

Postdoc

Génération de grands maillages pour le HPC

Introduction

De nombreuses applications de calcul scientifique s'exécutent quotidiennement sur des configurations comprenant 10 000 cœurs ou plus sur les supercalculateurs du CEA. Dans la chaîne de calcul, la génération d'un maillage ou son adaptation en cours de calcul constituent des points critiques. Nous visons à établir une stratégie efficace de génération en calcul parallèle de maillages destinés à être employés par un solveur éléments finis. Typiquement, ces « grands » maillages compteront plus d'un milliard d'éléments, afin de tirer parti des machines actuelles et exaflopiques à venir.

Contexte applicatif

Pour les études dans le domaine de la furtivité (CEA/DAM <http://www-dam.cea.fr/dam>), on utilise des codes de calcul 3D afin de résoudre les équations de Maxwell en régime harmonique. Les objets traités sont constitués de plusieurs couches de matériaux, lesquelles sont de faibles épaisseurs au regard de la longueur totale de l'objet. Ces codes ont besoin en données d'entrée de maillages qui représentent la géométrie de manière extrêmement précise. Ainsi, il est nécessaire de générer des maillages tétraédriques de plusieurs centaines de millions d'éléments. Or, les outils de maillage propriétaires ne sont pas conçus pour réaliser des maillages aussi volumineux. C'est pourquoi il est indispensable de concevoir de nouvelles approches qui devront tirer parti de supercalculateurs modernes tels que la machine TERA. Celles-ci devront relever de nombreux défis : la parallélisation des algorithmes de maillage, la réalisation de maillage en batch, la vérification et de visualisation de grands volumes de données.

D'autre part, les études de modélisation thermomécanique du combustible nucléaire (CEA/DES) mettent en exergue l'importance du caractère multi-échelle. De ce fait, les simulations numériques requièrent d'étudier le comportement effectif du combustible dans un volume suffisamment grand par rapport à la taille caractéristique de la microstructure : le Volume Élémentaire Représentatif (VER). Un premier objectif sera de mailler un VER intégrant des microstructures 3D fidèles du point de vue des mesures statistiques. Un second objectif sera de réaliser des calculs sur une géométrie suffisamment fine et précise, ce qui sollicite aussi fortement le mailleur. La gestion efficace des conditions aux limites de type périodique est une particularité importante du VER à prendre en compte.

Descriptif résumé du poste

Le travail proposé a pour objet les méthodes de génération de maillages de très grandes tailles nécessaires à la modélisation 3D des matériaux de furtivité et des combustibles nucléaires. Plusieurs mailleurs seront évalués (Gmsh, Mmg ...) sur des géométries différentes chez les deux partenaires. On analysera plusieurs critères : l'adéquation aux besoins, les caractéristiques et la qualité du maillage produit, les temps de traitement du maillage et de restitution du code parallèle, et le nombre maximum de sommets/arêtes. Il faudra également mettre en œuvre ces mailleurs au sein de codes éléments finis (EF) et évaluer les performances sur une machine parallèle.

Un autre axe de développement concerne un couplage entre maillage et résolution afin de gagner en performance. Ainsi, l'idée est de construire le maillage, non en pré-traitement, mais dans la phase d'initialisation du code EF, ce qui permettrait d'éviter des phases pénalisantes d'écriture (par le mailleur) puis de lecture sur disque (par le code EF).

Des collaborations seront engagées durant la durée du postdoc avec les développeurs des codes MAGIX3D (CEA), Gmsh (code opensource), Mmg (code opensource).

Ce sujet de recherche post-doctoral est à la pointe de la recherche sur la génération de maillages de grandes tailles, avec une composante forte autour du calcul haute performance. Les travaux réalisés seront publiés dans la littérature ouverte et pourront servir à bien d'autres domaines d'application que celui du nucléaire. Des études sur des benchmarks académiques sont envisagées en amont des applications cibles pour éviter les problèmes de confidentialité.

Références :

F. Vivodtzev, T. Hocquellet et M. Lecouvez, «Framework for automatic meshing applied to 2D and 3D Electromagnetic simulations,» 14th World Congress in Computational Mechanics (WCCM), ECCOMAS 2020, Paris. <https://www.wccm-eccomas2020.org/frontal/docs/WCCM-XIV-ECCOMAS-2020.pdf> , page 835.

I. Ramière, R. Masson, B. Michel and S. Bernaud. Un schéma de calcul multi-échelles de type Éléments Finis au carré pour la simulation de combustibles nucléaires hétérogènes, 13ème Colloque National en Calcul des Structures, papier 126623, CSMA 2017.

L. Portelette, J. Amodeo, B. Michel, R. Madec. Athermal dislocation strengthening in UO₂. Journal of Nuclear Materials, 2020. 538. 152157. 10.1016/j.jnucmat.2020.152157.

F. Rozar, G. Latu, J. Roman, V. Grandgirard. Toward memory scalability of GYSELA code for extreme scale computers. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, Wiley, 2014, Special issue for PPAM2013 Conference, 27 (4), pp.994-1009.

Compétences techniques :

- Doctorat, de préférence en informatique ou mathématiques appliquées.
- Compétences approfondies dans les domaines du calcul scientifique haute performance, de la simulation numérique, du génie logiciel.
- Compétences dans le domaine de la programmation (C/C++, Fortran, Python), des environnements scientifiques (Linux, IDE), des formats de données (HDF5).
- Une expérience d'utilisation de codes de calcul et de mailleurs (Gmsh, Mmg,...).
- Langue anglaise (publication scientifique).

Localisation et contrat

Le postdoctorant sera localisé au CEA/DAM/CESTA (proche de Bordeaux) <http://www-dam.cea.fr/cesta/>. Plus particulièrement, le candidat sera accueilli dans le service de modélisations et mathématiques pour la simulation, qui a pour mission de développer et de valider des logiciels scientifiques.

La durée du présent contrat est de 1 an renouvelable 1 fois (2 ans au total).

Déroulement et calendrier de la procédure de recrutement :

Le dossier devra montrer l'adéquation du profil du/de la candidat(e) à la mission confiée et aux compétences requises. Il contiendra un CV, une lettre de motivation décrivant ses expériences de recherche et de développement, une liste des publications. Ce poste est ouvert à partir du 01/02/2022 (attention : durée d'instruction du dossier sécurité de plusieurs mois en amont).

Contacts :

thierry.hocquellet@cea.fr 05 57 04 43 91
guillaume.latu@cea.fr 04 42 25 63 57