

Club des Utilisateurs du code Z-set

12 janvier 2016
ONERA, Châtillon

- 9h30 Accueil autour d'un café
- 10h00 Parallélisme SMP dans Z-Set : état des lieux et perspectives, *A. Parret-Fréaud.*
- 10h45 Une bibliothèque de méthodes de résolution par sous-domaines: DDSolv, *F.X. Roux et J.D. Garaud.*
- 11h30 Nouveaux algorithmes de décomposition de domaine, *C. Bovet.*
- 12h15 *Pause déjeuner*
- 13h30 Parallélisation en temps du schéma de Newmark pour la dynamique transitoire, *J. Rannou et J. Ryan.*
- 14h15 Impact of microstructure evolutions on the stress/strain distribution at grain boundaries in Ni-based superalloys, *C. Gérard.*
- 15h00 Réduction de modèle appliquée à la calibration de modèle en plasticité hétérogène et au calcul de durée de vie, *D. Ryckelynck.*
- 16h00 Tensor decomposition methods applied to nonlinear constitutive material laws, *C. Olivier.*
- 16h45 Discussions autour d'un café



RÉSUMÉS

Parallélisme SMP dans Z-Set : état des lieux et perspectives

Augustin Parret-Fréaud
SAFRAN Tech

Avec le plafonnement de la fréquence des processeurs, l'augmentation de la puissance des infrastructures de calcul fait désormais appel au développement d'architectures matérielles de plus en plus complexes. Les ordinateurs actuels embarquent généralement plusieurs processeurs identiques (multiprocesseurs symétriques), eux-mêmes composés de plusieurs cœurs de calcul, accédant à la mémoire centrale du système à travers une hiérarchie de caches intermédiaires de taille et bande passante différents. Les approches de parallélisme à mémoire partagée, qui ont recours à l'utilisation de processus légers (threads), constituent la première réponse à l'exploitation de l'ensemble des cœurs de calculs d'une machine.

Au sein du code Z-Set, ce type de parallélisme est accessible, sans complexification de la mise en donnée, durant les phases d'intégration des lois de comportement ainsi que durant la résolution des systèmes linéaires globaux. En permettant une accélération significative des calculs pour un nombre de cœurs limités, ces approches constituent donc une réponse intéressante pour des calculs de taille modeste réalisés sur une seule machine, et constituent également une brique essentielle dans l'élaboration de solveurs hybrides associés à des approches par décomposition de domaine. On présentera notamment un état des lieux des performances des différents solveurs interfacés avec Z-Set.




Une bibliothèque de méthodes de résolution par sous-domaines: DDSolv

François-Xavier Roux et Jean-Didier Garaud
ONERA – The French Aerospace Lab

La bibliothèque DDSolv a pour objectif de fournir des solveurs parallèles utilisant des méthodes de résolution par sous-domaines adaptées à la résolution de problèmes d'éléments finis.

L'exposé commencera par rappeler les principes des principales familles de méthodes de résolution par sous-domaines sans recouvrement, puis présentera les différentes interfaces de la bibliothèque DDSolv qui a vocation à prendre en charge tout ce qui concerne la formation et la résolution des systèmes linéaires issus de modèles d'éléments finis.

On présentera ensuite comment ce solveur est interfacé avec Z-set, et quelques applications numériques, notamment sur des matériaux fortement hétérogènes.




Nouveaux algorithmes de décomposition de domaine

Christophe Bovet¹, Augustin Parret-Fréaud² et Pierre Gosselet¹

(1) LMT, ENS Cachan, CNRS, Université Paris-Saclay

(2) SAFRAN Tech

Les méthodes de décomposition de domaine classiques (FETI & BDD) sont souvent mises en défaut lorsque les problèmes à résoudre s'éloignent de cas académiques (décomposition automatique, fortes hétérogénéités, quasi-incompressibilité, comportement matériau complexe, etc.). Ce constat motive le développement de méthodes de décomposition de domaine plus robustes visant à résoudre des problèmes de complexité industrielle, sur des centres de calcul de taille moyenne (de l'ordre de quelques milliers de cœurs). La première partie de l'exposé présentera deux nouveaux solveurs par décomposition de domaine, SFETI et ASFETI, apparentés à des algorithmes de FETI multipréconditionnés, qui sont actuellement en cours de développement dans Z-set. On évaluera leurs performances sur des problèmes académiques, linéaires ou non, et détaillera l'utilisation pratique de ces solveurs (mise en données, options, etc.). Les versions non symétriques de ces solveurs seront également introduites.



Parallélisation en temps du schéma de Newmark pour la dynamique transitoire

Johann Rannou et Juliette Ryan
ONERA – The French Aerospace Lab

L'accroissement des puissances de calcul ne se fait plus actuellement par l'augmentation des fréquences des CPU comme c'était le cas jusqu'au milieu des années 2000, mais par l'augmentation du nombre des cœurs de calcul. Il est donc indispensable de pouvoir exploiter au mieux ces architectures multicœur en disposant d'algorithmes de calcul parallèle efficaces.

Dans les codes par éléments finis pour la mécanique des structures, deux voies de parallélisation sont généralement exploitées :

- le multithreading qui permet par exemple, sur un nœud de calcul, de paralléliser l'intégration aux points de Gauss ou d'accélérer la résolution du système linéaire,
- la décomposition de domaines qui permet d'exploiter plusieurs nœuds de calcul en décomposant spatialement le problème.

L'efficacité de ces techniques présente généralement une saturation due à la nature physique du problème, aux algorithmes utilisés ou encore aux débits et latences limités des réseaux.

Afin d'augmenter l'efficacité globale d'un calcul parallèle, on peut imaginer d'utiliser d'autres "directions" de parallélisation. Pour les problèmes de dynamique transitoire, le temps en est une. On trouve dans la littérature des algorithmes tels que le "para-réel" introduit dans [1] qui exploitent cette notion. L'approche présentée ici est différente de "para-réel", elle a été exposée initialement dans [2] et utilise la décomposition tensorielle des schémas d'intégration en temps.


Nous appliquons ici cette méthode à un intégrateur de Newmark classiquement utilisé en dynamique des structures. L'approche consiste à écrire ce schéma sous la forme d'un opérateur matriciel qui peut être diagonalisé sous certaines conditions. On peut alors calculer plusieurs pas de temps dans une base propre de manière parallèle.

On présentera le principe de l'approche puis on insistera sur sa mise en œuvre dans Zébulon via son interface python. On illustrera ensuite quelques résultats.

*

References

- [1] J.-L. Lions, Y. Maday, G. Turinici: A "parareal" in time discretization of PDE's. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences Series I Mathematics*, 332 (2001), 661–668
- [2] Y. Maday, E.M. Rønquist: Parallelization in time through tensor-product space-time solvers. *Comptes Rendus Mathématique*, 346 (2008), 113–118



Impact of microstructure evolutions on the stress/strain distribution at grain boundaries in Ni-based superalloys

Céline Gérard¹, Jonathan Cormier¹, Djamel Missoum-Benziane², Nikolay Osipov²


(1) Institut Pprime, CNRS UPR 3346 – ISAE-ENSMA – Poitiers University,

Department of Physics and Mechanics of Materials

(2) Centre des Matériaux - Mines ParisTech, CNRS UMR 7633

Cast Ni-based superalloys are widely used for the design of turbine blades and vanes in the hottest parts of aeroengines. These alloys are submitted to complex thermomechanical loadings inducing microstructure evolutions such as the coarsening or the dissolution/precipitation of precipitates. Such microstructure evolutions are likely to affect the local stress/strain distribution at grain boundaries of polycrystalline cast alloys that can only be modelled using a microstructure sensitive approach.

In the presentation, a special focus will be paid to the impact of the dissolution/precipitation process of γ' precipitates on the grain boundaries stress localization. For this, polycrystalline finite element simulations have been performed using the microstructure-sensitive Polystar model and compared to a classical crystal plasticity approach. The necessity of introducing additional internal variables in constitutive equations will be discussed based on non-isothermal simulations using the two approaches and a representative crystalline configurations.



Réduction de modèle appliquée à la calibration de modèle en plasticité hétérogène et au calcul de durée de vie

David Ryckelynck

Centre des Matériaux - Mines ParisTech, CNRS UMR 7633

La calibration de modèle a pour objectif de réaliser des essais et d'ajuster des paramètres d'un modèle pour reproduire des résultats expérimentaux par la simulation numérique. En plasticité hétérogène, les simulations sont réalisées par la méthode des éléments finis. Or, plus les essais à modéliser font intervenir des champs de déformation plastique complexes et localisés, plus leur simulation est longue. Ceci pénalise le développement d'essais dont on aimerait accroître la complexité.

On constate qu'un grand volume de données numériques est sous-exploité dans les protocoles de calibration classiques. Nous montrons que l'analyse de ces données, complétée de quelques simulations complémentaires, permet de construire des modèles d'ordre réduit. En générant ces modèles réduits lors des étapes de conception des dispositifs expérimentaux ainsi que pendant la réalisation des essais

mécaniques, nous disposons de modèles simplifiés au moment de l'optimisation des paramètres. Lorsque les résultats expérimentaux deviennent disponibles, un premier calibrage des paramètres peut rapidement être obtenu à l'aide de modèles d'ordre réduit. On réduit ainsi énormément, d'un facteur entre 100 et 1000, le temps nécessaire à l'exploitation des résultats expérimentaux.

Nous montrerons comment mettre en place ce type de protocole de calibration dans le cas d'essais de fatigue oligocycliques réalisés au Centre des Matériaux par M. Leroy et A. Köster, sur une aube de turbine entaillée.

Mots clés : décomposition orthogonal aux valeurs propres, gappy-POD, interpolation empirique, décomposition tensorielle, séparation de variables.



Tensor decomposition methods applied to nonlinear constitutive material laws

Clément Olivier¹, David Ryckelynck¹, Christian Rey²
(1) Centre des Matériaux - Mines ParisTech, CNRS UMR 7633
(2) SAFRAN Tech

Helicopter engines must be designed so that they can operate outside their normal regime for a short period of time in case of emergency. During these occurrences, the high pressure turbine blades must withstand extreme thermomechanical loads. Simulations that accurately predict both mechanical behavior and damage of the nickel-based single-crystal superalloys composing those parts require advanced constitutive material laws. The POLYSTAR model [1] has been developed for this very purpose. However, it involves a system of nonlinear coupled differential equations parametrized by about twenty material coefficients.

An appropriate calibration of these coefficients is paramount to ensure that the numerical model matches the actual physical behavior. The estimation process consists in searching for a set of values such that the corresponding numerical results correlate as closely as possible with the available experimental data. Since the procedure is hard to formalize as a well-posed optimization problem, experts in material science must typically be involved.

Unless the computational effort required for a single numerical simulation is strictly negligible, exploring the high-dimensional parameter domain in an exhaustive manner is an unreasonable endeavor. Indeed, the number of simulations to perform grows exponentially with the number of parameters to adjust. The present work aims at developing a new methodology to assist experts with the calibration of models such as POLYSTAR.

The central idea is to build a surrogate model by applying tensor decomposition techniques [2]. The preliminary (offline) training phase aims at building an approximation of the physics-based model with a given level of accuracy while keeping the computational effort reasonable. It consists in iteratively selecting relevant sets of parameter values, performing the corresponding simulations for the model under study, and aggregating the obtained results in a tensor representation kept in factored form.

Once constructed, the surrogate model may be evaluated (online) extremely cheaply since the computation of the output of interest entails only a series of low-dimensional matrix products (see figure for details). Interactive visualization tools incorporating that technology are able to update the response of the physical model in real-time as the parameters are varied over the whole domain of interest.

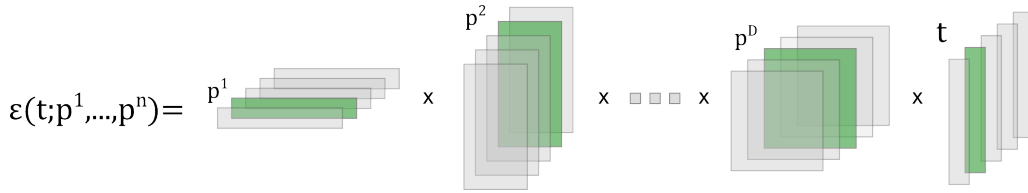


Figure 1: The figure illustrates the computations required for the evaluation of the surrogate model. The epsilon function denotes an output of interest (here, the principal component of the strain tensor) that depends on the parameters (p_1, \dots, p_n) and time (t). For every parameter (as well as time), each point in the discretization of the domain of definition is associated with a single tensor slice, to be further interpreted as a matrix. Evaluation of the surrogate model for the given set of parameter values consists in computing the product of the matrices highlighted in green.

*

References

- [1] J. Ghighi, J. Cormier, E. Ostoja-Kuczynski, J. Mendez, G. Cailletaud, and F. Azzouz. A microstructure sensitive approach for the prediction of the creep behaviour and life under complex loading paths. *Technische Mechanik*, 32(2-5) :205–220, 2012.
- [2] I. Oseledets and E. Tyrtshnikov. TT-cross approximation for multidimensional arrays. *Linear Algebra and its Applications*, 432(1) :70–88, 2010.

Les sessions se déroulent à l’Onera Châtillon
 Salle Contensou
 29 avenue de la Division Leclerc
 92320 Châtillon.

Moyens d’accès sur le site <http://www.onera.fr/fr/nos-centres/chatillon>