

Simulation de la propagation de fissures dans  
les lentilles du Laser Méga Joule :  
de la physique des matériaux au **calcul haute  
performance** en passant par l'**algorithmique**,  
la **visualisation** et le **pilotage interactif** de  
simulations

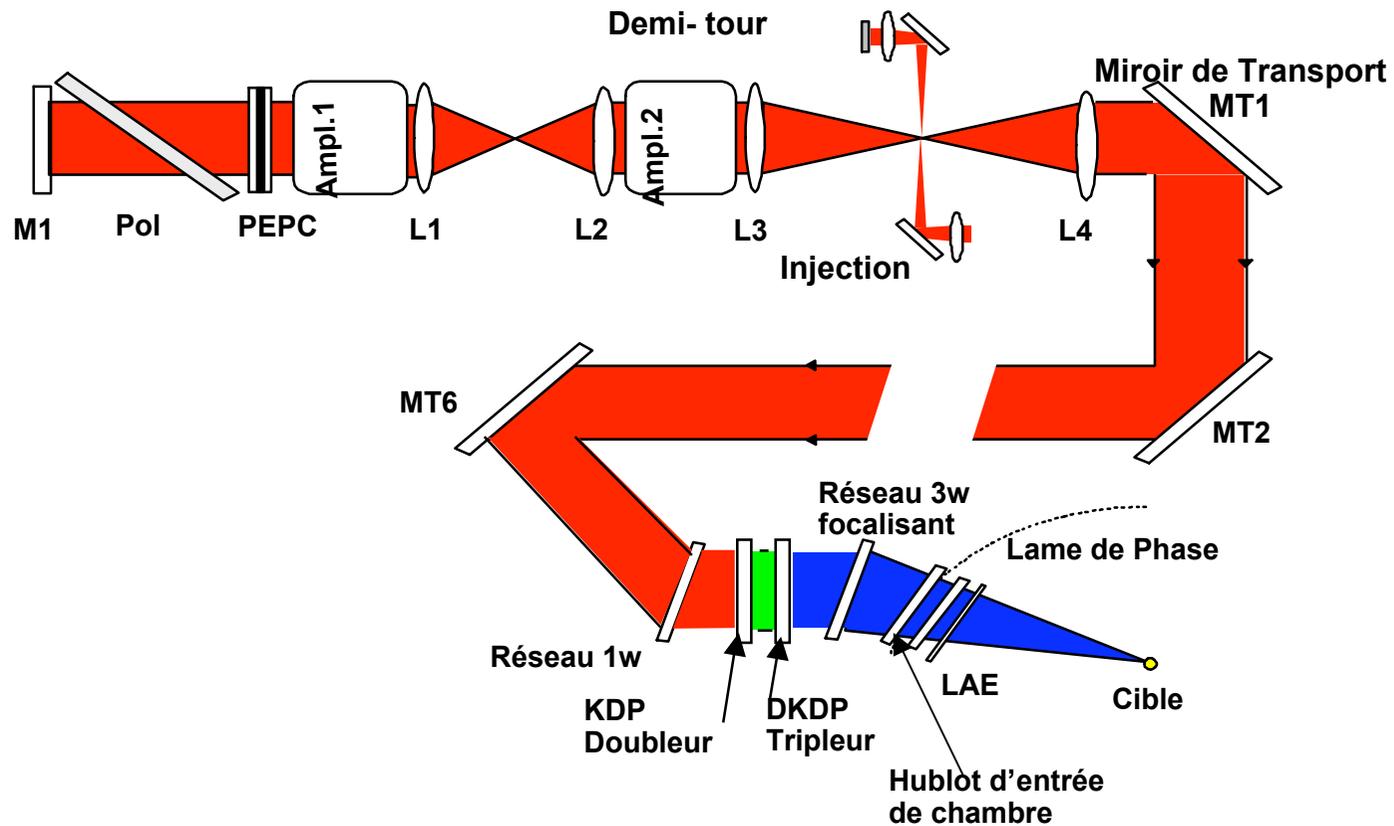
Olivier Coulaud  
Projet ScAIApplix

8 janvier 2008

INSTITUT NATIONAL  
DE RECHERCHE  
EN INFORMATIQUE  
ET EN AUTOMATIQUE

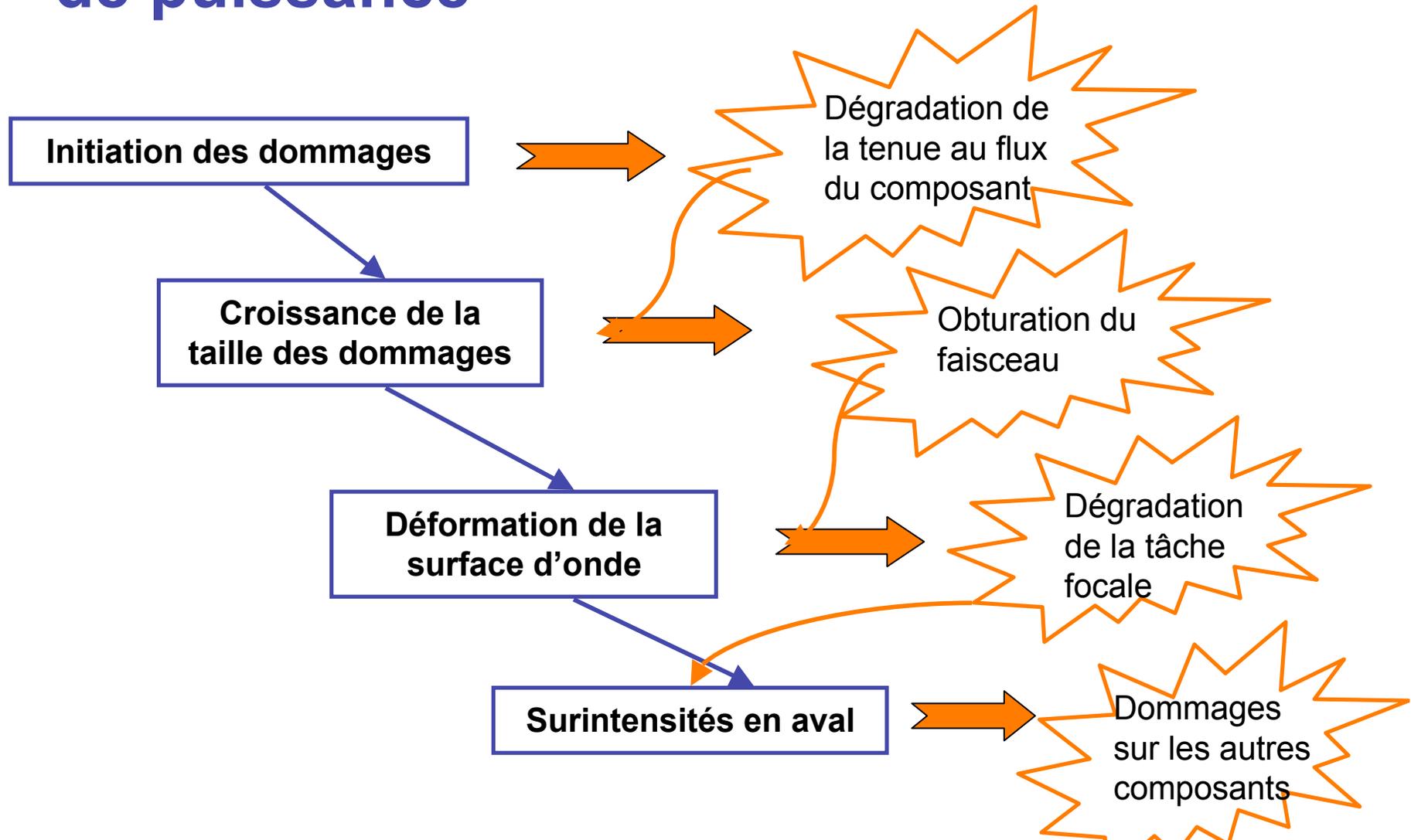


# Schéma d'un faisceau de la LIL



Cadre du laser mégajoule

# Endommagement laser dans une chaîne de puissance



# Quelques dimensions caractéristiques

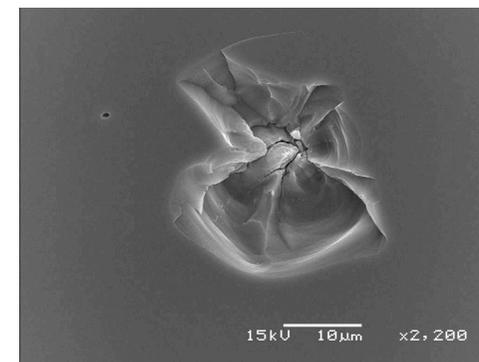
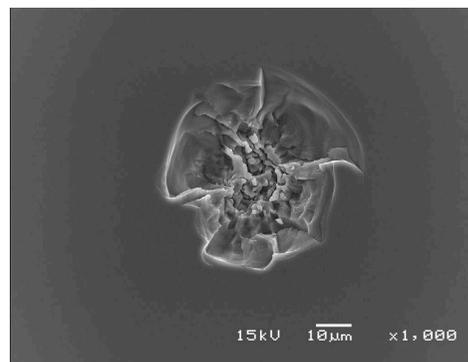
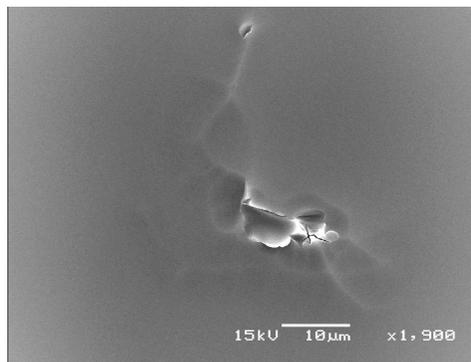
Longueur d'onde d'étude  $3\omega \Rightarrow \lambda = 351 \text{ nm}$

Dimensions d'un composant (hublot, lame)

- Quelques centimètres d'épaisseur :  $10^6 \lambda$
- Quelques mètres carrés de surface :  $10^8 \lambda \times 10^8 \lambda$

Défauts

- fissures, craquelures micrométriques  $10 \lambda$
- inclusions nanométriques  $\lambda/10$



# Contexte

Collaboration avec le CEA DIF-DPTA - G. Zerah

Objectif : développer un simulateur pour

1. Mieux comprendre la création des défauts
2. Étudier la propagation des fissures dans le verre

Problématiques de recherche

1. Analyse mathématique et informatique des couplages
2. Validation pour les outils développés dans le projet  
algorithmes, EPSN, ...
3. Calcul HPC en grandeur réelle

# Les approches classiques

Approche atomique : dynamique moléculaire

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

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

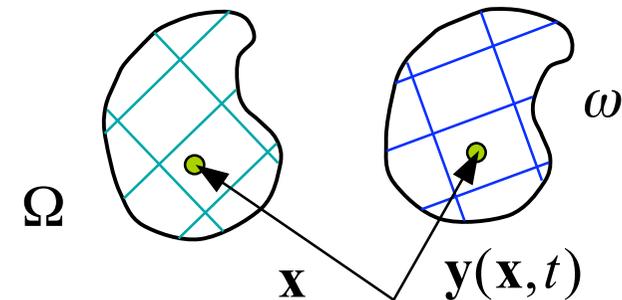
$$V(q) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left( \frac{A_{i,j}}{|q_i - q_j|^{12}} - \frac{B_{i,j}}{|q_i - q_j|^6} \right)$$

Approche continue : élastodynamique :

$$\rho \ddot{\mathbf{y}} = \operatorname{div} \mathbf{T} + \mathbf{b} \quad \mathbf{T} = \mathbf{T}^T$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}(\nabla \mathbf{y})$$

- Loi de comportement du matériau
- Discrétisation par éléments finis



# Introduction : approche continue

## Avantages et limitations du modèle microscopique

- On décrit tous les phénomènes avec une équation
- $1\mu\text{m}^3$  de silicium contient  $\sim 10^{11}$  atomes.
- Gros volume de données 6.5 Tera-octets par pas de temps pour  $\sim 10^{11}$  atomes.
- Pas de temps très petit fento-seconde ( $10^{-15}$  s)
- Conditions aux limites périodiques

## Avantages et limitations du modèle macroscopique

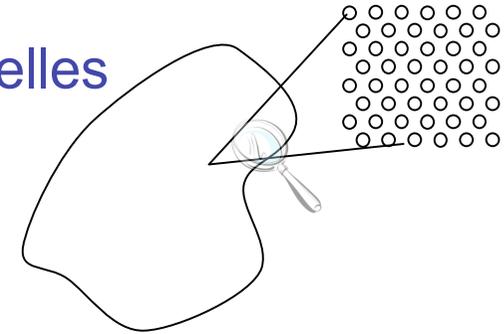
- Permet de modéliser de gros objets
- Maillage très fin pour capturer des solutions avec des gradients forts
- Discontinuité, singularité, lois de comportement empiriques



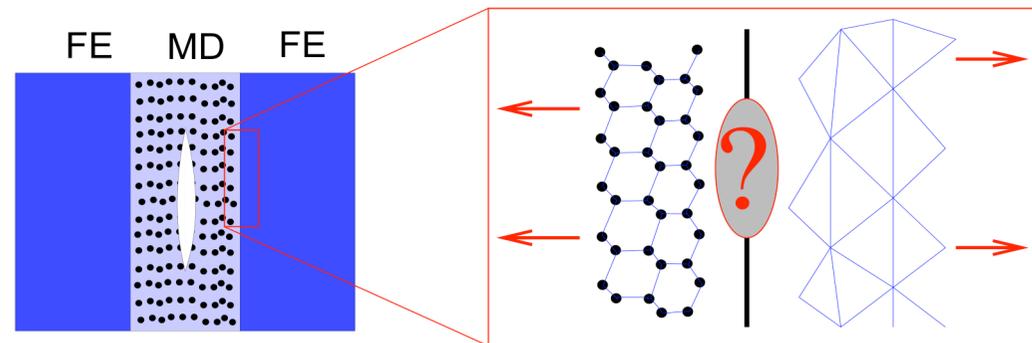
# Approche multi échelles

Idée : le matériaux peut être regardé à deux échelles  
utiliser les avantages des deux modèles

- modèle continu
  - Diminuer la taille du domaine
  - Prise en compte des conditions aux limites.
- modèle discret
  - Proche des discontinuités



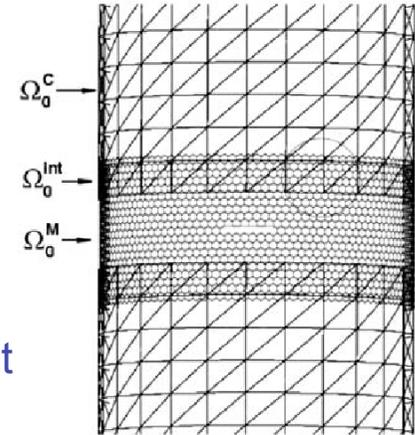
Comment raccorder ces deux modèles ?



# Le couplage

On considère :

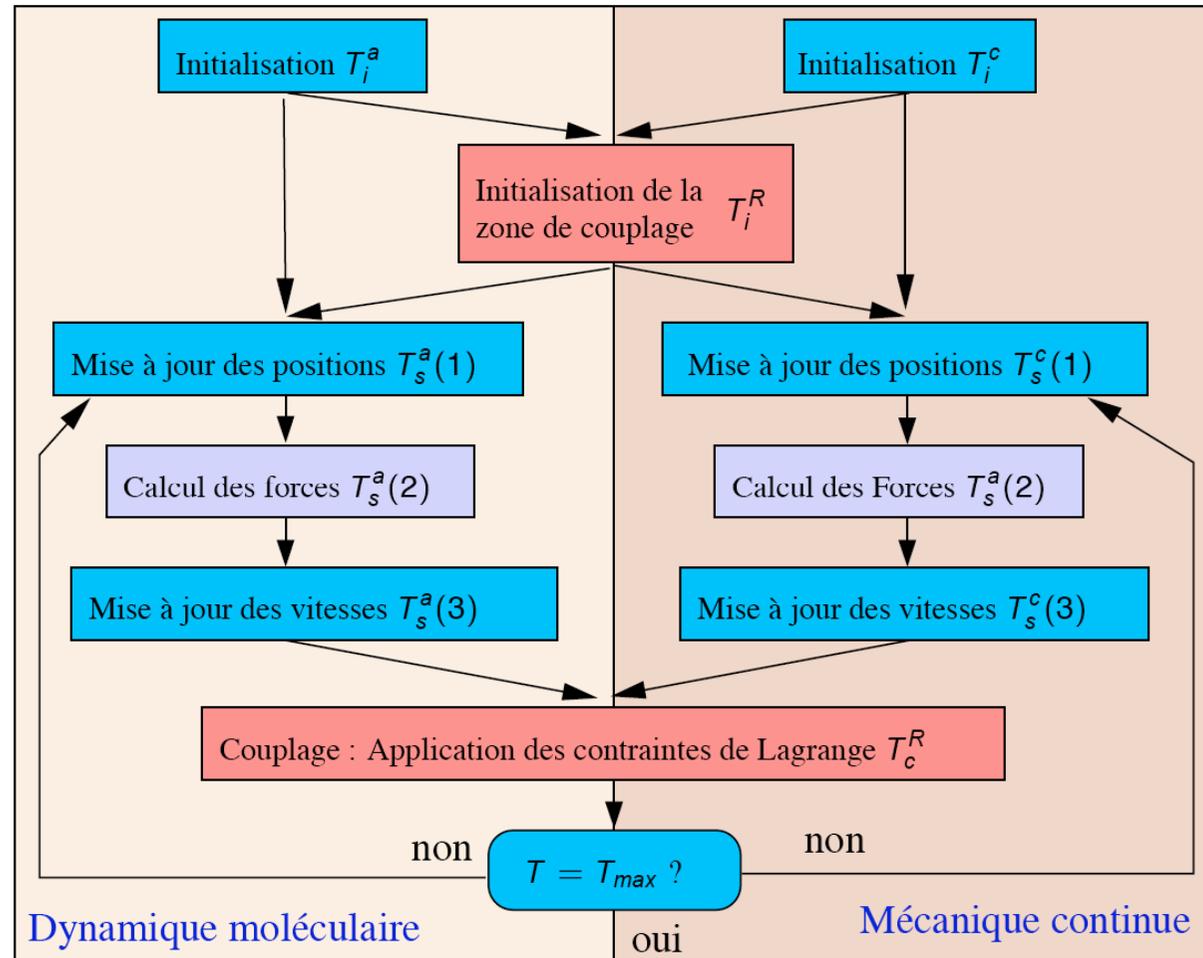
- Une zone de recouvrement où les deux modèles coexistent
- Une pondération de l'énergie dans le recouvrement
- des contraintes pour que les vitesses de déplacement des deux discrétisations soient indentiques



## Algorithme du couplage

- Step 1 : on avance les deux algorithmes séparément
    - $u(t) \rightarrow u^*(t+dt)$
    - $q(t) \rightarrow q^*(t+dt)$
  - Step 2 : on recolle les deux modèles
    - On pondère pour ne compter l'énergie qu'une fois
    - On travaille sur les vitesses (énergie cinétique)  
$$d u / dt = d q / dt$$
- Conduit à un système linéaire à résoudre.

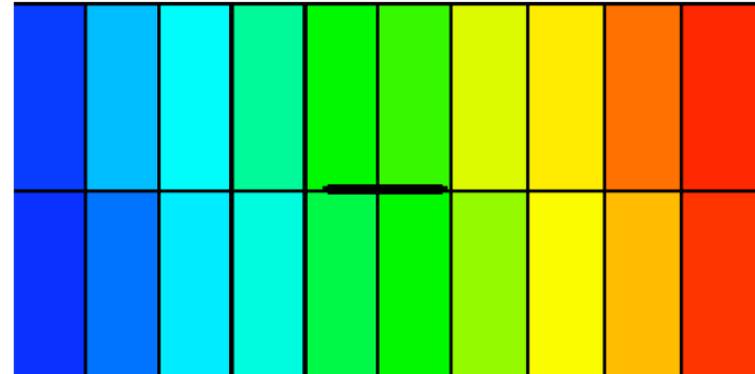
# Algorithme



# Parallélisme

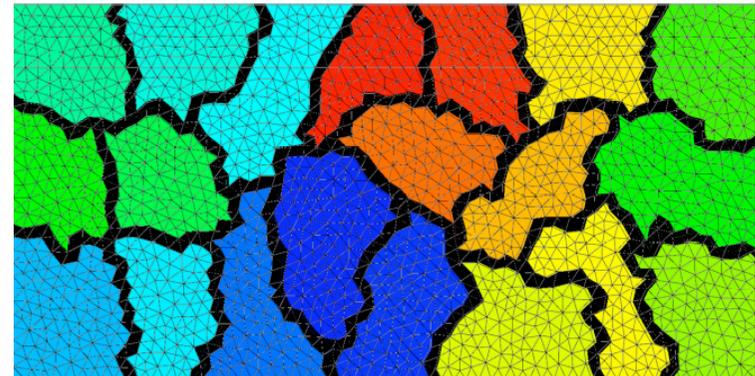
## Dynamique moléculaire

- Décomposition spatiale
- Atomes ne sont pas affectés à une boîte  
Gérer la migration des atomes



## Élastodynamique

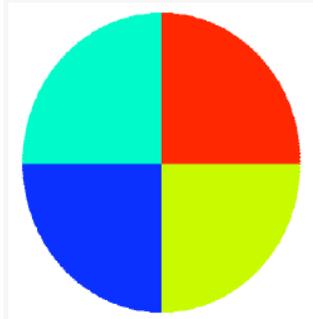
- Partitionnement du maillage
- Échange des données sur la frontière
- Statique



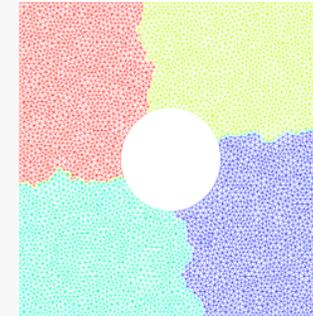
Le couplage nécessite de maintenir une cohérence dans la structure de données  
Algorithmique complexe    dynamique/statique des codes

# Le couplage

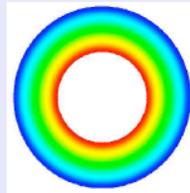
Stratégie : deux ensembles de processeurs distincts pour chaque modèle



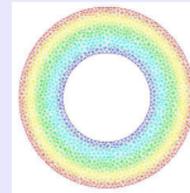
Dynamique moléculaire  
(Stamp, Lammps)



Mécanique des milieux continus  
(LibMesh)

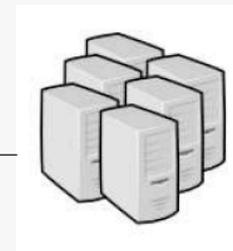
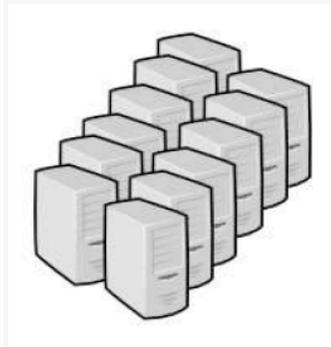


Pondération MD

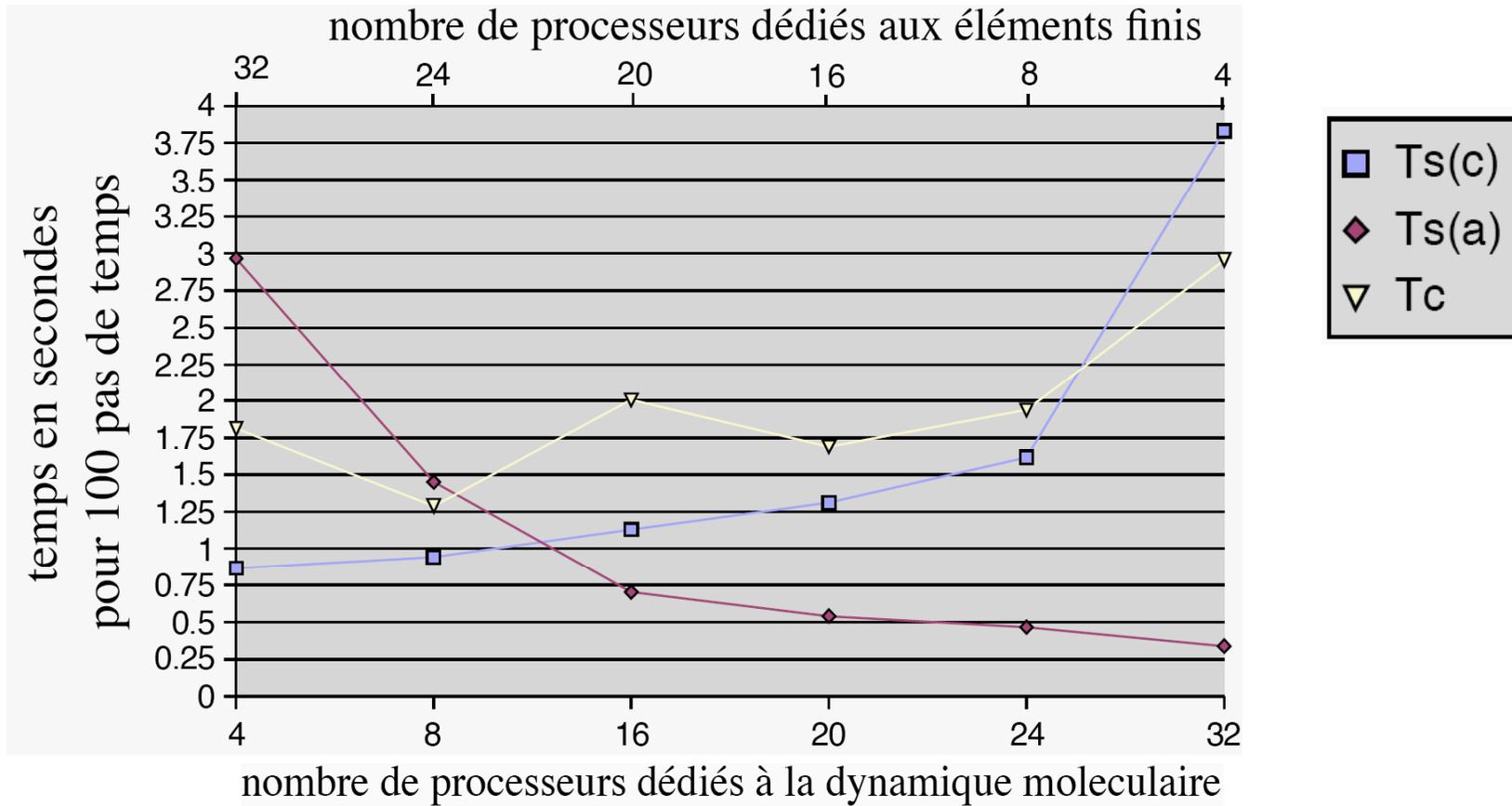


Pondération FE

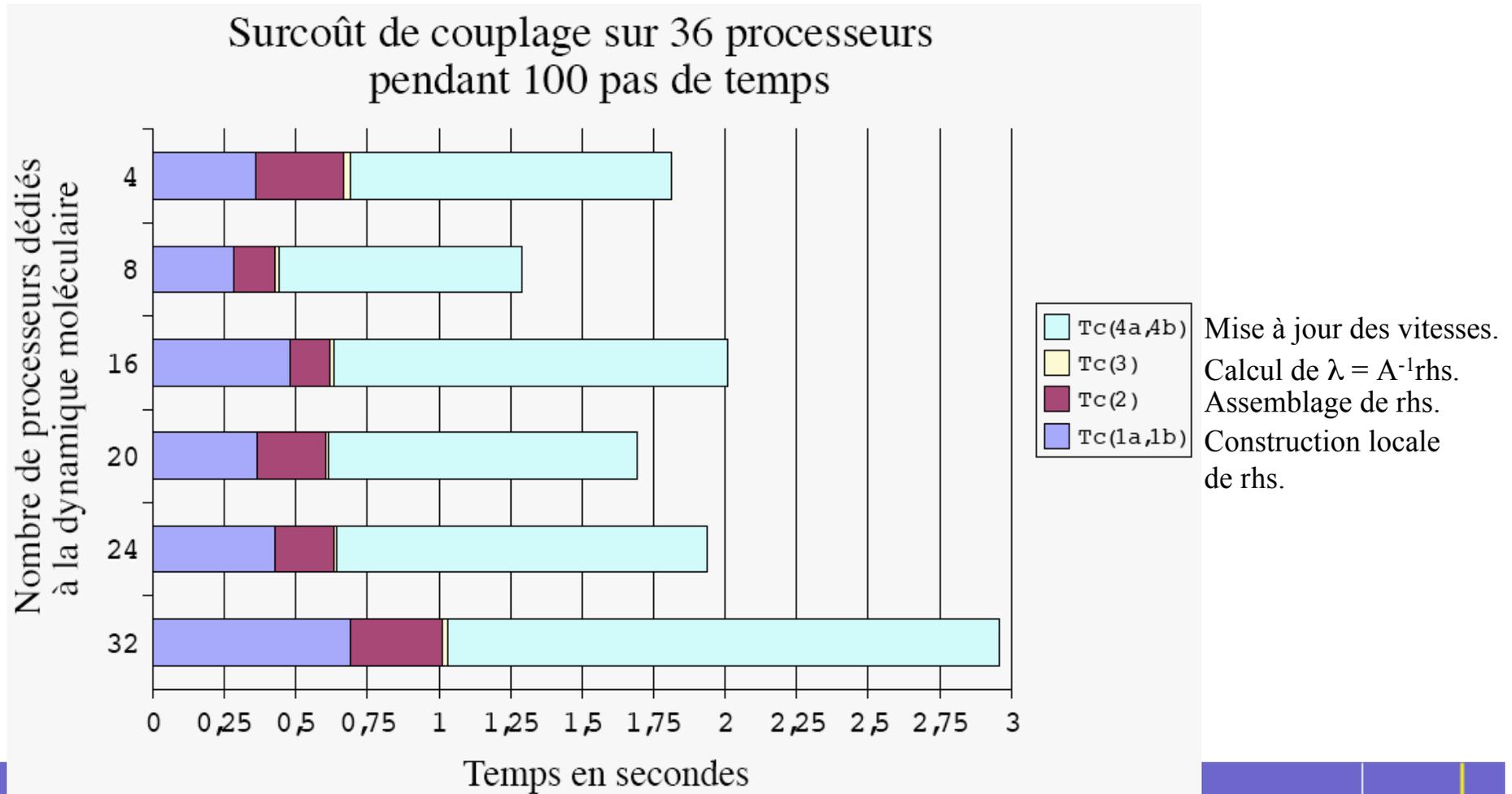
Interaction  
de couplage



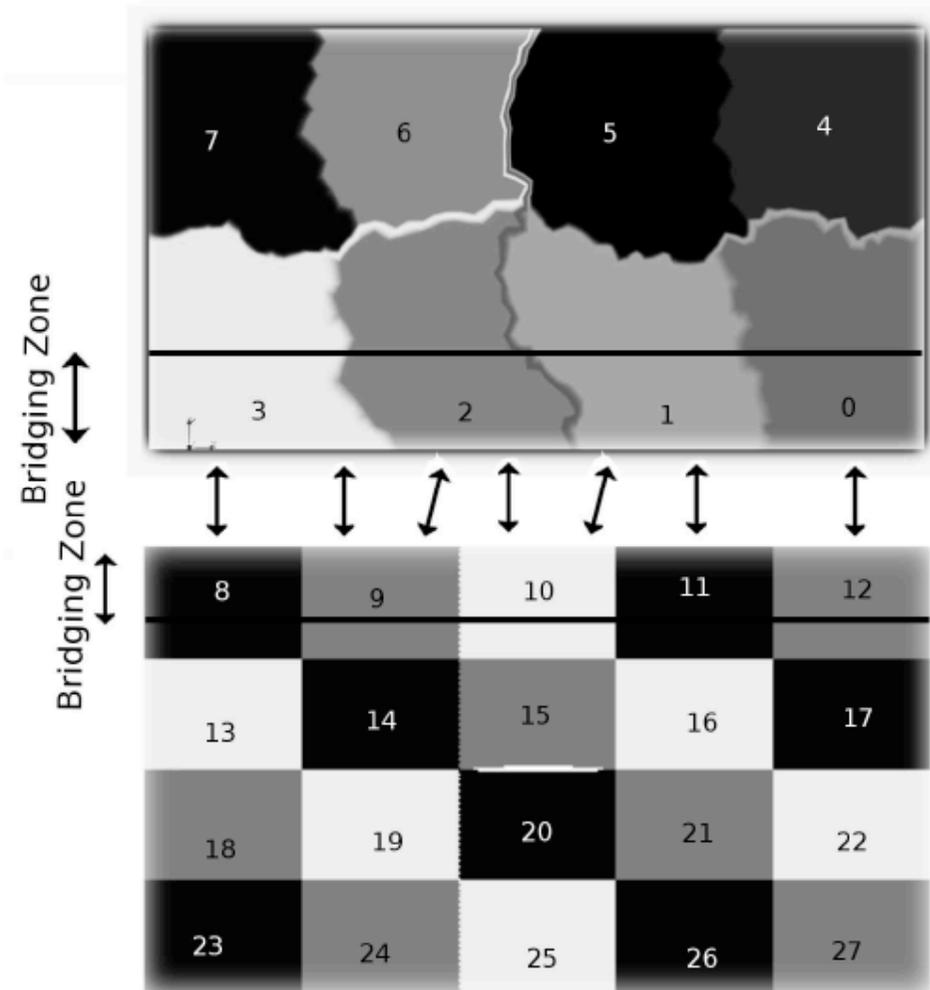
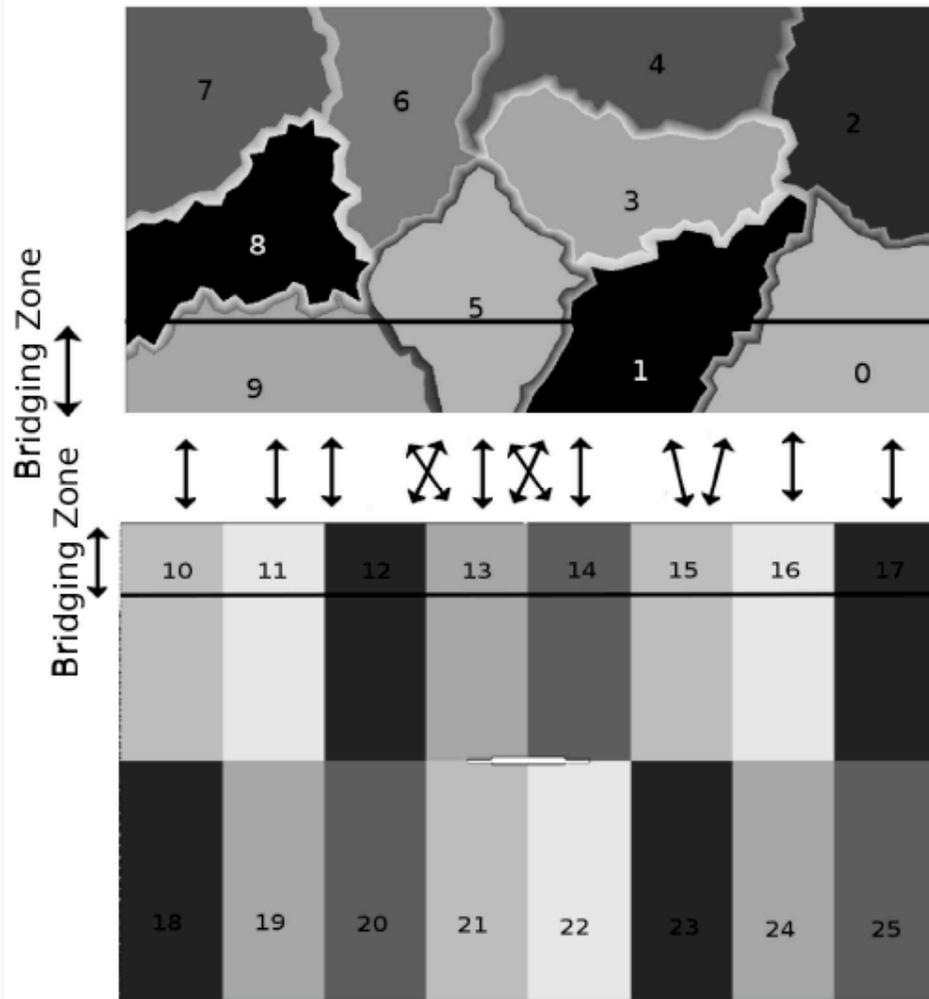
# Performance : propagation 2D (1)



# Performance : propagation 2D (2)



# Problème de partitionnement

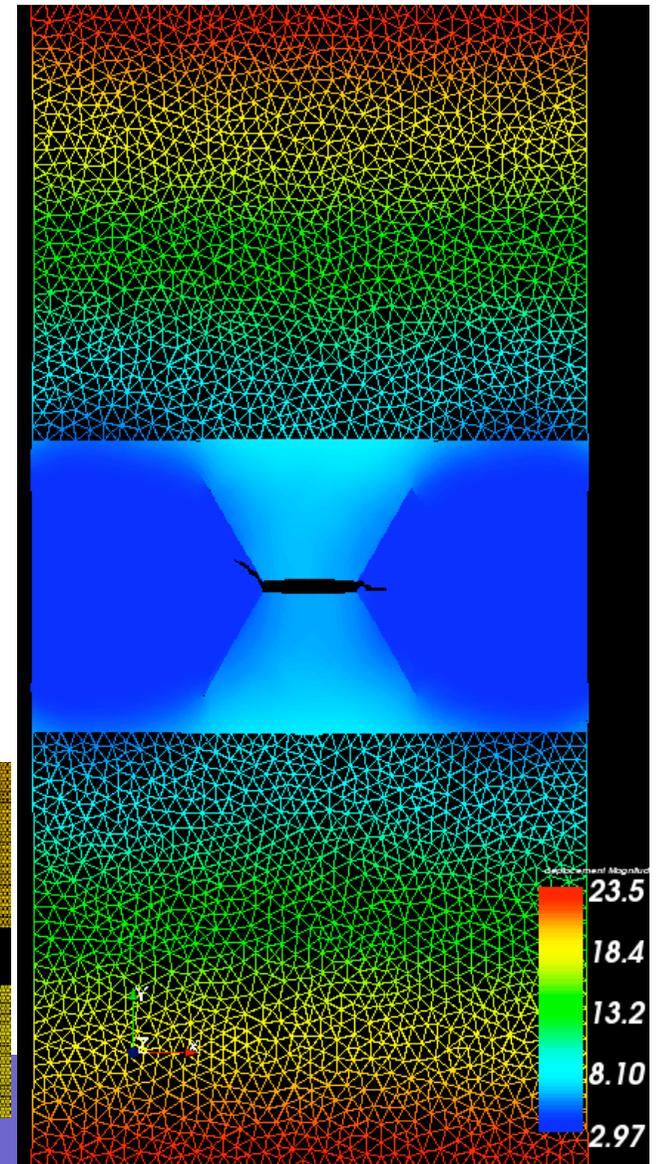
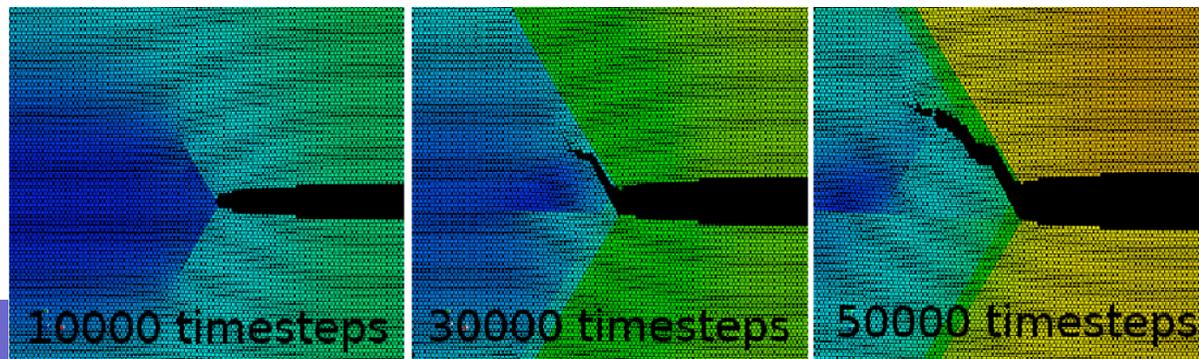
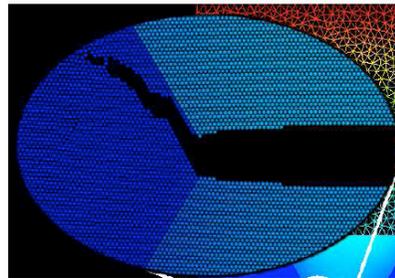


# Propagation de fissure 2D

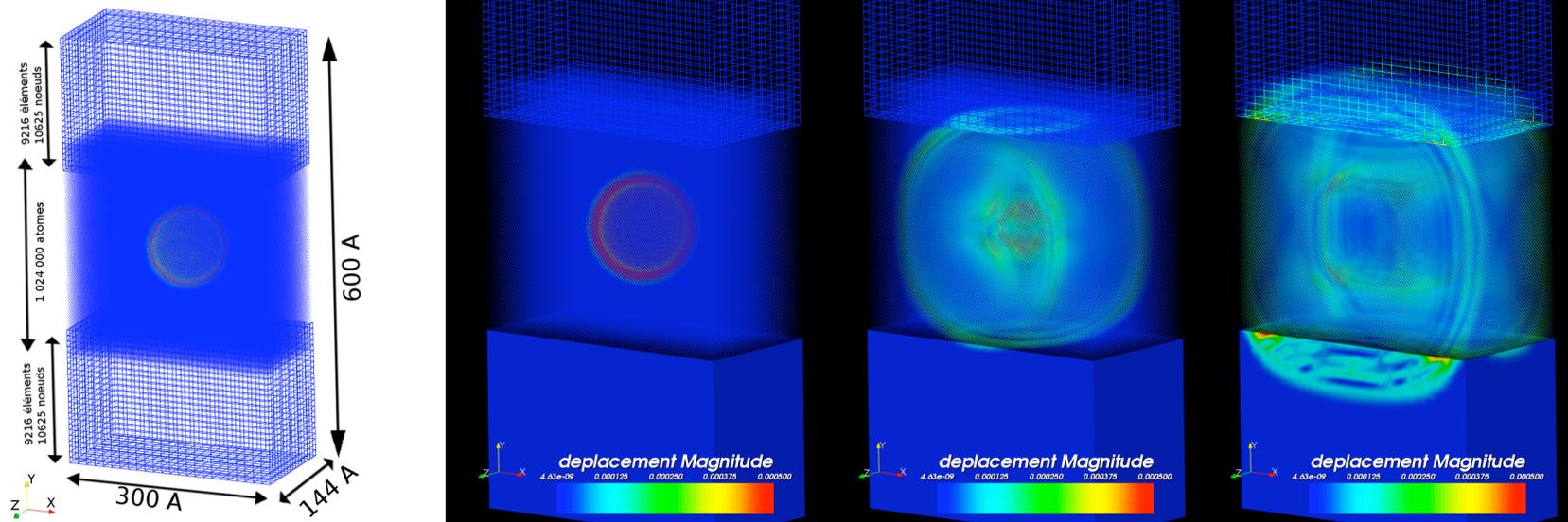
## Cristal Argon

- ~91 000 atomes
- ~ 2 200 nœuds

Simulation de 0.1 nano-seconde, 40 processeurs



# Propagation d'ondes 3D



Cristal de cuivre : 1 million d'atomes, 2x 10 000 noeuds

Peu de réflexions d'ondes à l'interface des modèles (plan)

Perturbation de la dynamique par les ondes miroirs (PBC), il faut englober le domaine atomique par le domaine continu

# Propagation de fissure 3D

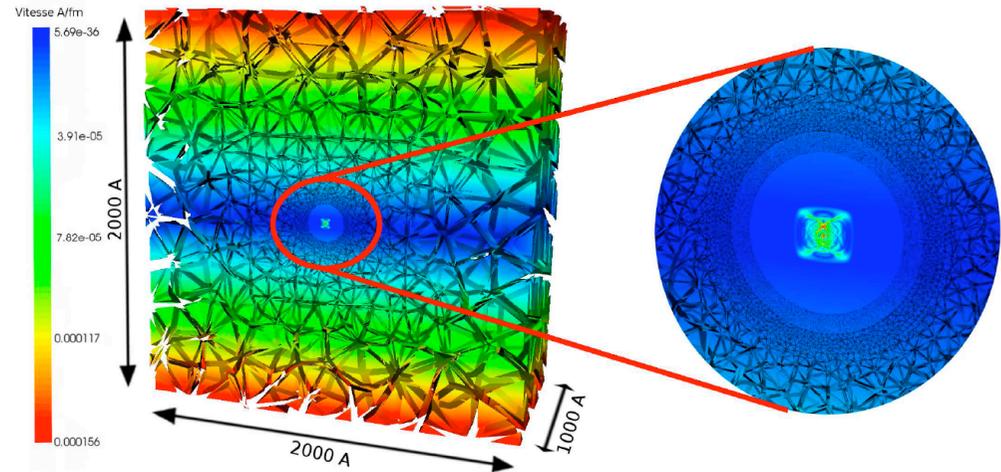
## Challenges

- S'affranchir des PBC
- Aller vers poly-cristaux (SiO<sub>2</sub>) puis l'amorphe (verre)
- Prise en compte de la température

➔ Simulations réalistes

## Difficultés

- Opérateur de « transfert » entre les modèles - Température problème ouvert.
- Construction du modèle
  - géométrie - couplage non plan
  - d'équilibre
- Accroître le parallélisme
- Comment trouver l'information et la visualiser rapidement ?



Cristal de cuivre 3D

~2 800 000 atomes

~600 000 éléments

~93 000 nœuds

Potentiel EAM

# Quelques problèmes de recherche (1)

## Modélisation (+ mathématique)

Améliorer le transfert d'information entre les deux modèles  
échelle de temps différente -> analyse spectrale du signal

Considérer des poly cristaux puis des amorphes  
Complexifier toute l'algorithme du couplage - identifier les atomes

Prendre en compte la température (vitesse des atomes)  
Séparer le front d'onde de l'agitation moléculaire liée à la température  
Que doit-on transférer au modèle continu ?

...

# Quelques problèmes de recherche (2)

## Parallélisme

Comment placer les codes de manière optimale sur  $p$  processeurs ?

Comment accroître le parallélisme du coupleur ?

Difficultés :

peu de processeurs en charge de la zone de couplage (atomique et continu) par rapport au reste du domaine

Pistes :

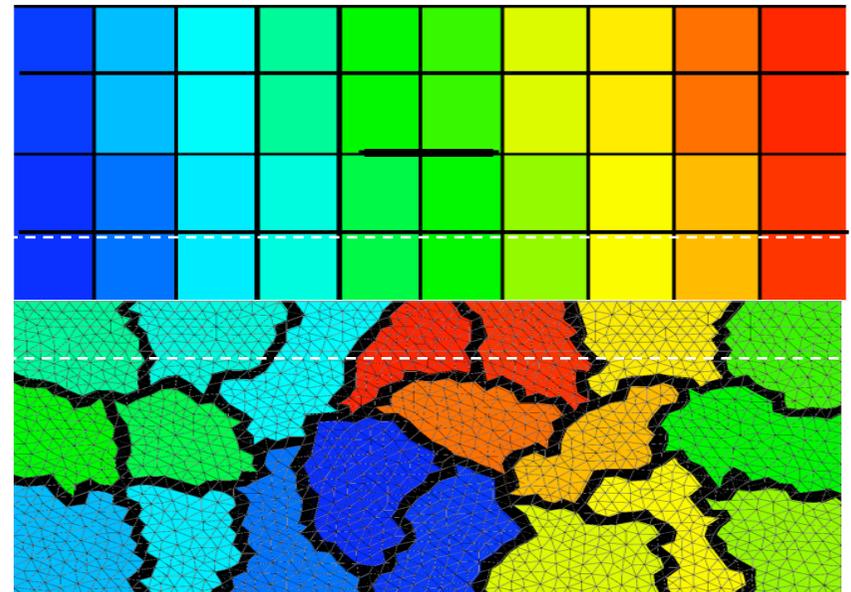
Modifier le partitionnement E.F.

utiliser le partitionnement

Ordonner différemment les calculs

Améliorer l'algorithmique

Changer le placement global

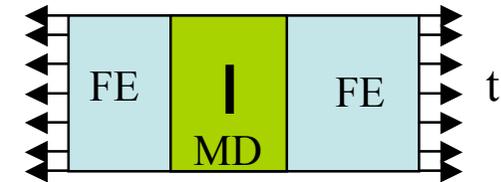


# Quelques problèmes de recherche (3)

Pré-traitement : construire la condition initiale à l'équilibre

Nécessite une simulation interactive avec un couplage avec la visualisation

modifier les paramètres (traction, pas de temps, ...)



Transfert efficace entre la simulation et la visualisation

plate-forme EPSN : <http://www.labri.fr/projet/epsn>

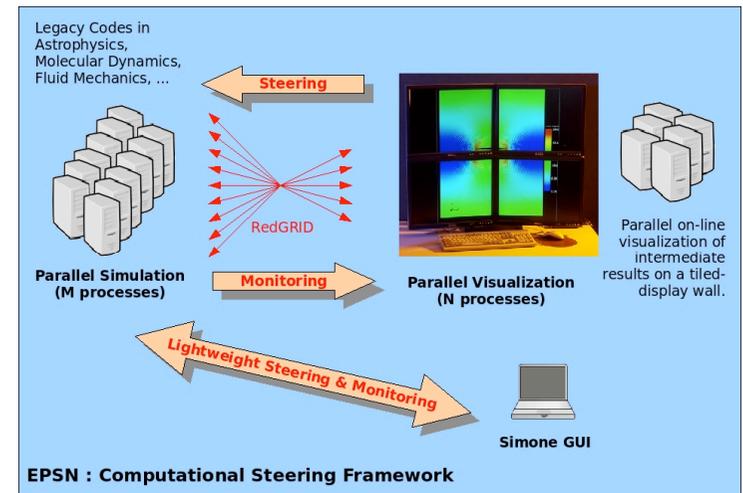
## Difficultés

- Comment trouver l'information pertinente dans un gros volume de données 3D discrètes ?

- Visualisation rapide

Quelques solutions

- Structuration hiérarchique des données
- Visualisation parallèle
- Transfert progressif des données en fonction du point de vue



Questions ?