

Calcul réparti et couplage d'applications multiphysiques

Denis Girou et Gilles Grasseau

► 1 – Introduction

Dans toutes les disciplines, les modèles utilisés se sont complexifiés et enrichis au fil des années, dans le but d'obtenir des simulations toujours plus réalistes. Aujourd'hui, les modèles prennent donc de plus en plus en compte des caractéristiques physiques différentes mais interdépendantes, des exemples classiques en étant les interactions entre l'atmosphère et les océans pour la climatologie ou entre les structures et les fluides pour la mécanique des fluides.

Bien sûr que l'on peut réaliser de tels développements sans recourir à des technologies nouvelles : on peut en effet se contenter de fusionner dans un seul code toutes les caractéristiques nécessaires ou bien employer les techniques à présent bien maîtrisées du calcul parallèle pour gérer les échanges entre les différents codes. Cela entraîne toutefois de fortes limitations, dont les nouvelles technologies liées aux grilles de calcul permettent précisément de s'affranchir. Celles-ci offrent la possibilité de maintenir l'aspect *modulaire* des applications, en continuant à les considérer comme des composants individuels qui peuvent s'exécuter sur des machines d'architectures différentes. De plus, leur développement peut être poursuivi indépendamment, en ne manipulant que des *interfaces* entre composants et en pouvant, sans remise en cause de l'infrastructure, remplacer un composant par un autre ou en ajouter de nouveaux pour enrichir les caractéristiques physiques prises en compte. Le travail essentiel à effectuer portera donc justement sur ces interfaces entre les codes qui, selon les cas, pourront demander l'adaptation des algorithmes, des méthodes numériques et des structures de données (dans le cas notamment des maillages induits).

Du point de vue des technologies disponibles, l'IDRIS a adopté CORBA comme environnement de programmation des applications réparties. CORBA représente aujourd'hui une technologie très mature, étant en effet développé depuis une dizaine d'années pour permettre le déploiement d'applications réparties et gérer de façon totalement transparente pour les programmeurs d'applications tous les problèmes d'*hétérogénéité* (d'architectures, de systèmes d'exploitation, de langages de programmation, de protocoles de communication, etc.).

Nous avons donc souhaité renouveler avec nos utilisateurs, dans le domaine du calcul réparti, l'expérience très positive que nous avons menée dans les années 1994-1995 sur des projets pilotes visant à paralléliser des applications jusqu'alors séquentielles. Dans le cas présent, nous avons en conséquence commencé là-aussi par une phase de prospection, qui nous a permis de déterminer plusieurs projets novateurs dans des disciplines très variées. Nous détaillons dans les paragraphes qui suivent les quatre projets déjà traités ou en cours de réalisation.

► 2 – Mécanique des fluides et aéroélasticité

Il s'agit d'une application dite de couplage fluide-structure, développée au *Laboratoire de mécanique des fluides numérique* du CORIA de Rouen par Anne-Sophie MOURONVAL, Abdellah HADJADJ et Dany VANDROMME.

Cette application traite la réponse d'une paroi, dont une partie est flexible, placée dans un écoulement supersonique ayant un nombre de Mach à l'infini fixé. D'un point de vue numérique, ce cas test constitue une validation de la partie couplage des codes fluide et structure ; il permet en effet d'estimer l'amortissement numérique introduit lors du couplage ainsi que le calage en temps des deux codes. La position de la structure est initialement perturbée et la réponse du fluide est alors calculée. La pression exercée par le fluide en écoulement change la position de la paroi. Le maillage du fluide est alors modifié en conséquence au niveau de la partie flexible de la paroi et la pression exercée par le fluide sur la structure est recalculée. Ce processus est itéré, ce qui peut conduire ou non à un comportement instable de la structure (phénomène de *flutter*). Ainsi, en répétant cette simulation pour différentes valeurs du nombre de Mach à l'infini, il est possible de déterminer un nombre de Mach critique du fluide au-delà duquel la structure adopte un comportement instable. Le cas traité est à deux dimensions, mais est évidemment directement généralisable en trois dimensions, lorsque la structure étudiée est une plaque (ou coque) au lieu d'être une poutre.

Ce projet, achevé à la fin de l'année dernière, a demandé de découpler les deux codes auparavant fusionnés, de gérer les échanges entre eux après réécriture de l'interface et définition des services adéquats et, afin de pouvoir valider les développements et suivre le déroulement des simulations, d'ajouter un serveur de visualisation. De plus, cette application a pu être, dès la fin de l'année 2001, intégrée, validée et démontrée sur la grille européenne HPC-GRID accessible dans le cadre du projet EUROGRID.

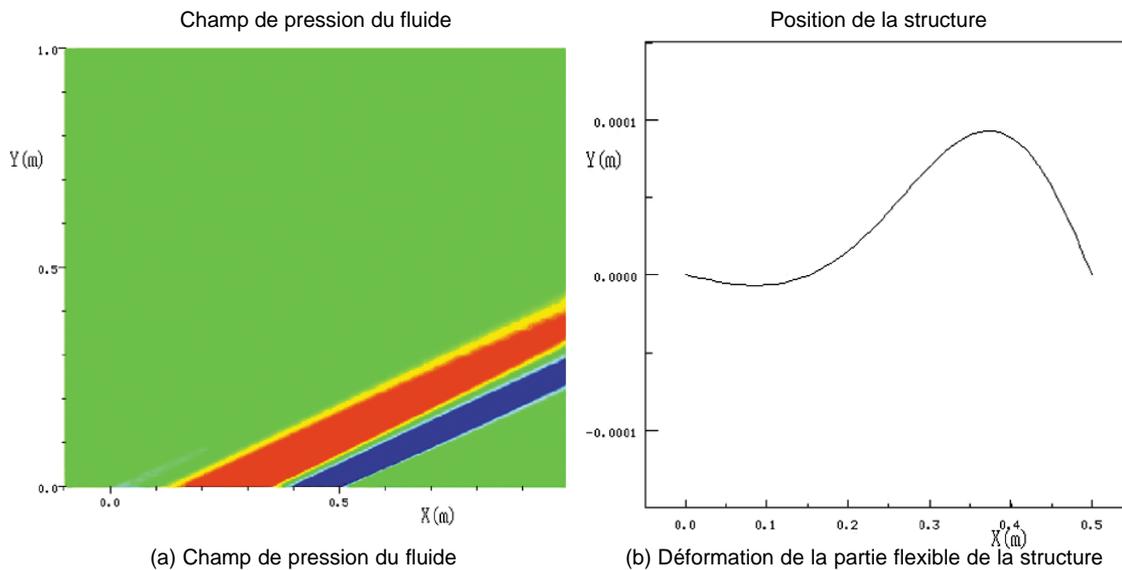


Fig. 1 - Couplage fluide-structure

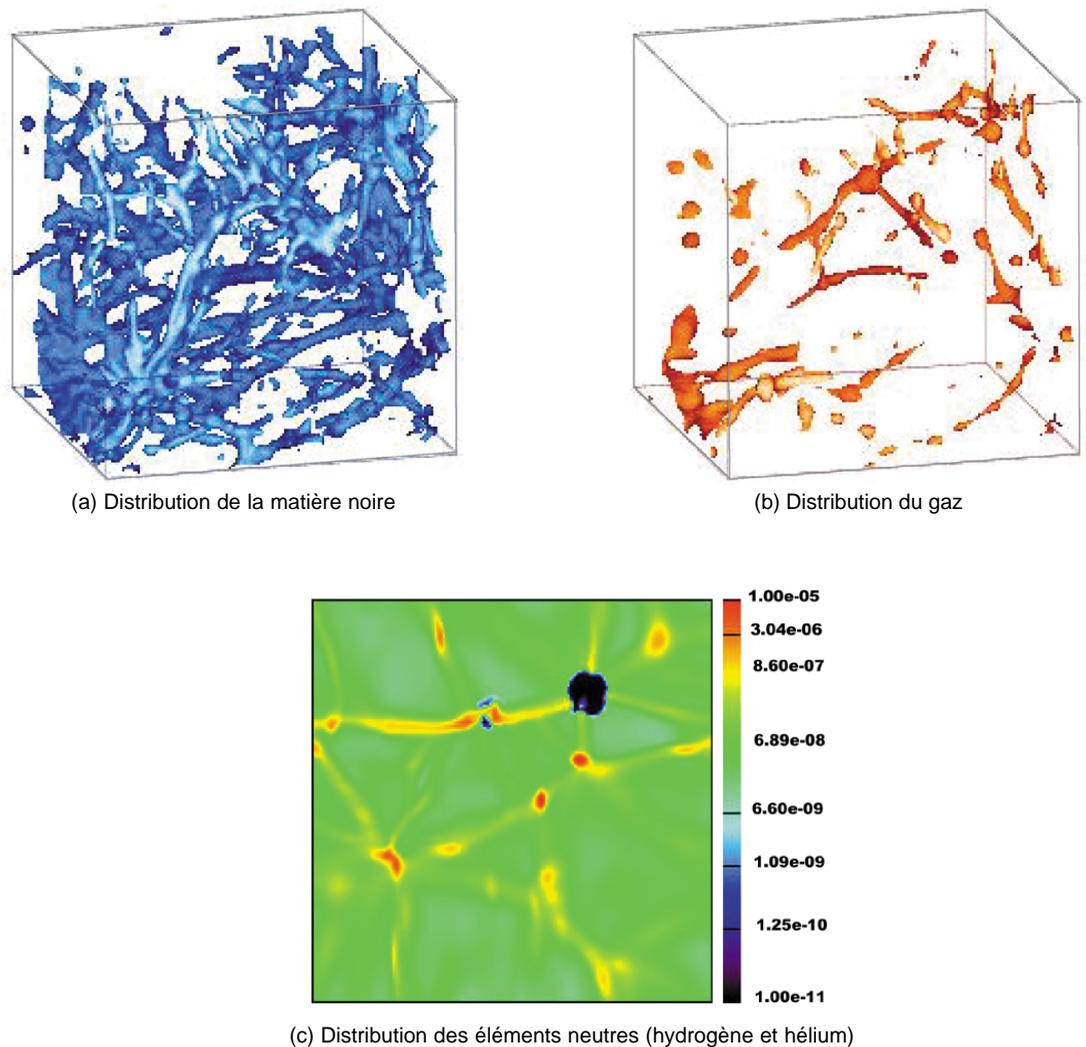
► 3 – Astrophysique

Il s'agit d'une application de cosmologie, développée au *Laboratoire de l'univers et de ses théories* de Meudon par Jean-Michel ALIMI, pour l'étude de la formation des grandes structures de l'univers et des galaxies. Sont ainsi traitées la dynamique gravitationnelle non collisionnelle de la matière noire, la dynamique dissipative du gaz baryonique (résultant notamment des chocs hydrodynamiques) et les processus microscopiques de refroidissement du plasma primordial incluant la chimie hors équilibre entre les espèces les plus répandues. Trois types de physiques sont donc simultanément prises en compte, à l'aide de trois modules distincts.

Plus précisément :

- le premier module traite du problème à N corps gravitationnel non collisionnel, qui régit l'évolution de la matière noire. Celui-ci est résolu à l'aide de la méthode dite particule-grille ;
- le deuxième module traite des chocs hydrodynamiques et de l'évolution adiabatique du gaz baryonique. L'évolution des quantités hydrodynamiques est obtenue à chaque pas de temps après déformation lagrangienne de la grille puis advection sur la grille eulérienne ;
- le troisième module traite des processus microscopiques de refroidissement de la chimie primordiale, l'évolution de six espèces chimiques étant actuellement considérée. Cette évolution est calculée de façon implicite à l'intérieur de chaque pas de temps hydrodynamique.

Fig. 2 –
Couplage en cosmologie



Dans ses objectifs premiers, ce projet a été achevé au début de cette année. À partir de la version initiale (développée pour la partie hydrodynamique en collaboration avec J.-P. CHIEZE, R. TEYSSIER et S. COURTY) intégrant les trois modèles physiques, trois modules

exécutables ont été aisément construits sans avoir à modifier la structure de l'application. CORBA a permis d'interconnecter ces trois codes en apportant les mécanismes nécessaires aux appels des fonctions distantes implémentées dans l'un des autres modules. Par ailleurs, bien que les quantités de données transférées ne soient pas négligeables, les performances se sont avérées optimisées tant que les différents modules sont traités sur des plates-formes adaptées à leurs caractéristiques.

Tel que nous l'avons dit généralement en introduction, l'approche modulaire employée permet notamment d'envisager de coupler un quatrième module permettant de tenir compte de la présence d'un champ magnétique et de vérifier l'intérêt d'un autre code à résolution adaptative construit à partir de la méthode AP3M pour résoudre le problème à N corps.

Cette application a également été intégrée et validée sur la grille européenne dans le cadre du projet EUROGRID.

► 4 – Combustion turbulente

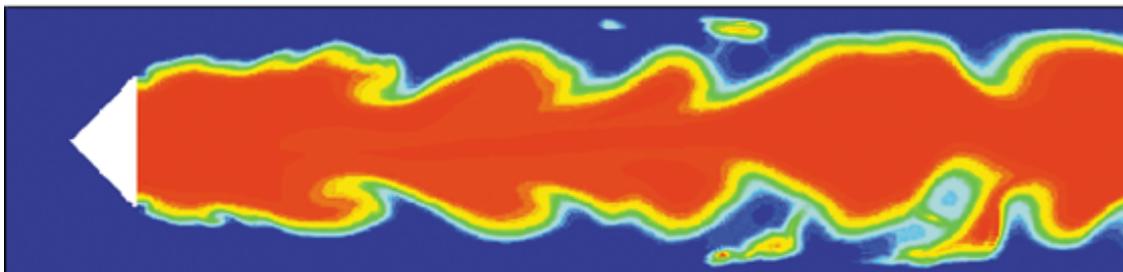
L'objectif de ce projet émanant du *Laboratoire d'énergétique moléculaire et macroscopique* de Chatenay Malabry, placé sous la responsabilité de Denis VEYNANTE et impliquant Sébastien DUCRUIX, Olivier GICQUEL, Estelle IACONA et Mickael LECANU, est de prédire la formation des espèces polluantes dans des brûleurs industriels (fours, moteurs aéronautiques, moteurs automobiles, etc.). En effet, les normes de plus en plus sévères obligent les constructeurs à réduire ces émissions polluantes et la simulation numérique permet d'espérer un gain de coût et de temps sur le développement des brûleurs.

Ce projet avait été conçu en deux phases distinctes et complémentaires. Dans un premier temps, il s'agissait de réaliser un couplage entre la combustion et l'émission de polluants qu'elle entraîne. Dans ce cadre, un code calcule l'écoulement et l'essentiel de la combustion tandis qu'un autre détermine la formation des espèces polluantes, qui sont des espèces très minoritaires, mais toxiques en faible proportion, et dont la formation est beaucoup plus lente. Il n'y a d'échanges que du premier code vers le second, et les échelles de temps physiques des deux problèmes sont nettement différentes (de l'ordre de 10^{-4} seconde pour la combustion et de l'ordre de la seconde pour les polluants). Pour les deux parties, on utilise deux occurrences du même code AVBP (développé conjointement par l'université d'Oxford et le CERFACS) de volumes finis sur maillages hybrides non structurés, employé dans des modalités différentes. La première occurrence calcule les champs instantanés de vitesse, de fractions massiques des espèces principales et de température. À partir de ces informations, la seconde occurrence, simplifiée, calcule les champs de fractions massiques des espèces polluantes. Celles-ci sont minoritaires (quelques parties par million) et n'affectent pas le bilan global des espèces principales, ce qui fait qu'il n'y a pas de rétroaction sur le premier code.

Dans un second temps, il s'agissait de prédire le rayonnement thermique émis par une flamme turbulente. Ce rayonnement contrôle en effet une partie des transferts thermiques, conditionne souvent la tenue des matériaux et apparaît prédominant dans les fours industriels. Ces deux phénomènes de combustion et de rayonnement ne se traitent absolument pas de la même manière, et ont des échelles de temps largement différentes. Outre la combustion, on calcule le rayonnement sur la paroi, mais celui-ci modifie le champ de température et par conséquent influence l'écoulement. Il y a donc rétroaction du rayonnement sur la combustion, ce qui implique des échanges réciproques entre les deux codes. Pour ce faire, a été adjoint à AVBP un code de rayonnement développé par l'EM2C, avec notamment la nécessité de réaliser une interpolation des données lors des échanges, puisque les codes utilisent des maillages différents.

La première phase de ce projet, relativement simple, a été réalisée et validée ce printemps, avec estimation de la fréquence pertinente des échanges à assurer, puisque les échelles d'évolution des phénomènes sont dissemblables. La seconde est en cours de développement, ce projet devant ouvrir des perspectives nouvelles et stimulantes, puisque ce type de simulations couplées n'est pas encore pratiqué alors que son intérêt est clairement établi.

Fig. 3 – Couplage en combustion : calcul numérique de flamme prémélangée turbulente stabilisée derrière un dièdre, réalisé avec le code AVBP



► 5 – Sciences de l'environnement

Ce projet ambitieux, prévu sur deux années, résulte d'une collaboration avec le *Laboratoire des transferts en hydrologie et environnement* de Grenoble et le *Laboratoire Hydrosociétés* de l'*Institut de recherche pour le développement* de Montpellier, et regroupe, sous la coordination de Christophe Messenger (LTHE), Olivier BRASSEUR, Isabelle BRAUD et Hubert GALLÉE pour le LTHE ainsi que Bernard CAPPELAERE, Christophe PEUGEOT et Luc SÉGUI pour Hydrosociétés.

L'objectif principal est d'évaluer l'importance du couplage entre les cycles hydrologiques et atmosphériques et de mettre en évidence les rétroactions que peuvent engendrer chacun des systèmes sur l'autre et leurs répercussions sur le climat. La région d'étude choisie est l'Afrique de l'ouest, dont le climat est marqué par une forte rétroaction entre la végétation et le régime pluviométrique et cela sur une large gamme d'échelles de temps (intra-saisonnières à décennale). Le rôle climatique supposé des processus hydrologiques continentaux dans ces régions est de conditionner l'accès de la végétation au réservoir d'eau dans les sols, et de ce fait le développement et la persistance de l'activité végétative, en particulier durant les périodes sèches. Il en résulte alors un impact sur les échanges d'énergie surface-atmosphère via le pouvoir réflecteur du système sol-végétation, le transfert radiatif à travers la végétation et la transpiration de cette dernière. De plus, la végétation est une composante importante de la source continentale d'humidité atmosphérique.

Du point de vue informatique, vu que l'on doit prendre en compte plusieurs centaines de bassins hydrologiques, le code ABC correspondant ne peut plus être considéré comme un code séquentiel traitant à chaque appel un seul bassin et doit être transformé en un code parallèle pouvant gérer un grand nombre de bassins.

Ce projet, accepté en 2001 dans le cadre de l'*Action concertée incitative GRID (Globalisation des ressources informatiques et des données)*, doit donc durer jusqu'à la fin de l'année 2003. Cette année, le code météorologique a été optimisé sur la machine vectorielle NEC SX-5, le code hydrologique a été validé sur la machine scalaire IBM SP4 et est en train d'être parallélisé, l'interface physique et informatique entre les codes a été définie, la partie technique du couplage est en cours de réalisation et des exécutions des codes en mode dit forcé sont actuellement réalisées (modélisation météorologique sur la zone géographique considérée, sur une période de dix ans).

L'an prochain, sont prévus divers ajouts de caractéristiques physiques (agrégation des flux hydrologiques montants, désagrégation des pluies, spatialisation des pluies pour les problèmes de remaillage entre les codes atmosphérique et hydrologique) ainsi que des simulations opérationnelles et leur exploitation.

(a) Cycle saisonnier de la mousson pour l'année 1983
(moyenne entre 18°O et 9°E)

(b) Précipitations cumulées de mars à octobre pour l'année 1983

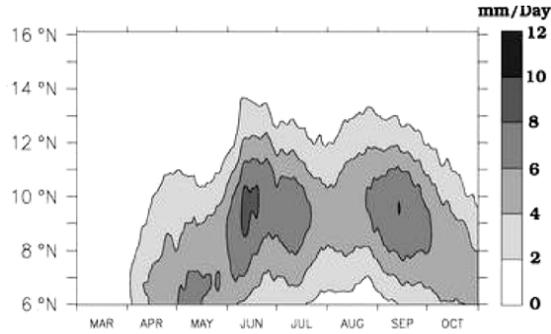
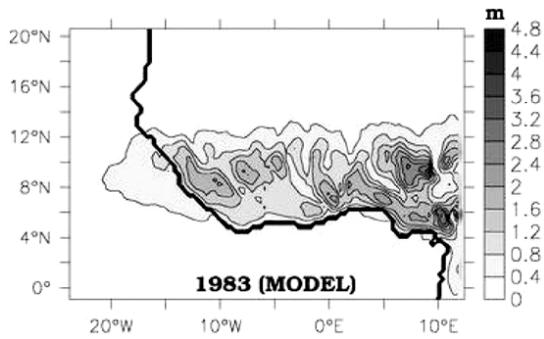


Fig. 4 – Couplage
atmosphère-hydrologie