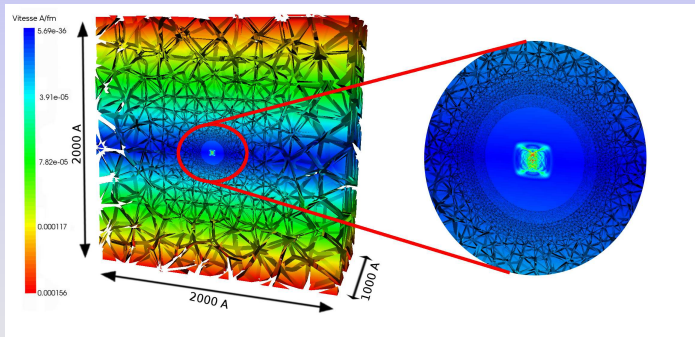
Boite de $600 \text{ \AA} \times 800 \text{ \AA}$

- 91 556 atomes(Lennard Jones)
- 1 129 nœuds, 2 082 éléments.
- Conditions limites périodiques selon l'axe X.
- *penny shaped crack* : occlusion créée en retirant des atomes (ellipsoïde $50 \text{ \AA} \times 2,5 \text{ \AA}$).
- Perturbation de la dynamique par les ondes miroirs dues aux conditions limites.

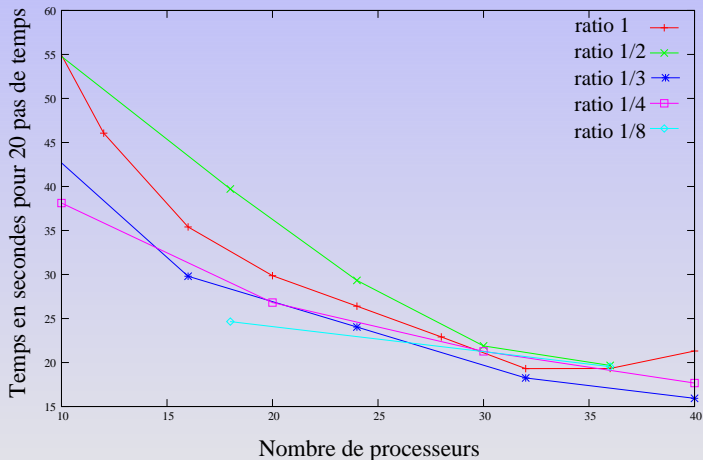


Propagation de fissure dans un cristal de Cuivre (3D)

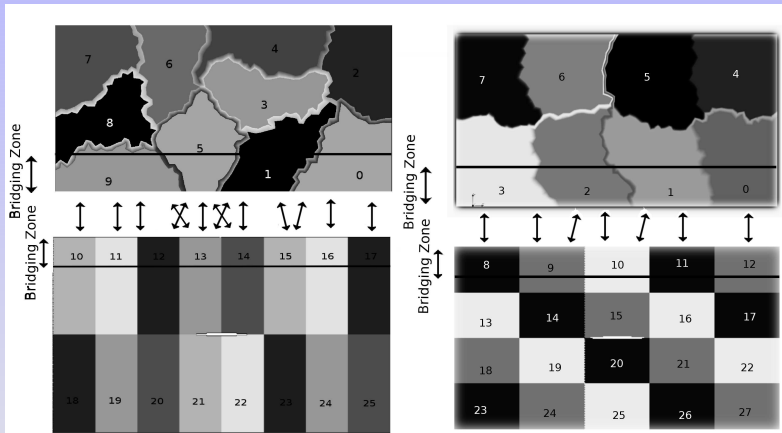
- Cristal de Cuivre à température nulle, potentiel EAM tabulé (2 829 575 atomes).
- Maillage non structuré avec déraffinement, éléments P1, Cauchy-Born. (575 679 éléments et 92 814 nœuds)
- Zone de couplage ellipsoïdale pour éviter des conditions limites périodiques
- *penny crack* : occlusion créée en retirant des atomes (ellipsoïde 25 Å, 1.8 Å et 1.8 Å).
- Modèle toujours en cours de développement (extraction des données, ...)



Temps de simulation couplée en fonction de nombre de processeurs pour des rapports de distributions distincts



Mesures de performances du modèle de propagation 2D



1 Introduction

- Contexte et objectifs
- Méthodes multi-échelles

2 Notre méthode

- Formulation initiale
- Effets indésirables
- Analyse 1D du modèle de couplage

3 Modèles informatiques

- Structures de données
- Parallélisation

4 Résultats

- Cas de propagation d'ondes
- Cas de propagation de fissure
- Mesures de performances
- Partitionnement de graphe

5 Conclusion

- Etude approfondie de la *Bridging Method*
 - Contrôle des forces fantômes
 - Formulation du couplage sous forme d'un oscillateur harmonique
 - Étude spectrale du couplage
 - Résultats numériques
- Conception du prototype *LibMultiScale*
 - Structure de données adaptées à l'interpolation rapide
 - Stratégie de distribution du couplage pour des codes parallèles
 - Traitement des migrations atomiques
 - Génération de graphes au format du partitionneur de graphe *Scotch*
 - Composants utiles aux cas tests (Visualisation, stimulation, etc...)

- Modélisation

- Généralisation de l'étude spectrale aux dimensions 2 et 3.
- Enrichissement du modèle harmonique afin de modéliser les modifications d'amplitudes des réflexions.
- Étude du comportement du couplage pour un matériau amorphe.
- Intégration à pas de temps multiples.
- Simulation à températures finies.

- Modèles informatiques

- Amélioration de la préparation du couplage (interface graphique)
- Automatisation de la décomposition de domaines
- Approche *multi-thread* du placement des différentes tâches.
- Redistribution de la ShapeMatrix.

- Position centrale (A) : $\tilde{f}_i = (1 - \alpha(X_i))f_i - \frac{r_0}{2R} \sum_{k=i-\mu, k \neq i}^{i-1} (k - i)f_{i,k}$

- Position au bords du recouvrement (B,A') :

$$f_i^R = (1 - \alpha(X_i))f_i - \frac{r_0}{2R} \sum_{k=i+2}^{i+\mu} (k - i - 1)f_{i,k}$$

- Fonction de pondération non linéaire.

$$f_i^R = (1 - \alpha(X_i))f_i - \frac{1}{2} \sum_{k=-\mu, k \neq 0}^{i+\mu} \left[\sum_{j=0}^p \frac{\alpha^{(2j+1)}(i r_0)}{(2j+1)!} r_0^{2j+1} k^{2j+1} \right] f_{i,k+i} + \mathcal{R}(r_0 k) f_{i,i+k}$$

- Fonction : $\alpha(x) = -2(x/R)^3 + 3(x/R)^2 \implies f_i^R = (1 - \alpha(X_i))f_i -$

Simulation de dynamique moléculaire :

$$M \frac{d^2 \mathbf{x}(t)}{dt^2} = -\nabla V_M(\mathbf{x}(t))$$

où V_M est un potentiel empirique (Lennard-Jones, EAM, Coulomb)

Description fine du système étudié.

Tous les phénomènes de structures sont capturés (dislocations, relaxations du cristal, phénomènes non réversibles)

Équipes :

- A. Nakano (Louisiana State University)
- H. Gao (Max Planck Institute for Metals Research)
- S. Plimpton (Sandia)
- G. Zerah (CEA/DPTA)

(T_s^a) Intégration MD

$$\dot{d}_i^{n+1/2} = \dot{d}_i^n + \frac{\Delta t}{2m_i} f_i^n$$

$$d_i^{n+1/2} = d_i^n + \Delta t \dot{d}_i^{n+1/2}$$

Calcul des forces f_i^{n+1}

$$\dot{d}_i^{n+1} = \dot{d}_i^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2m_i} f_i^{n+1}$$

(T_s^c) Intégration FE

$$\dot{u}_i^{n+1/2} = \dot{u}_i^n + \frac{\Delta t}{2M_i} F_i^n$$

$$u_i^{n+1/2} = u_i^n + \Delta t \dot{u}_i^{n+1/2}$$

Calcul des forces F_i^{n+1}

$$\dot{u}_i^{n+1} = \dot{u}_i^{n+1/2} + \frac{\Delta t}{2M_i} F_i^{n+1}$$

Application de la contrainte

La contrainte : $\forall i, \quad g_i(\dot{y}(X_i) - \dot{q}_i) = \dot{y}(X_i) - \dot{x}_i = 0 \implies A\lambda = rhs$ avec :

$$A_{ij} = \frac{\sum_J \varphi_J(X_i) \varphi_J(X_j)}{\alpha_J M_J} - \frac{1}{\alpha_i m_i} \delta_{i,j}$$

$$rhs_i = \sum_J \dot{y}_J \varphi_J(X_i) - \dot{x}_i$$

A peut être condensée sur sa diagonale $\implies A_i = \sum_j A_{i,j}$

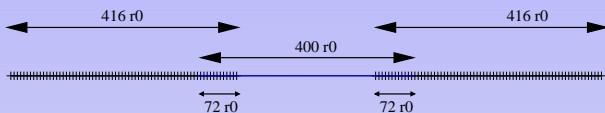
On corrige alors les vitesses :

$$\dot{y}_i = \dot{y}_i + \frac{\Delta t}{\alpha_i M_i} \sum_j \lambda_j \varphi_i(X_j) \quad \dot{x}_i = \dot{x}_i - \frac{\Delta t}{(1 - \alpha_i) m_i} \lambda_i$$

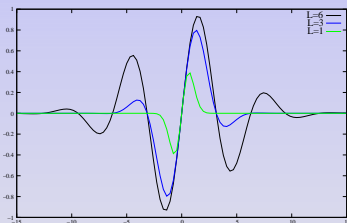
Remarque : Il doit être notifié que pour que le système ne soit pas singulier, la fonction de pondération ne doit pas prendre la valeur nulle.

Système de mesure du taux de réflexions

- Modèle 1D constitué du couplage entre une chaîne d'atome d'argon disposés à l'équilibre et d'un maillage de pas h homogène.



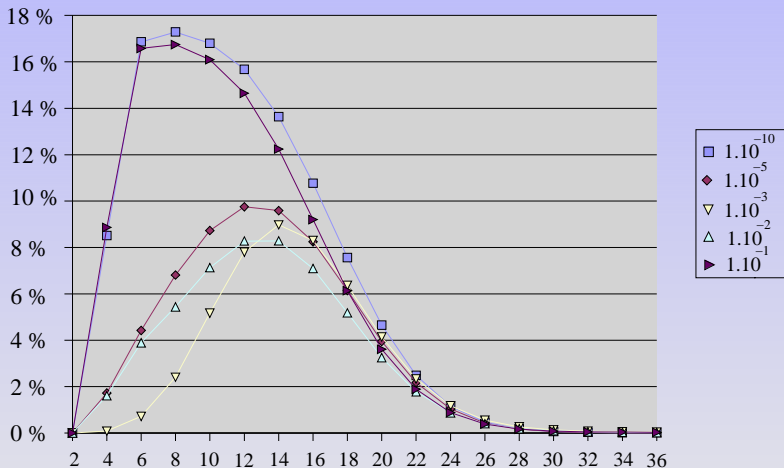
- Stimulation du modèle atomique par une fonction de déplacement avec un spectre maîtrisé.



- Après un nombre suffisant de pas de temps, on mesure l'énergie contenue dans la zone atomique, zone de couplage exclue.
- Comparaison avec le résultat obtenu par une simulation de dynamique moléculaire sur un modèle plus grand avec des conditions limites périodiques.

Coefficients de réflexion en fonction de la fréquence injectée

Pourcentage de l'énergie réfléchie dans le domaine atomique



Longueur d'onde adimensionnelle (multiple de r0)

Équation du mouvement couplé : cas non condensé

- Dans ce cas, la contrainte est résolue exactement et donc $g(\dot{u}(t), \dot{q}(t)) = 0$ pour tout t .
- On peut donc passer à la limite lorsque le pas de temps tend vers zéro pour obtenir l'équation du mouvement couplé suivante :

$$\begin{cases} m\ddot{d}(t) = f(t) + \theta^{-1}H^{-1}AM^{-1}F(t) - \theta^{-1}H^{-1}m^{-1}f(t) \\ M\ddot{u}(t) = F(t) - \beta^{-1}A^tH^{-1}AM^{-1}F(t) + \beta^{-1}A^tH^{-1}m^{-1}f(t). \end{cases}$$

- Si on linéarise les forces, alors $F(t) = K^{FE}u(t)$ et $f(t) = K^Ad(t)$. On obtient alors :

$$\begin{cases} m\ddot{d}(t) = (I - \theta^{-1}H^{-1}m^{-1})K^Ad(t) + \theta^{-1}H^{-1}AM^{-1}K^{FE}u(t) \\ M\ddot{u}(t) = (I - \beta^{-1}A^tH^{-1}AM^{-1})K^{FE}u(t) + \beta^{-1}A^tH^{-1}m^{-1}K^Ad(t). \end{cases}$$

- Ce qui peut aussi être écrit sous la forme d'un système matriciel :

$$\begin{pmatrix} m & 0 \\ 0 & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ddot{d} \\ \ddot{u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d \\ u \end{pmatrix}.$$

où $B_{11} = (I - \theta^{-1}H^{-1}m^{-1})K^A$, $B_{12} = \theta^{-1}H^{-1}AM^{-1}K^{FE}$,
 $B_{21} = \beta^{-1}A^tH^{-1}m^{-1}K^A$ et $B_{22} = (I - \beta^{-1}A^tH^{-1}AM^{-1})K^{FE}$.

Équation du mouvement couplé : cas condensé (1)

- Dans ce cas, la contrainte n'est plus résolue exactement car on utilise une matrice de contrainte modifiée \tilde{H} . Nous avons montré par récurrence la propriété suivante :

$$\forall (t, \Delta t) \in \mathbb{R}^2, \forall n \in \mathbb{N}$$

$$g(\dot{u}(t + n\Delta t), \dot{q}(t + n\Delta t)) = \frac{\Delta t}{2} \sum_{i=1}^n Q^i \left\{ AM^{-1} [F(t + \Delta t(n - i)) + F(t + \Delta t(n - i + 1))] - m^{-1} [f(t + \Delta t(n - i)) + f(t + \Delta t(n - i + 1))] \right\}$$

où $Q = (I - H\tilde{H}^{-1})$.

- L'expression de la contrainte peut donc être assimilée à une convolution entre la fonction

$$\mathcal{F}(t) = AM^{-1} [F(t) + F(t + \Delta t)] - m^{-1} [f(t) + f(t + \Delta t)]$$

et la matrice Q dont les valeurs propres sont particulièrement importantes pour connaître l'influence de « l'historique », mais aussi la stabilité du système.

- La forme des équations de mouvement linéarisées sont celle d'un oscillateur harmonique.
- Il convient naturellement d'étudier les modes de cet oscillateur par l'étude des valeurs propres et des vecteurs propres des matrices suivantes :

$$\begin{pmatrix} m^{-1}B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & M^{-1}B_{22} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} m^{-1}C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & M^{-1}C_{22} \end{pmatrix}$$

- La solution de ce système s'écrit comme une combinaison linéaire des \mathcal{N} modes ajoutée à une solution particulière liée ici à une stimulation harmonique de fréquence ω :

$$\begin{cases} d(t) = V^A e^{-i\omega t} + \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} c_k V_{\omega_k}^A e^{-i\omega_k t} \\ u(t) = V^C e^{-i\omega t} + \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} c_k V_{\omega_k}^C e^{-i\omega_k t} \end{cases}$$

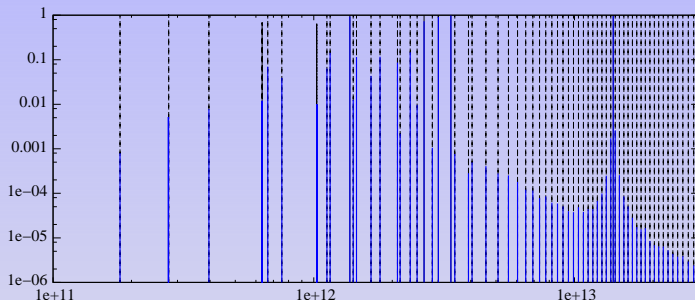
- En l'absence de forces de friction, chaque mode, s'il est stimulé, amène l'oscillateur à la résonance.
- En fait, Dans ce cas précis le modèle sortirait du régime linéaire et invaliderait notre approche : nous ne nous intéresserons qu'aux modes et non à leur réponses face à des stimulations.

- Dans un premier temps, on s'intéresse uniquement aux modes de valeurs absolue les plus importants.
- On les compare au modes de la chaîne atomique et du maillage homogène.

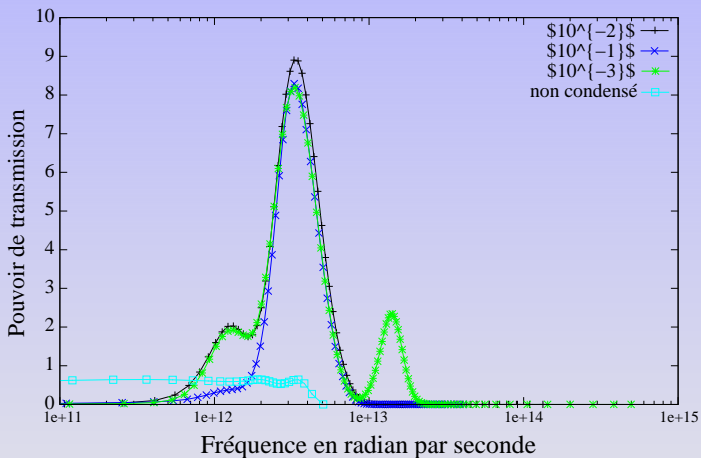
pas FE h	1er Mode propre couplage	Mode propre FE	Mode propre MD
$1r_0$	$2, 14 \cdot 10^{13} (\lambda = 2r_0)$	3,17%	4,06%
$3r_0$	$9, 98 \cdot 10^{12} (\lambda = 6, 72r_0)$	-26,25%	123,55%
$6r_0$	$5, 05 \cdot 10^{12} (\lambda = 13, 7r_0)$	-27,52%	341,77%
$12r_0$	$2, 42 \cdot 10^{12} (\lambda = 28, 8r_0)$	-25,62%	823,20%
$24r_0$	$1, 12 \cdot 10^{12} (\lambda = 62, 2r_0)$	-23,83%	1895,31%

- Les modes correspondent aux « pics » de réflexions mesurés.
- Les modes qui « résonnent » et causent vraisemblablement les réflexions sont proches de la fréquence de résonance du modèle éléments finis.
- D'autres propriétés doivent être étudiées
 - La valeur imaginaire des modes
 - La répartition atome/noeuds des vecteurs propres

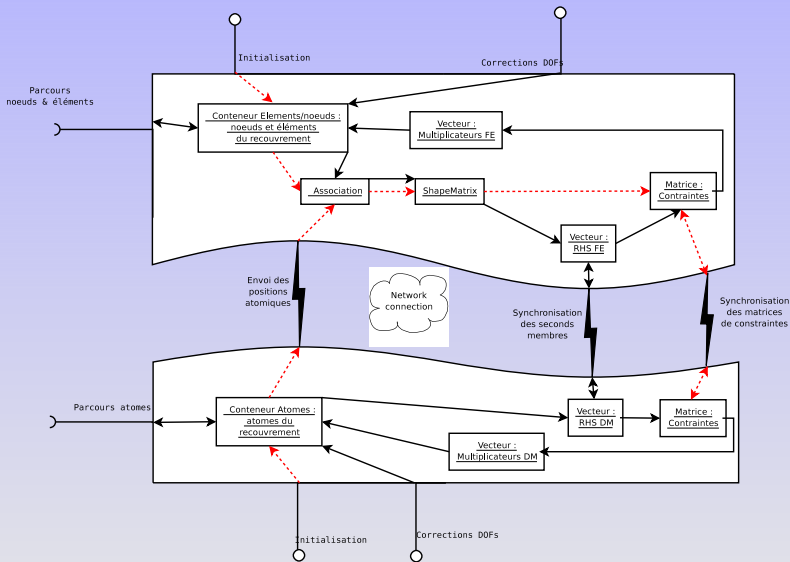
Étude des modes dans le cas condensé ($R = 12h$, $h = 6r_0$)



- Le spectre est « décalé » par la condensation vers les hautes fréquences.
- Le modèle couplé peut désormais admettre des hautes fréquences sans stimuler les modes de résonances du maillage.
- De plus le pouvoir de transmission reste faible pour ces hautes fréquences.



Composants logiciels

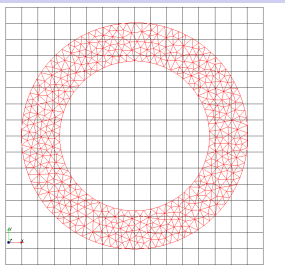
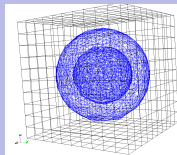


Besoin d'identification des atomes contenus dans un élément donné

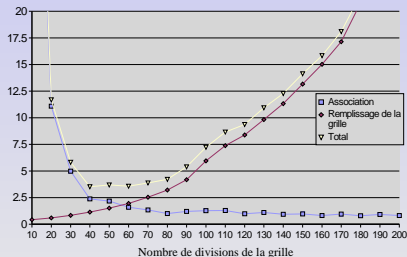
⇒ L'algorithme naïf est constitué d'une double boucle $\mathcal{O}(N_{\text{atomes}} \times N_{\text{elements}})$

Introduction d'une grille

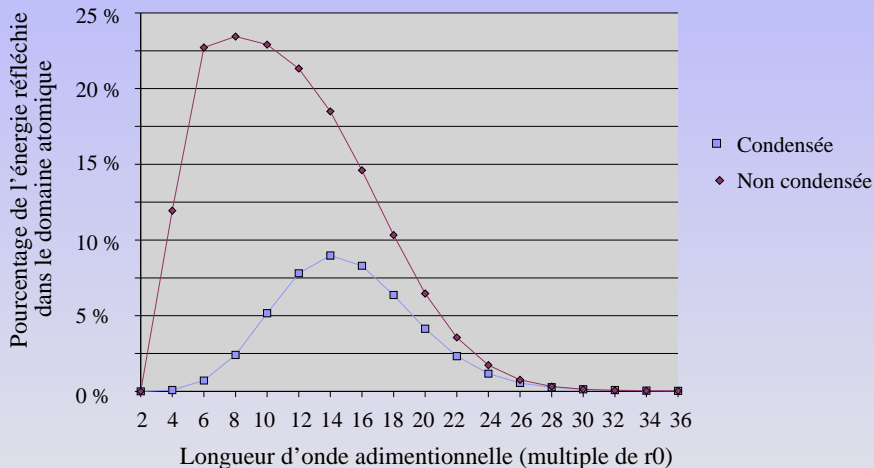
- Place les éléments dans la grille
- L'association nécessite alors une recherche parmi un sous ensemble d'éléments



Temps (secondes) de calcul de l'association

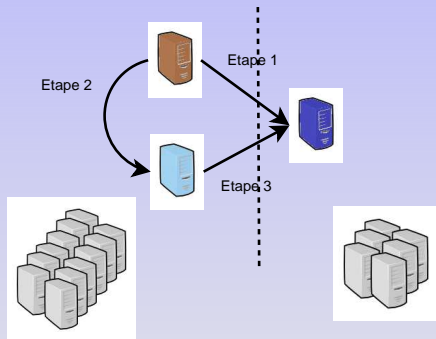


Coefficient de réflexion en fonction de la fréquence injectée



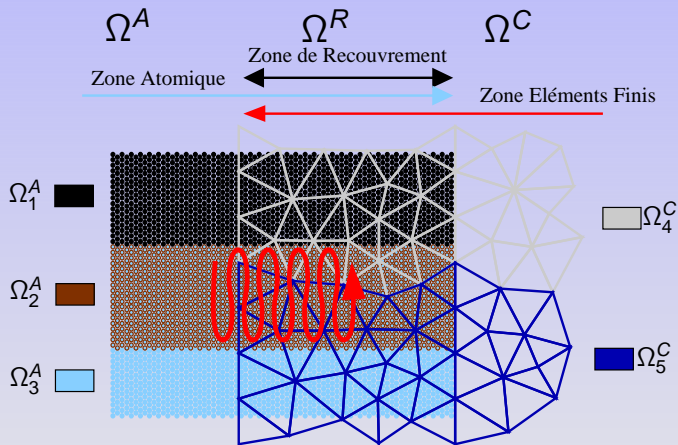
Le schéma de redistribution conserve sa cohérence par un protocole qui met en jeux les processeurs de la zone de couplage.

- Étape 1 : L'ancien propriétaire P_1 prévient son homologue éléments finis Q_1 qu'il vient de migrer un atome le concernant vers P_2 . Q_1 est alors en attente d'une communication de P_2 .
- Étape 2 : L'ancien propriétaire P_1 prévient le nouveau propriétaire P_2 qu'il devra désormais contacter Q_1 pour ajuster les buffers d'échanges et les redistributions.
- Étape 3 : P_2 envoie la nouvelle position dans ses buffers de communication à Q_1 .



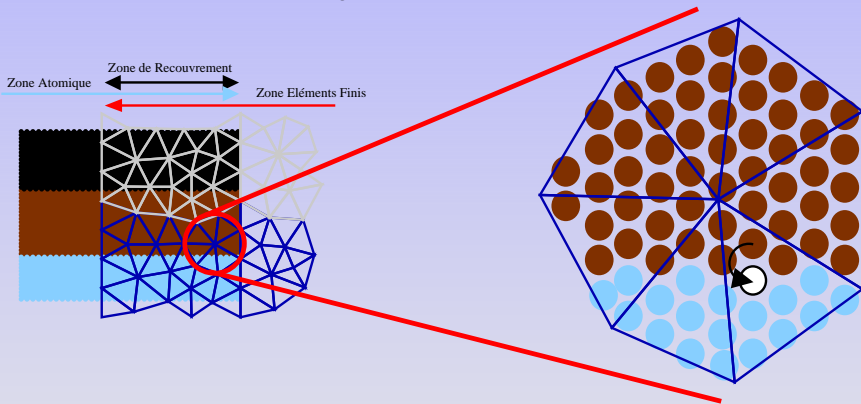
Effet de la dynamique : gestion de la migration des atomes (1)

Lors de l'évolution de la dynamique de la simulation, les codes de dynamique moléculaire sont amenés à « migrer » certains atomes vers d'autres processeurs.

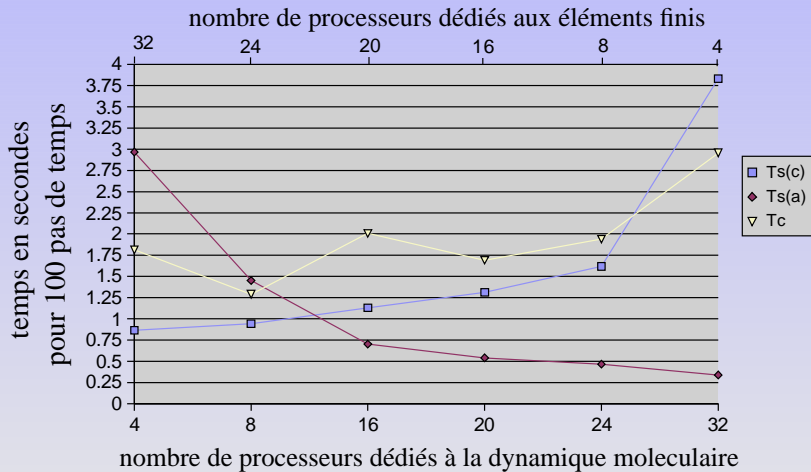


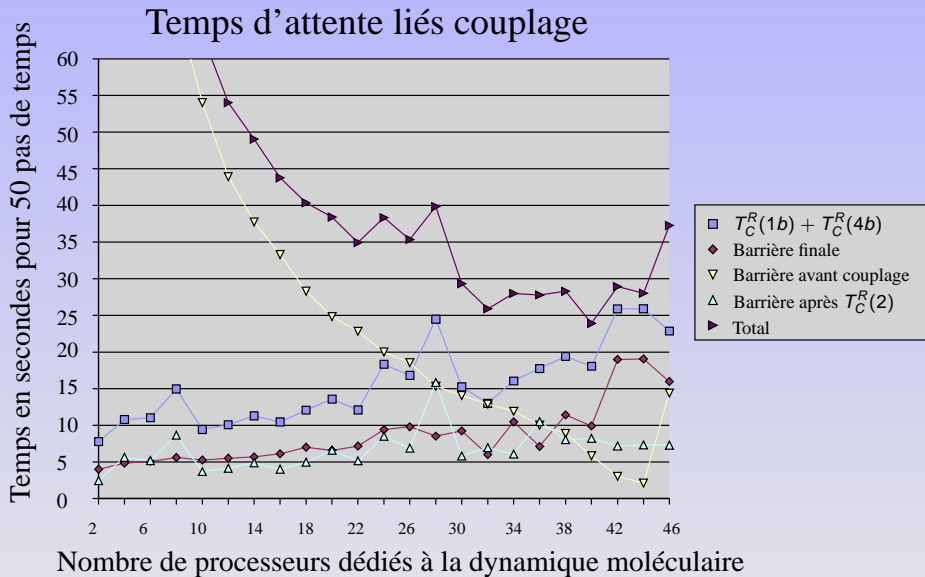
Effet de la dynamique : gestion de la migration des atomes (1)

Lors de l'évolution de la dynamique de la simulation, les codes de dynamique moléculaire sont amenés à « migrer » certains atomes vers d'autres processeurs.

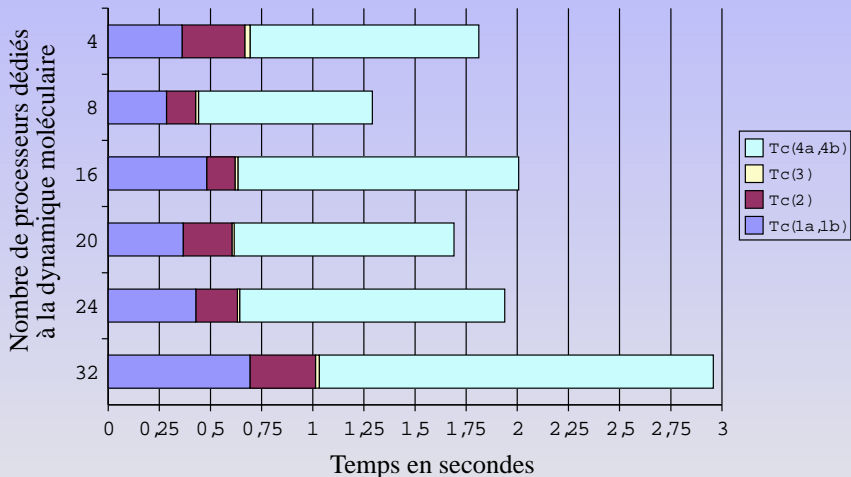


Temps de simulation des différentes tâches sur 36 processeurs





Surcoût de couplage sur 36 processeurs pendant 100 pas de temps



Temps de simulation des différentes tâches sur 48 processeurs

