

Sujet de thèse

Algorithmique de l'équilibrage de charge pour des couplages de codes complexes

Responsables de l'encadrement : Esnard Aurélien ; Olivier Coulaud ; Jean Roman

Thème – Equipe : HiePACS -- SATANAS

Téléphones : (05 24 57) 41 08 / 40 80 / 40 33

Argumentaire : Ce sujet de thèse correspond à une nouvelle thématique de recherche lancée dans le cadre de la création de la nouvelle Equipe-Projet HiePACS. Le potentiel de collaboration scientifique (dans le domaine de l'algorithmique et du HPC) et industrielle (au titre des problèmes de couplage de codes) est très important. C'est aussi une source de collaboration supplémentaire dans le cadre de l'ANR NOSSI entre HiePACS et les collègues de Chimie computationnelle. C'est enfin l'occasion de donner la possibilité à Aurélien Esnard de coencadrer un doctorant.

Descriptif du sujet :

Dans le contexte du calcul scientifique haute performance (ou HPC), l'équilibrage de la charge est un problème crucial pour répartir le travail entre les différents processus d'une simulation numérique parallèle, afin de minimiser le temps global d'exécution. Ce problème étant déjà bien étudié, la stratégie la plus répandue consiste à modéliser la simulation à l'aide d'un graphe et à découper ce graphe en parties de poids équilibrées avec un outil de partitionnement de graphes comme SCOTCH ou METIS.

À titre d'exemple, considérons une simulation en mécanique des fluides qui utilise un maillage à base d'éléments triangulaires comme support du calcul. Afin d'équilibrer la charge en vue d'une exécution parallèle sur 4 processeurs, on peut construire un graphe en associant un sommet à chaque élément du maillage, deux sommets étant connectés dans le graphe si les éléments sont adjacents dans le maillage. En partitionnant ce graphe en 4 parties, on en déduit le découpage du maillage ci-dessous.

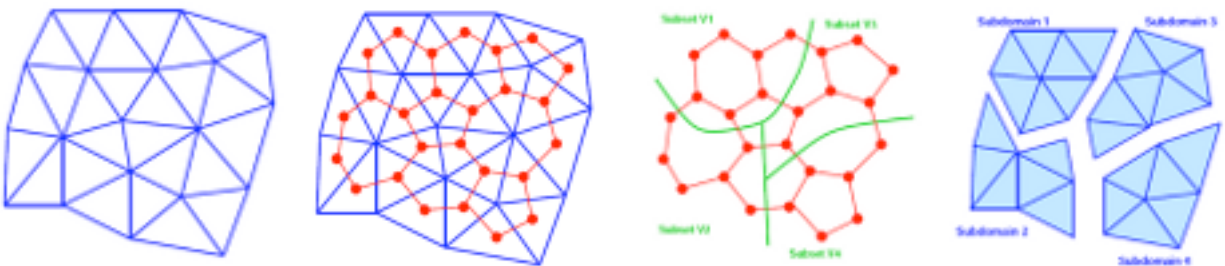
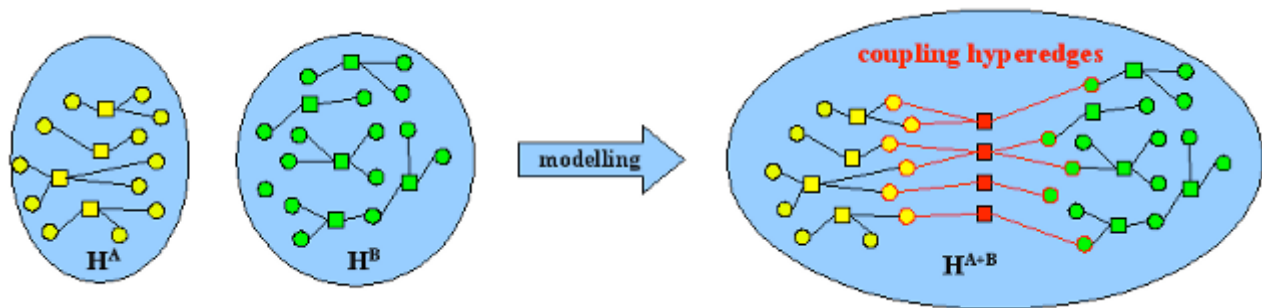


Figure extraite d'un article de Teresco, Devine et Flaherty.

De nos jours, les simulations numériques tendent à se complexifier, notamment en mixant plusieurs codes représentant des physiques différentes ou des échelles différentes. On parle alors de couplage de codes multi physiques ou multi échelles. L'exemple le plus fameux dans ce domaine est très certainement le cas des simulations en climatologie qui interconnectent de multiples codes modélisant les océans, l'atmosphère, les glaces aux pôles, *etc.* Dans ce contexte, le problème de l'équilibrage de charge devient également plus difficile, car il ne s'agit plus d'équilibrer chacun des codes séparément, mais l'ensemble de ces codes pris dans leur globalité et en particulier au niveau des processeurs travaillant dans la zone de couplage. Par ailleurs, la nature des codes couplés (structure de données, calculs associés) pouvant être très différente, il est important de considérer ce problème de manière générique par une modélisation appropriée : le graphe ou l'hypergraphe de couplage.



Exemple de modélisation des codes couplés A et B à l'aide d'un hypergraphe de couplage.

Dans l'équipe HiePACS, nous nous intéressons au développement de nouvelles méthodes algorithmiques pour l'équilibrage des codes couplés. Une première stratégie d'équilibrage a été mise en œuvre dans la bibliothèque LBC2 (Load Balancing for Code Coupling). Cette stratégie donne des résultats encourageants pour des cas simples en 2D, mais il faut généraliser et valider cette méthode pour des géométries plus complexes en 2D et 3D. D'autres stratégies d'équilibrage pourront être imaginées. Au final, ces travaux de thèse seront intégrés dans une "vraie" simulation multi échelle en physique des matériaux, couplant un modèle atomique et un modèle continu d'élasticité. Des expérimentations en vraie grandeur devront être menées sur une plate-forme de calcul haute performance disposant d'un grand nombre de cœurs de calcul.

Mot-clés : parallélisme, simulation numérique, couplage de codes, partitionnement, graphe, hypergraphe, MPI.

Références :

- Scotch : <http://scotch.gforge.inria.fr>
- Metis : <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>
- Zoltan : <http://www.cs.sandia.gov/Zoltan/Zoltan.html>
- PaToH : <http://bmi.osu.edu/~umit/software.html#patoh>
- Mondrian : <http://www.math.uu.nl/people/bisseling/Mondriaan/mondriaan.html>