

Solveurs parallèles FETI-2LM et impédances à deux niveaux

T. Gauthier^{1,2}, C. Bovet¹, P. Gosselet²

¹ Université Paris-Saclay, ONERA, Matériaux et Structures, 92322 Châtillon, France

² LaMcube, Univ. Lille / CNRS / Centrale Lille, F-59000, Lille, France

Résumé — Cette présentation concerne la méthode de décomposition de domaine FETI-2LM, méthode mixte apparentée à la méthode Latin et méthode de Schwarz optimisée. Nous indiquons d'abord sa formulation et ses paramètres associés. Nous expliquons alors dans quelle mesure un choix convenable devrait produire des opérateurs contractants dans le but ultérieur de l'adapter à des méthodes de résolution asynchrones appropriées pour la résolution en parallèle de grands problèmes fortement linéaires.

Mots clés — Décomposition de domaine mixte, Calcul parallèle, FETI-2LM.

1 Introduction et état de l'art

Les composants des moteurs aéronautiques (chambre de combustion, aube, etc.) sont soumis à des sollicitations thermiques et mécaniques sévères qui conduisent à des comportements élastoviscoplastiques des matériaux. Leur simulation haute fidélité implique la résolution de problèmes éléments finis fortement non linéaires de grande taille.

Les dimensions de tels problèmes incitent à employer des méthodes de calcul parallèle du type décomposition de domaine. Les méthodes employées classiquement en mécanique des structures sont associées à des solveurs itératifs de Krylov qui présentent des points de synchronisme dû à l'emploi répété de produits scalaires sur des vecteurs distribués. Or, la présence de non-linéarité induit une disparité importante des charges de travail associées aux différentes unités de calculs. Ces points de synchronisme conduisent alors à une séquentialisation des calculs rendant inefficaces ces méthodes. Une voie possible est de faire appel à des algorithmes « asynchrones » [7, 8], basé sur des itérations de point fixe. En conséquence les méthodes habituelles de nos équipes (BDD, FETI et leurs variantes), dont le spectre est supérieur à 1, ne peuvent se prêter à ce type d'itérations.

D'autres méthodes de décomposition de domaine inspirées de la méthode de Schwarz optimisée (voir par exemple [3]), telle la méthode Latin [5], ne présentent pas ces limitations. Cette dernière « associée à des conditions de Robin à l'interface [de nos sous-domaines] conçue spécifiquement pour traiter les problèmes mécaniques non linéaires a été appliquée avec succès à la viscoplasticité », [9]. Afin de rendre la méthode extensible, il faut lui associer un mécanisme de transmission des effets lointain - tel que les mouvements de corps rigides des sous-domaines - ce qui suit intuitivement le principe mécanique formulé par Saint-Venant. Dans [9], il est montré que suivant une stratégie type GenEO [12], il est possible d'identifier ces modes via un problème aux valeurs propres. Cependant un tel problème grossier introduit lui aussi des points de synchronisme.

Une autre méthode apparentée est FETI-2LM (*two-Lagrange multipliers FETI*) [11, 10]. Cette méthode offre différents paramètres sur lesquels jouer afin de rendre l'opérateur vu par l'algorithme du point fixe contractant. Des travaux antérieurs ont été réalisés [1] en particulier sur un de ces paramètres, l'impédance, dont un choix « optimal » permettrait de capturer les effets longue distance. La construction de cette impédance optimale n'est cependant pas envisageable dans un cadre distribué et ces précédentes études se sont conclues par l'introduction de plusieurs approximations. Notre présentation portera sur l'étude des effets de ces différentes approximations à grande échelle dans l'environnement éléments finis Z-set (Mines, Onera, Transvalor). Le présent résumé décrit la méthode FETI-2LM [10] et montre une simple étude d'extensibilité avec un prototype encore simple mais fonctionnel de notre méthode.

2 Description de la méthode FETI-2LM

Nous considérons un domaine Ω maillé de manière conforme. Un problème élastique isotherme est traité via la méthode classique des éléments finis d'où provient la formulation discrétisée suivante :

$$Ku = f. \quad (1)$$

Avec K l'opérateur de rigidité, u le champ de déplacement et f la charge. Les conditions de Dirichlet et Neumann sont déjà intégrées dans la formulation. Un partitionnement des éléments finis définit une décomposition de domaine $(\Omega_s)_{s \in S}$, S ensemble d'indices fini. Nous définissons alors l'interface entre deux sous-domaines d'indice s et s' comme :

$$\Gamma^{s,s'} = \Omega_s \cap \Omega_{s'}$$

et l'interface globale par :

$$\Gamma = \bigcup_{(s,s') \in S \times S} \Gamma^{s,s'}$$

Les indices des données correspondantes aux nœuds internes sont notés i , ceux correspondant aux nœuds à l'interface sont notés b (*boundary*). Il est utile en pratique de compter de façon redondante les nœuds et de définir deux types d'interfaces en fonction des quantités considérées :

- Γ_A , l'interface primale,
- Γ_B , l'interface duale.

À ces interfaces Γ , Γ_A et Γ_B sont associés des opérateurs booléens chargés d'établir les correspondances :

- A^s les matrices booléennes d'assemblage primal,
- B^s les matrices booléennes signées d'assemblage dual telle que si un degré de liberté correspondant à une connexion vaut 1 sur un sous-domaine, il vaut -1 sur l'autre,
- T^s l'opérateur trace de Ω^s sur son interface locale $\Omega^s \cap \Gamma$: par exemple, $u_b^s = T^s u^s$.

Parmi les propriétés intéressantes de ces opérateurs, nous retenons ici la relation d'orthogonalité suivante :

$$\sum_{s \in S} A^{s\top} B^s = 0 \quad (2)$$

Nous référant à la Figure 1, nous avons par exemple les opérateurs :

$$T^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, A^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, B^1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, B^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Avec une telle décomposition de domaine, le problème (1) se réécrit, en séparant degrés de liberté internes et à l'interface, comme suit :

$$\begin{bmatrix} K_{ii} & K_{ib} \\ K_{bi} & K_{bb} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_i \\ f_b \end{bmatrix} \quad (3)$$

À partir de (3) nous définissons des problèmes locaux pour chaque sous-domaine $s \in S$:

$$\begin{bmatrix} K_{ii}^s & K_{ib}^s \\ K_{bi}^s & K_{bb}^s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i^s \\ u_b^s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_i^s \\ f_b^s + \lambda_b^s \end{bmatrix} \quad (4)$$

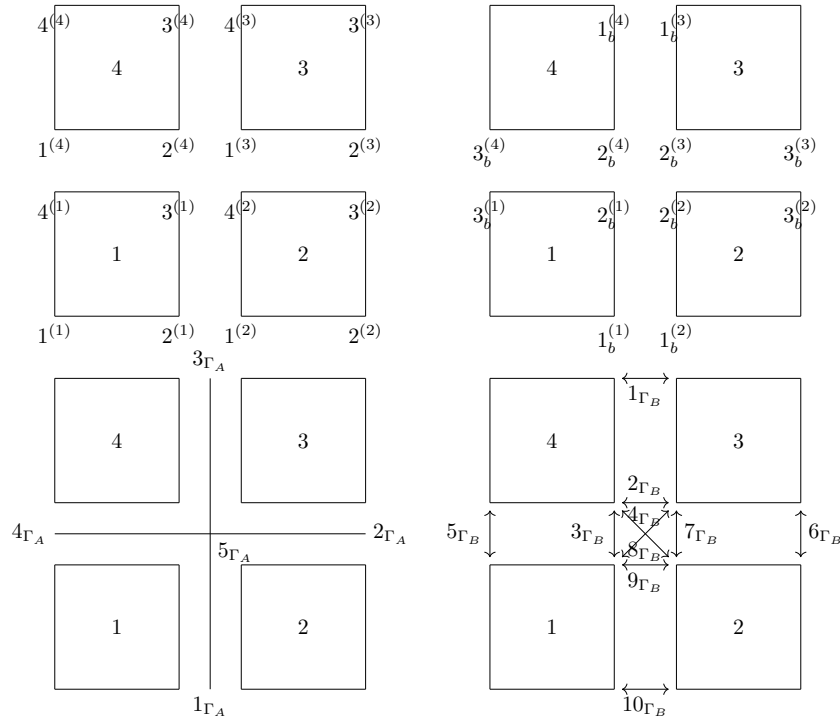


FIGURE 1 – Exemple avec 4 sous-domaines, numérotations locales, primales et duales

où nous avons introduit λ_b^s la réaction due aux sous-domaines voisins. Les blocs K_{ii}^s et f_{ii}^s s'obtiennent par simple extraction des degrés de liberté interne du sous-domaine s , puisqu'il n'y a pas de recouvrement. Nous avons par définition :

$$\sum_{s \in S} K_{bb}^s = K_{bb} \text{ et, } \sum_{s \in S} f_b^s = f_b.$$

Nous adjoignons à la collection des problèmes locaux (4) deux nouvelles conditions pour définir un problème équivalent à (1) :

$$\sum_{s \in S} A^s \lambda_b^s = 0 \quad (5)$$

$$\sum_{s \in S} B^s u_b^s = 0 \quad (6)$$

Les équations (5) et (6) s'interprètent mécaniquement et respectivement comme l'équilibre des réactions à l'interface et la continuité des déplacements à l'interface. L'équivalence des formulations algébriques se vérifie trivialement : se référer par exemple au premier chapitre de [13].

En multipliant les deux membres du problème local (4) à gauche par la matrice de transvection,

$$\begin{bmatrix} I & 0 \\ -K_{bt}^s K_{ii}^{s-1} & I \end{bmatrix},$$

nous obtenons une formulation locale équivalente :

$$\begin{bmatrix} K_{ii}^s & K_{ib}^s \\ 0 & S_p^s \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i^s \\ u_b^s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_i^s \\ b_p^s + \lambda_b^s \end{bmatrix}, \quad (7)$$

avec :

- $b_p^s = f_b^s - K_{bi}^s K_{ii}^{s-1} f_i^s$, le second membre contracté primal,
- $S_p^s = K_{bb}^s - K_{bi}^s K_{ii}^{s-1} K_{ib}^s$, le complément de Schur primal.

Nous définissons l'inconnue mixte par :

$$\mu_b^s = \lambda_b^s + Q_b^s u_b^s \quad (8)$$

où nous introduisons Q_b^s l'impédance à l'interface, opérateur symétrique défini positif dont les données sont homogènes à une raideur.

Profitant de l'orthogonalité des opérateurs A^s et B^s , nous pouvons résumer les conditions (5) et (6) en une seule :

$$A^{s\top} \sum_{s' \in S} A^{s'} \lambda_b^{s'} + Q_b^s B^{s\top} \sum_{s' \in S} B^{s'} u_b^{s'} = 0 \text{ (condition condensée mixte à l'interface)} \quad (9)$$

L'équation (5), resp. (6) se retrouve à partir de (9) en multipliant par A^s et sommant, resp. en multipliant par B^s et sommant, du fait de l'orthogonalité (2).

Réécrivant (1) à l'aide de l'inconnue mixte, nous obtenons :

$$u^s = \left(K^s + T^{s\top} Q_b^s T^{s\top} \right)^{-1} \left(f^s + T^{s\top} \mu_b^s \right) \quad (10)$$

Avec un paramètre Q_b^s symétrique défini positif. Nous définissons enfin :

$$\begin{aligned} S_m^{s-1} &= T^s \left(K^s + T^{s\top} Q_b^s T^{s\top} \right)^{-1} T^{s\top} = \left(S_p^s + Q_b^s \right)^{-1} \\ b_m^s &= T^s \left(K^s + T^{s\top} Q_b^s T^{s\top} \right)^{-1} f^s = S_m^{s-1} b_p^s \end{aligned}$$

appelant S_m^s le complément de Schur mixte et b_m^s le second membre condensé à l'interface mixte.

Partant de (9) et substituant u_b^s et λ_b^s à l'aide (4), (8) (10) nous obtenons enfin la formulation dite de FETI-2LM :

$$A^{s\top} \sum_{s' \in S} A^{s'} \left(S_p^{s'} + Q_b^{s'} \right)^{-1} \mu_b^{s'} + Q_b^s B^{s\top} \sum_{s' \in S} B^{s'} \left(S_p^{s'} + Q_b^{s'} \right)^{-1} \mu_b^{s'} = A^{s\top} \sum_{s' \in S} A^{s'} Q^{s'} b_m^{s'} - Q^s B^{s\top} \sum_{s' \in S} B^{s'} b_m^{s'} \quad (11)$$

L'objectif de nos travaux est d'employer FETI-2LM avec un algorithme itératif de type point fixe qui a l'avantage d'être adapté à des méthodes asynchrones, là où la formulation d'autres méthodes telles que BDD ou FETI n'est pas contractante, voir [13]. Or, en l'état, et même avec des choix d'impédances « raisonnables » sur des cas très simples (peu de degrés de liberté, thermique linéaire, élasticité linéaire...), le spectre de l'opérateur vu par la méthode du point fixe n'est pas contractant. Il peut cependant être amélioré pour un même choix d'impédance en introduisant des opérateurs pondérés comme suit :

$$\begin{aligned} \tilde{A}^s &= \left(\sum_{s' \in S} A^{s'} M^{s'} A^{s'\top} \right)^{-1} A^s M^s \\ \tilde{B}^s &= \left(\sum_{s' \in S} B^{s'} M^{s'-1} B^{s'\top} \right)^\dagger B^s M^{s-1} \end{aligned}$$

où \dagger indique l'utilisation de l'inverse généralisée de Moore-Penrose (cf. la fin du premier chapitre de [14]) et M^s représente la pondération (ou le *scaling*) : si $M^s = I$, \tilde{A}^s correspond au *scaling* topologique et si $M^s = \text{diag}(K^s)$ au *scaling* rigidité, voir [4]. De tels opérateurs vérifient encore des conditions d'orthogonalité qui permettent de rassembler, comme dans (9) les conditions (5) et (6) en une seule. Avant de ce faire, nous remarquons que l'impédance Q_b^s intervient pour le moment deux fois : tantôt dans la définition de l'inconnue mixte, tantôt dans la condition mixte condensée. Or il n'y a aucune raison particulière qui nous pousse à choisir deux fois la même. Nous introduisons donc une seconde impédance d'interface X_b^s de sorte que la condition condensée mixte devienne :

$$\tilde{A}^{s\top} \sum_{s' \in S} A^{s'} \lambda_b^{s'} + X_b^s \tilde{B}^{s\top} \sum_{s' \in S} B^{s'} u_b^{s'} = 0 \quad (12)$$

Nous obtenons alors une formulation équivalente à (11) à deux impédances :

$$\tilde{A}^{s\top} \sum_{s' \in S} A^{s'} \left(S_p^{s'} + Q_b^{s'} \right)^{-1} \mu_b^{s'} + X_b^s \tilde{B}^{s\top} \sum_{s' \in S} B^{s'} \left(S_p^{s'} + Q_b^{s'} \right)^{-1} \mu_b^{s'} = \tilde{A}^{s\top} \sum_{s' \in S} A^{s'} Q^{s'} b_m^{s'} - X_b^s \tilde{B}^{s\top} \sum_{s' \in S} B^{s'} b_m^{s'} \quad (13)$$

Puisque la méthode employée sera celle du point fixe, nous souhaitons influencer sur le spectre de l'opérateur du membre de gauche. Pour cela, nous pouvons jouer sur 3 paramètres :

- L'impédance à l'interface Q_b^s qui définit l'inconnue mixte,
- La seconde impédance à l'interface X_b^s introduite dans (12),
- L'opérateur M^s qui définit la pondération des opérateurs *scalés*.

Nous finissons cette introduction théorique par quelques considérations sur Q_b^s et sa construction, suivant [1].

Il existe de fait un choix « optimal » pour les impédances. Suivant [6] ou [2], nous définissons $\Omega^{\bar{s}} = \Omega \setminus \Omega^s$ le complémentaire du sous-domaine Ω^s . Reprenant des notations blocs comme dans (4), nous définissons de même le complément de Schur primal du complémentaire de Ω^s , $S_p^{\bar{s}} = K_{bb}^{\bar{s}} - K_{bi}^{\bar{s}} K_{ii}^{\bar{s}-1} K_{ib}^{\bar{s}}$ et le choix optimal est donné par :

$$Q_b^s = S_p^{\bar{s}}$$

Un tel choix permet d’atteindre la convergence au bout de $\text{card}(S) - 1$ dans le cadre d’une décomposition de domaine par tranche (pas de cycle de connectivité). En présence de points multiples, ce choix reste pertinent et associé à une initialisation de l’inconnue $\mu_{b,0}^s = b_p^{\bar{s}}$ permet d’atteindre la convergence en une itération dans certains cas simples. Cependant, dans le cadre d’un environnement distribué, les communications impliquées sont trop lourdes et la mémoire nécessaire n’est pas suffisante au niveau des unités de calcul ; il faut donc nécessairement trouver une approximation de cette impédance.

3 Implémentations et essais

3.1 Description du cadre logiciel

Notre étude se fait dans la suite éléments finis Z-set, développée par les Mines de Paris, Transvalor et l’ONERA¹. Cependant la majorité du développement se déroule dans la librairie SIA². SIA est une librairie pour le calcul haute-performance qui implémente des méthodes de décomposition de domaine (AMPBDD, FETI, FETI-DP,...). Cette librairie propose des méthodes de gestion de conteneurs distribués et réclame principalement que la suite éléments finis avec laquelle elle est interfacée lui fournisse un complément de Schur. Pour les décompositions de domaine nous utilisons des librairies de partitionnement de graphes Scotch³ ou Metis⁴. Pour l’algèbre linéaire dense, Z-set emploie Blas⁵ et pour l’algèbre linéaire creuse nous employons MUMPS⁶.

3.2 Petite étude d’extensibilité faible

Le problème est celui de l’élasticité linéaire. Le domaine est un cube homogène. La face inférieure du cube est fixé et un déplacement uniforme est imposée orthogonalement à la face supérieure. Le cube est constitué d’éléments hexaédraux quadratiques c3d20 (3x3x3 points de Gauss et 20 degrés de liberté) et une décomposition de domaine automatique via METIS est réalisée de sorte que le rapport du nombre total d’éléments par le nombre de sous-domaines soit $24^3 \approx 10^4$. Nous remarquons que, comme attendu, une méthode naïve avec une impédance scalaire $Q_b^s = \alpha^s \cdot I_b$ avec ici $\alpha^s = \frac{\min(\text{diag}(K^s))}{2}$ n’est pas extensible et que le temps semble s’accroître linéairement avec le nombre de sous-domaines, voir Figure 2.

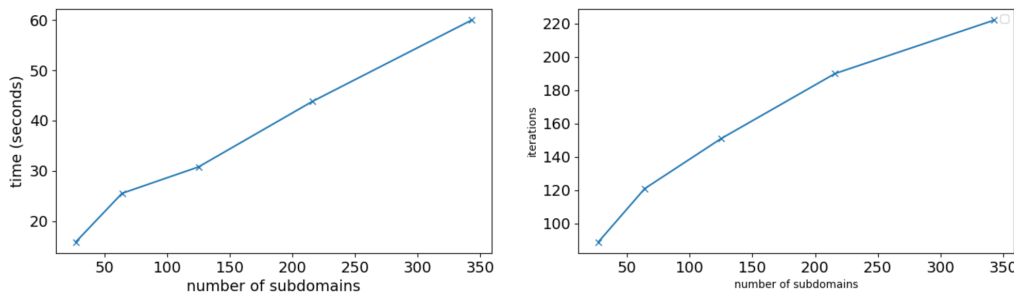


FIGURE 2 – Étude d’extensibilité faible pour une impédance scalaire simple : de 8 à 343 sous-domaines

1. <https://www.transvalor.com/fr/z-set>
2. Scalable Interface Algebra. Auteur : Christophe Bovet (ONERA)
3. <https://www.labri.fr/perso/pelegrin/scotch/>
4. <https://github.com/KarypisLab/METIS>
5. <https://netlib.org/blas/>
6. <https://mumps-solver.org/index.php?page=home>

Les calculs ont été effectués sur le calculateur Juno de l'ONERA, les nœuds employés sont équipés de processeurs Intel « *Sapphire Rapids* » 8468, 48 cœurs, 2.1 Ghz, 105 Mb cache, chaque nœud possède 2 processeurs (pour 96 cœurs par nœud), 512 Go de mémoire de type DDR5 4800 MHz. Les connecteurs réseau sont de type Intel Omnipath OPA 100 Gb/s. Le plus gros calcul a mobilisé 343 cœurs.

Le solveur itératif employé ici est GMres, le scaling est *stiffness* ($M^s = \text{diag}(K_{bb}^s)$). Le spectre de l'opérateur obtenu avec une impédance si grossière n'est généralement pas contractant pour les cas étudiés. Une approche simple consiste à choisir un scalaire différent pour la seconde impédance. Des gains marginaux (environ 10%) en termes de nombre d'itérations ont été atteints en prenant un rapport de $\frac{1}{2}$ entre la première impédance Q_b et la seconde X_b pour des décompositions de domaine avec 346 sous-domaines.

Cette première ébauche montre cependant un prototype fonctionnel et prêt pour tester différentes impédances en s'inspirant de [1]. Notre présentation détaillera les résultats de cette étude.

Références

- [1] Y. El Gharbi. *Une approche à deux niveaux pour le calcul de structures haute performance : décomposition-maillage-résolution*, Thèse de doctorat, Univerté Paris-Saclay, 2021.
- [2] M. Gander, F. Kwok. *Optimal interface conditions for an arbitrary decomposition into subdomains*, Domain decomposition methods in science and engineering XIX, Springer, page101-page108, 2010.
- [3] M. Gander. *Optimized Schwarz Methods*, Journal on Numerical Analysis 44.2, SIAM, page699-page731, 2006.
- [4] A. Klawonn, O. Widlund. *FETI and Neumann-Neumann iterative substructuring methods : Connections and new results*, Communications on Pure and Applied Mathematics 54.1, John Wiley & Sons, page57-page90, 2001
- [5] P. Ladevèze, A. Nouy. *On a multiscale computational strategy with time and space homogenization for structural mechanics*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 192, Elsevier, page3061-page3087, 2003.
- [6] F. Magoulès, F.-X. Roux, S. Salmon. *Optimal discrete transmission conditions for nonoverlapping domain decomposition method for the Helmholtz equation*, Journal on Scientific Computing, SIAM, page1497-page1515, 2004.
- [7] F. Magoulès, D. B. Szyld, C. Venet. *Asynchronous optimised Schwarz methods with and without overlap*, Numerische Mathematik 137.1, page199-page227, 2017.
- [8] F. Magoulès, C. Venet. *Asynchronous iterative sub-structuring methods*, Mathematics and Computers in Simulation 145, page38-page39, 2018.
- [9] P. Oumaziz, P. Gosselet, K. Saavedra, N. Tardieu. *Analysis, improvment and limit of the multiscale Latin method*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 385, 2021.
- [10] F.-X. Roux. *A FETI-2LM Method for Non-Matching Grids*, Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XVIII, Springer Berlin Heidelberg, page121-page128, 2009.
- [11] L. Series, F. Feyel, F.-X. Roux. *Une méthode de décomposition de domaine avec deux multiplicateurs de Lagrange*, Actes du 16ème congrès français de mécanique, 2003.
- [12] N. Spillane, D. J. Rixen. *Automatic spectral coarse spaces for robust FETI and BDD algorithms*, Internat J. Num. Meth. Engin. 95.11, page953-page990, 2013.
- [13] A. Toselli, O. Widlund. *Domain decomposition methods-algorithms and theory*, T.34. Springer Science & Business Media, 2004.
- [14] F. Zhang. *The Schur complement and its applications*, T.4. Springer Science & Business Media, 2006.