



FRANCE
GRILLES



Journées **SUCES**

Rencontres

Scientifiques des Utilisateurs de Calcul intensif, de Cloud Et de Stockage

PARALLÉLISATION OPENMP D'UN CODE GRANULAIRE POUR DES APPLICATIONS DU GÉNIE CIVIL

Journée SUCCESS 2015, 06/11/2015, Paris



Patrick Pizette

patrick.pizette@mines-douai.fr

Enseignant-chercheur

Département Génie Civil et Environnemental



**Coordinateur sous-thème Modélisation par
éléments discrets de l'axe 1 du LGCgE**

**Laboratoire régional de Génie Civil et géo-
Environnement Lille Nord de France**

<http://www.lgcge.fr/>

SOMMAIRE

Contexte : matériaux granulaire du génie civil (GC)

Modélisation par éléments discrets : principes et applications GC

Contexte et besoin en HPC

Formation et moyen mis en œuvre

Résultats de parallélisation en mémoire partagée

Conclusion, action en cours et perspectives



Matériaux du génie civil

Granulaire sec



*Granulaire partiellement saturés /
Suspension concentrée*



*Matériau durci
Béton*



→ **Matériaux Granulaires +/- saturées en eau**

→ **Matériau durci poreux endommageable**

Contexte du recyclage

Problématique → diminution de la consommation des granulats naturels

Exemple en France (Livre blanc de UNPG (producteur de granulats))

Granulats issus des ressources naturelles 5,4 tonnes par personne

Granulats issus du recyclage : 400 kg par personne



MIDND



Sédiment



Recycled Concrete
Aggregate

- Forte Hétérogénéité
- Grande Variabilité (site de production, évolution dans le temps des process)

→ Exacerbe l'effet
comportement « granulaire »

Paradoxe du recyclage

▶ Directive cadre déchet 2008 (Directive n°2008/98/CE) : sous-produit ou issus du recyclage

➤ **objectifs chiffrés de recyclage, de récupération et de valorisation sont fixés à l'échéance de 2020 :**

- réemploi et recyclage des déchets ménagers (papier, métal, verre et plastique) → minimum de **50 %** en poids global
- réemploi, recyclage et la valorisation matière **des déchets de construction et de démolition** → **70 % en poids**

Problématique → ↓ de la consommation des granulats naturels pour le GC alors que l'ensemble de la profession fait appel à un corpus normatif adapté pour les granulats naturels

▶ Axe de recherche du laboratoire : de l'échelle labo vers les applications industrielles

2006 - Route à base de sédiment (COLAS)



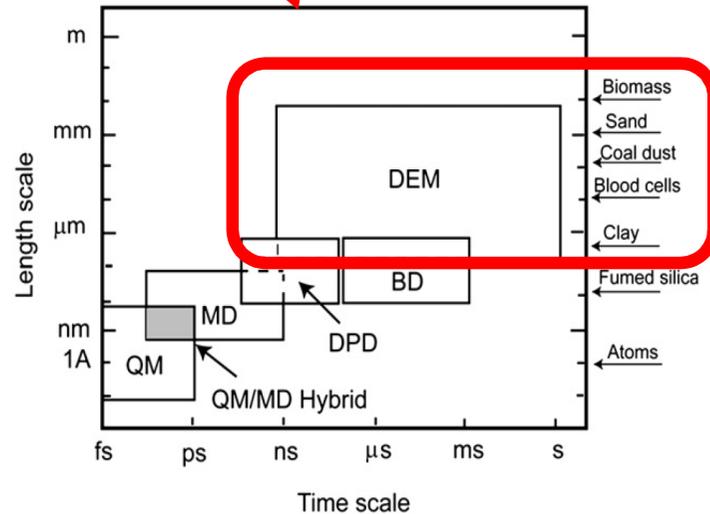
2014 – Chaire industrielle ECOSÉD (Economie Circulaire des Sédiments), Mines Douai (14 partenaires, Pr Abriak)



Questionnement : soutien du calcul scientifique?

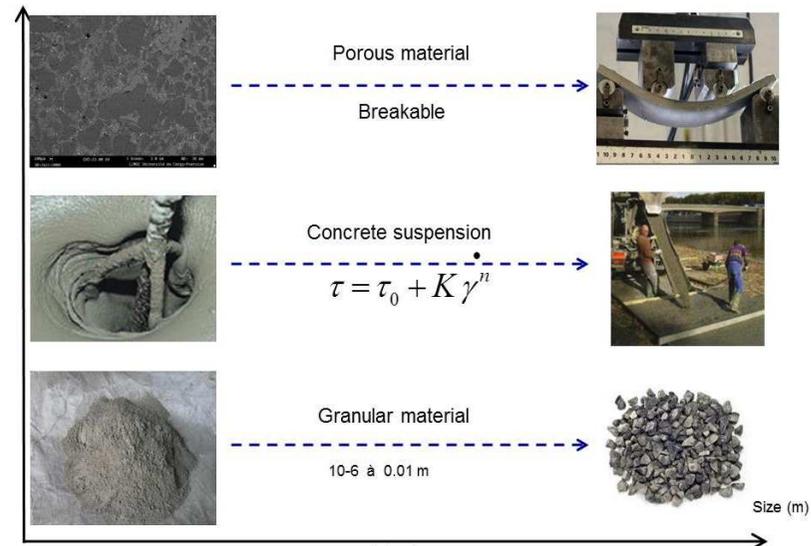
Approche particulaire

Granular media



QM : Quantum méthode
MD : Molecular dynamic
DPD : Dissapitive Particule Dynamic
BD : Browien Dynamic

Ex. béton dépendance en temps et en échelle

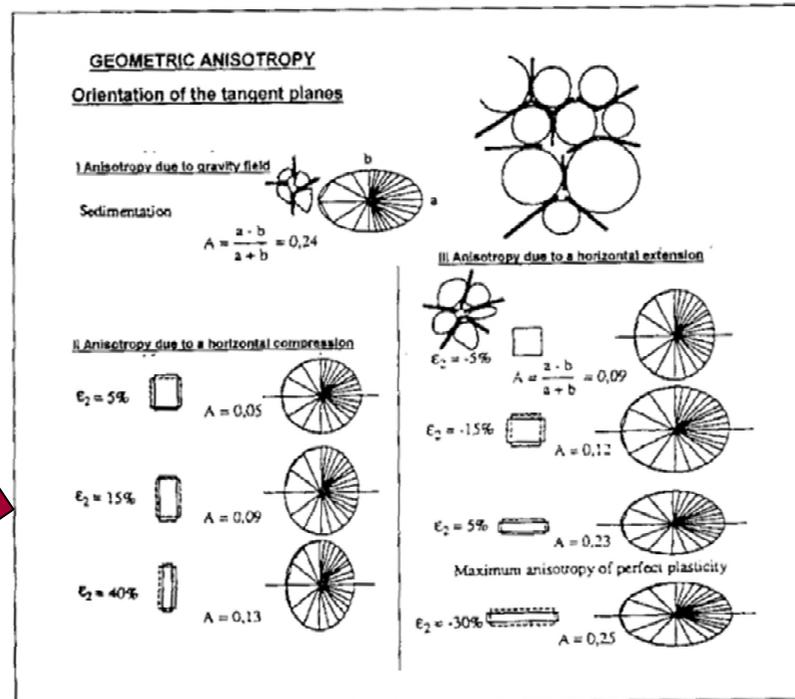


Composition parameters
processing

Global
properties

Objectifs à long terme : lien entre les propriétés macroscopique et les propriétés granulaires

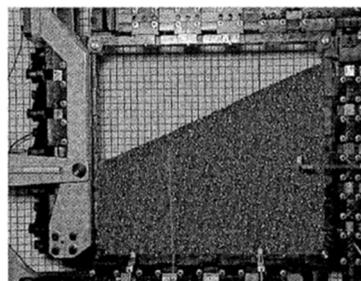
Modélisation à l'échelle des grains



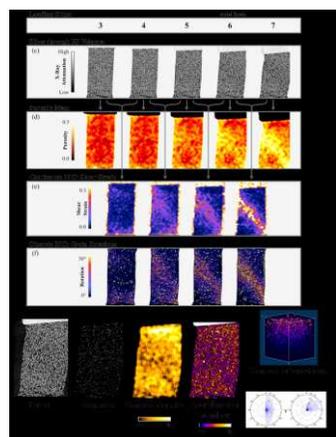
Approche expérimentale

Approche calcul numérique

Fig.I.4 : Représentation de l'anisotropie induite d'un milieu granulaire bidimensionnel (Biarez, 1962)

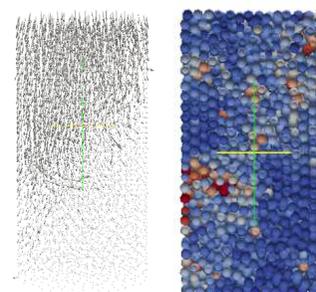


Schneebeli
2ε1γ



Microtomographie

(Exemple Laboratoire L3S (grenoble))



Ex. code demGCE

POWDERS & GRAINS

Ex. code dp3D

Contexte : matériaux granulaire du génie civil (GC)

Modélisation par éléments discrets : principes et applications GC

Contexte et besoin en HPC

Formation et moyen mis en œuvre

Résultats de parallélisation en mémoire partagée

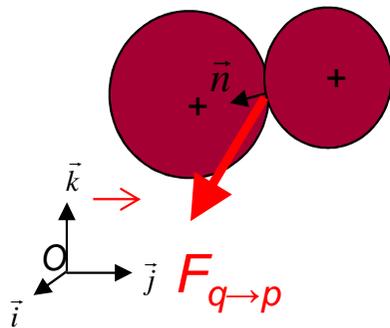
Conclusion, action en cours et perspectives



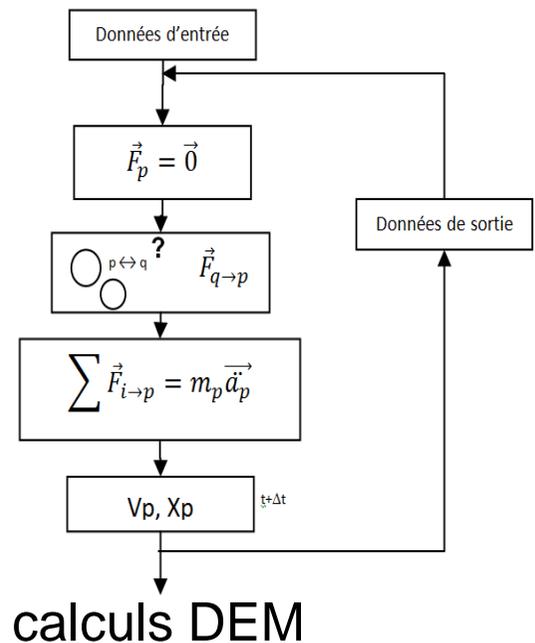
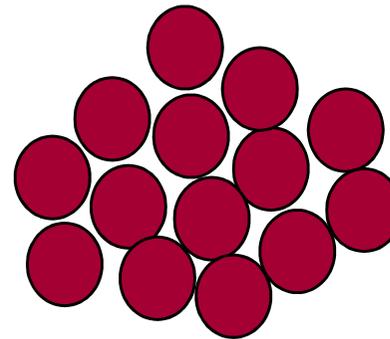
Méthode des éléments discrets (DEM : Discrete Element Method)

► Principe général

- Initialement développé par Cundall (1979) approche géotechnique (2D)
- Chaque particule est modélisée distinctement
- Représentation du matériau → collection de particules
- Gestion individuelle des interactions entre les particules
- Développement d'un code « maison » orienté applications GC



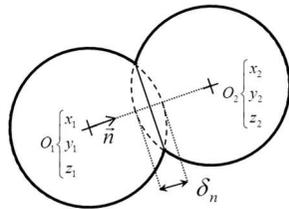
Loi d'interaction à l'échelle des grains



Boucle de calculs DEM

Hypothèses

► Approche “Smooth” DEM



$$\delta_n = |x_i - x_j| - R_i - R_j$$

→ Magnitude de l'interpénétration est relié à la force de contact et aux moments via les Lois d'interaction

► Lois d'interaction (ex. Forces de contact)

- Force normale

$$\vec{F}_{n,2 \rightarrow 1} = -\frac{4\sqrt{R^*}}{3} \left(\frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \right)^{-1} \left(\delta_n^{3/2} + \frac{A_1 + A_2}{2} \dot{\delta}_n \sqrt{\delta_n} \right) \cdot \vec{n}$$

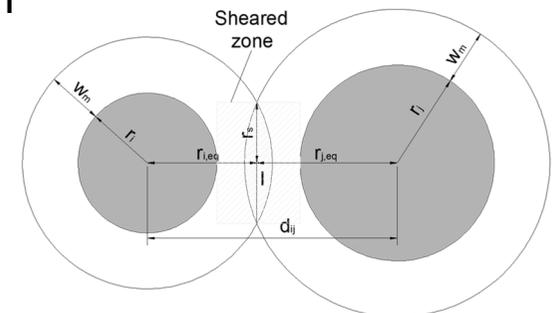
Elastic part : Hertz model
Viscous part : Pöschel and Schwager model (2005)

- Force tangentielle (Mindlin & critère de coulomb)
- Résistance aux roulements → counteract the rolling and twisting motions

$$T_{ij}^{roll} = -\mu_{roll} \times F_{n,ij} \times R^* \times \frac{\vec{\Omega}_{rel}}{|\Omega_{rel}|}$$

- Possibilité d'adapter les lois d'interaction : exemple béton

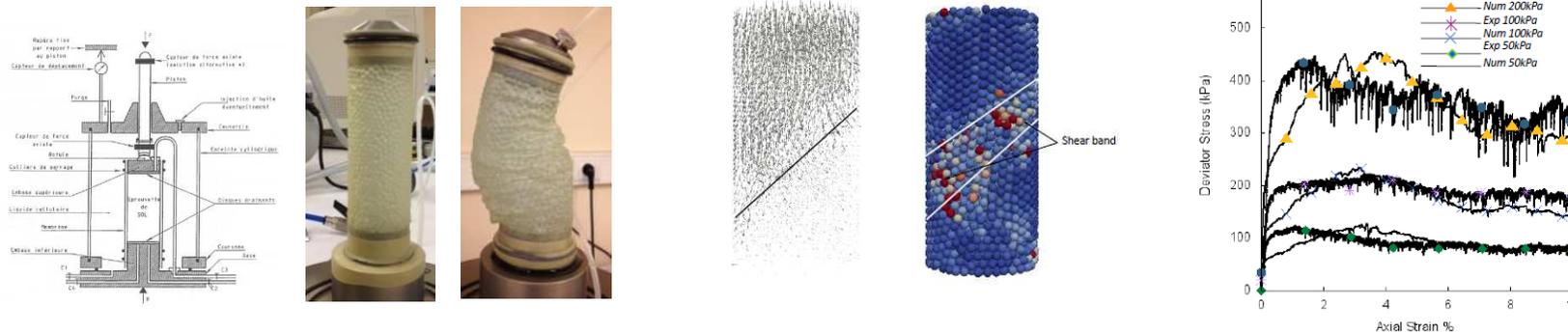
Une sphere → granulat brut entouré d'un mortier fluide



Applications : Essais de laboratoire

Approches expérimentale et numérique sur matériau modèle

- **K. WU (2015)** → DEM mis en œuvre pour simuler l'essai triaxial et voir application matériau hétérogène (Université Hohai et Mines Douai)



- **K. EL-CHEIKH (2015)** → DEM utilisé pour modéliser le frottement d'un milieu granulaire sur une paroi rugueuse 24/03/2015 (application problème d'interface béton / paroi)

Objectif : Etude des mécanismes à l'échelle granulaire près de l'interface milieu granulaire – paroi.

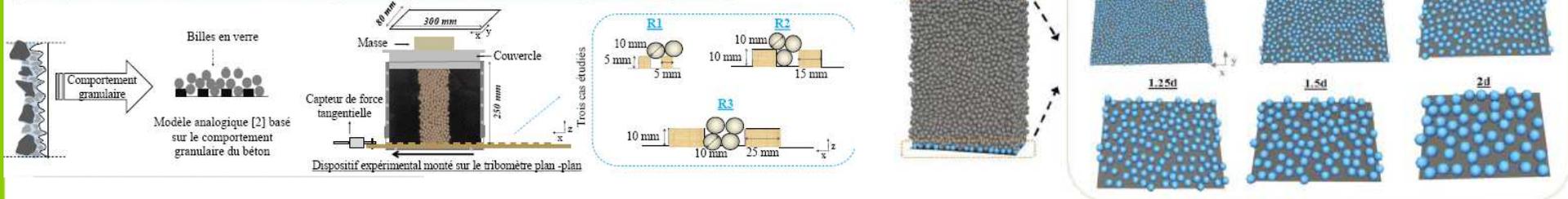


Figure 4: Roughness surfaces modeled by a packing of spherical boundary conditions.

Applications : Simulation de chantier

► Test de chantier pour tester la consistance du béton frais

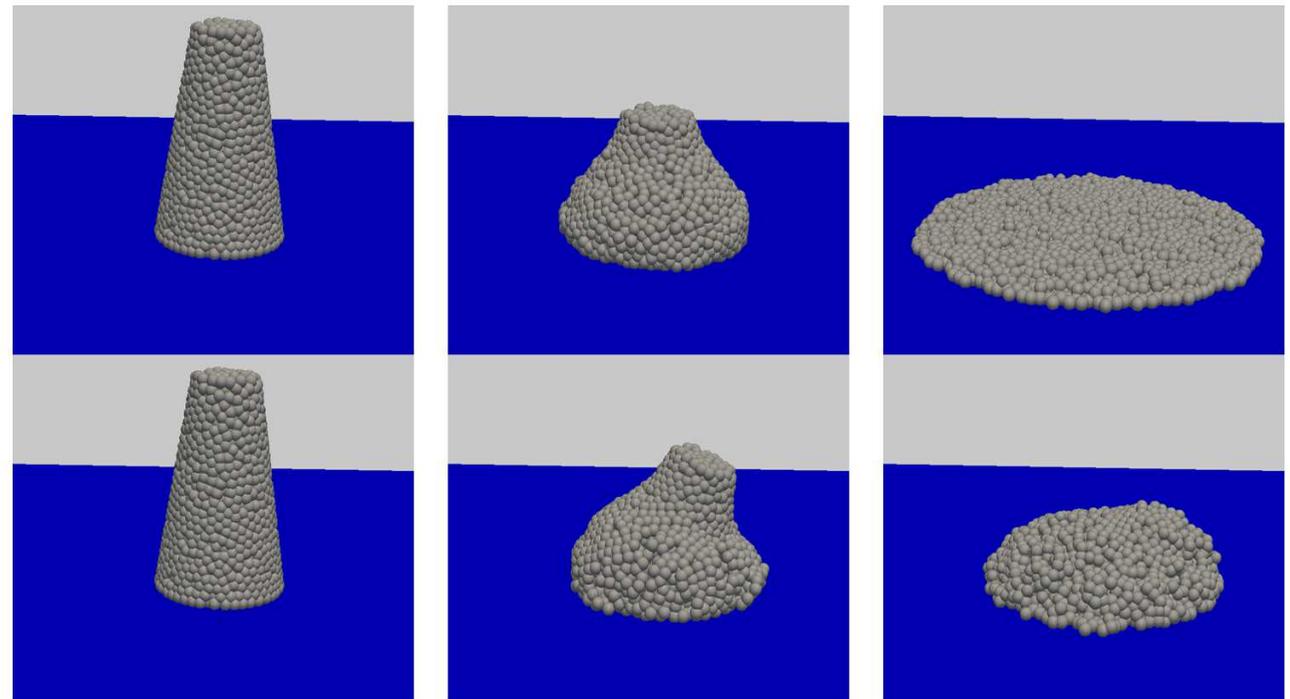
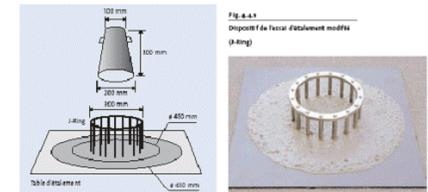


Figure 7 : 3D views of slump test simulations with $\tau_{0,m}=10$ (top) or 500 (bottom) Pa, and $\mu_m=10\text{Pa}\cdot\text{s}$

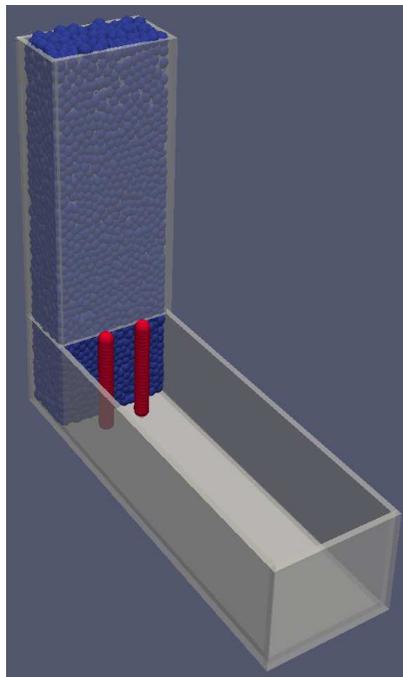
S. Rémond, P. Pizette, *A DEM hard-core soft-shell model for the simulation of concrete flow*, Cement and Concrete Research, may 2014

Applications

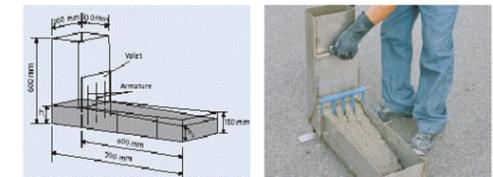
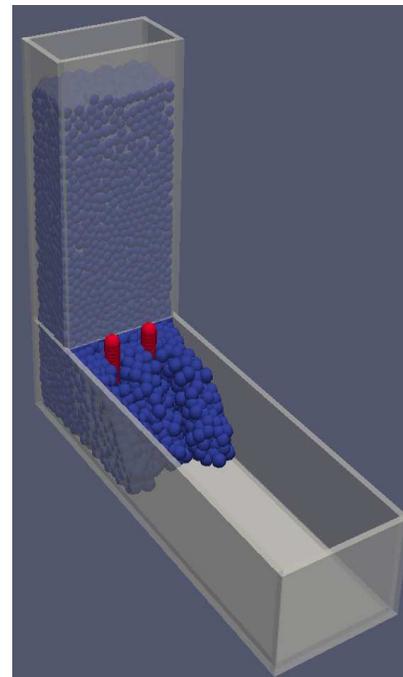
► Exemples : simulation des situations de blocage



Essai d'affaissement avec et sans J-Ring (milieu bidisperse $R_2/R_1=4$, 15000 particules)



Essai à la
boite en L



Contexte : matériaux granulaire du génie civil (GC)

Modélisation par éléments discrets : principes et applications GC

Contexte et besoin en HPC

Formation et moyen mis en œuvre

Résultats de parallélisation en mémoire partagée

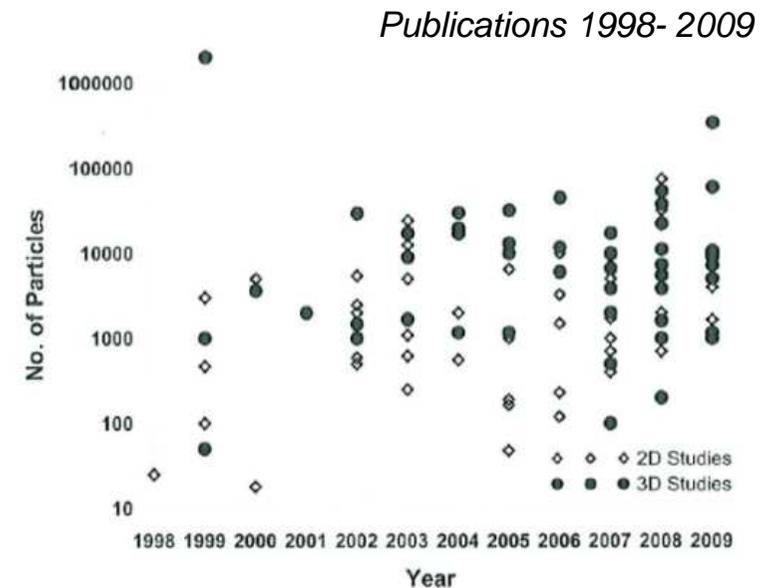
Conclusion, action en cours et perspectives



Besoins en calcul hautes performances

►► Granulaires utilisés en GC (bétons et sols)

- Grande étendue granulaire (du μm au cm)
- Géométrie complexe (représentation de formes complexes)



Particulate DEM, A geomechanics Perspectives, O'Sullivan 2011

Ex. Sable fin
 $\varnothing 200 \mu\text{m}$
 1 cm^3



150 000
particules



VS



Enjeux de la DEM appliquée aux matériaux du génie civil → nombre d'éléments...

Contexte du développement



► Vie du code « maison » demGCE

- Thèse S. Rémond (1998) avec **CEMHYD3D**, code développé au NIST (USA) dédié à l'étude de la microstructure et l'hydratation du ciment, puis extraction de certaines fonctions de **CEMHYD3D** pour faire de la génération aléatoire d'empilements granulaires puis introduction de la DEM (code séquentiel, en C)

Mines Douai

- **2010** : Première thèse à Mines Douai par Adolphe Kimbonguila sur l'Etude de l'agglomération des fines minérales en suspension (2013, Adolphe Kimbonguila)
- **2011** : Gestion de la vie du code → objectif : **développement d'un code collaboratif au niveau de notre laboratoire**
 - Mise en place d'un système basique de gestion de versions
 - Organisation du code : programmation modulaire, allocation dynamique, notice, scripts ssh pour le post-traitement
 - Travail sur les lois de contact « mécanique du solide »
 - soutien aux étude du cisaillement d'un milieu granulaire à l'interface (Thèse K. El Cheikh) et cisaillement d'un milieu granulaire (T. Kai Wu)
- **2014** : Travail sur la parallélisation du code (P. Pizette) – soutien ingénieurs de calcul de la Maison de la simulation (CEA – CNRS - INRIA) → objectif vers une version // du code

Contexte : matériaux granulaire du génie civil (GC)

Modélisation par éléments discrets : principes et applications GC

Contexte et besoin en HPC

Formation et moyen mis en œuvre

Résultats de parallélisation en mémoire partagée

Conclusion, action en cours et perspectives



FORMATION



- ▶ **FORMATION CALCUL PARALLELE (OPENMP et MPI , 2 jours) (2012, Mesocentre du CRIHAN)**

- ▶ **Participation à la Formation DEBOGAGE : méthode et Outil (2013, MDIS)**
 - Formation aux techniques de débogage en séquentiel et en parallèle
 - Présentation des outils les plus courants, et mise en œuvre pratique
 - programmation séquentielle jusqu'à la programmation parallèle (MPI et OpenMP)

- ▶ **Support INSMI - MDIS (2013-2014)**
 - Appel à projets «parallélisation» à la Maison de la Simulation (INSMI, le groupe Calcul et la Maison de la Simulation (MdS))
 - 1 à 2 semaines d'aide à l'optimisation (MDIS : Julien Derouillat et Pierre Kestener)

Moyen de calculs



▶▶ Cluster de l'Ecole des Mines de Douai (CHAPO)

- 70 nœuds de calcul (6000 GFlops), dont 30 AMD Opteron (8cœurs 16G RAM), 30 XEON 5550 (8 cœurs 24 à 48G RAM) et 10 XEON 5650 (12 cœurs 48G RAM)
- Serveur beegfs de 40To en 10Gb
- Extension prévue d'ici fin d'année, 5 Xeon E5-2630v3 (16 cœurs 64G RAM), Serveur de sauvegarde de 40 To
- Principaux softs: Abaqus, Starccm+, OpenFOAM, Ansys Fluent, Code Saturne, Matlab

▶▶ Cluster via la Maison de La Simulation - Equip@meso (POINCARE)

- 92 nœuds de calculs équipés (2 processeurs Sandy Bridge E5 2670 (2.60GHz, 8 cœurs par processeur, soit 16 cœurs par nœud)
- Accès Vtune (intel)
- Rq : nœud GPU (utilisation pour tester des codes DEM GPU en 2015)

Contexte : matériaux granulaire du génie civil (GC)

Modélisation par éléments discrets : principes et applications GC

Contexte et besoin en HPC

Formation et moyen mis en œuvre

Résultats de parallélisation en mémoire partagée

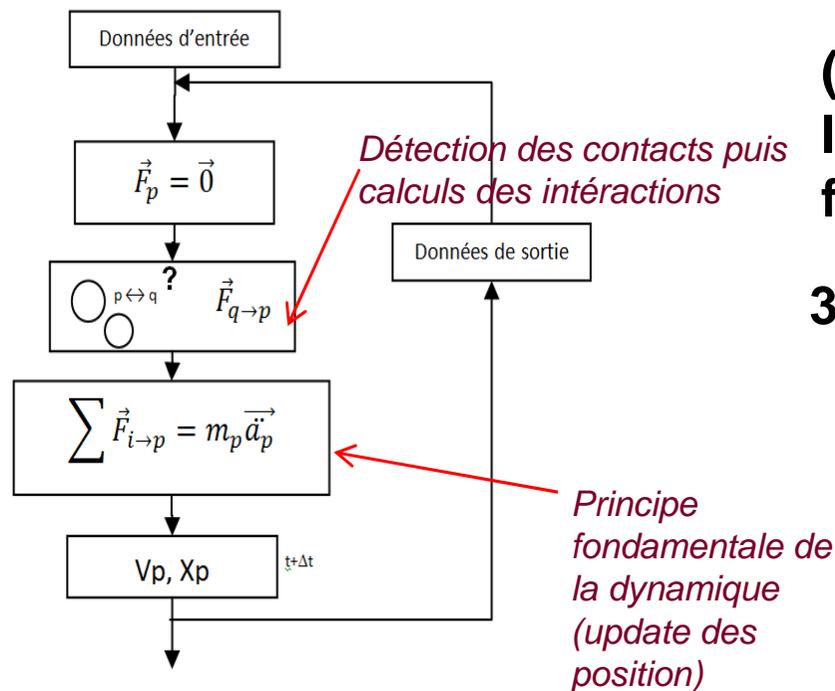
Conclusion, action en cours et perspectives



Stratégie mise en œuvre

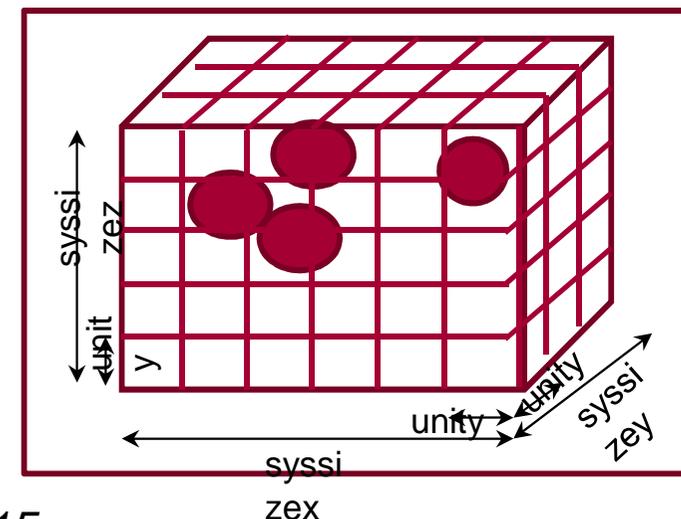
1 - Identification des fonctions consommatrices en temps de calcul

(gestion de la détection des contacts entre les particules très consommatrice en temps de calcul)



2 – Travail sur l'organisation du code (structuration des données) et de l'indépendance des opérations et des fonctions (code était pensé en séquentiel)

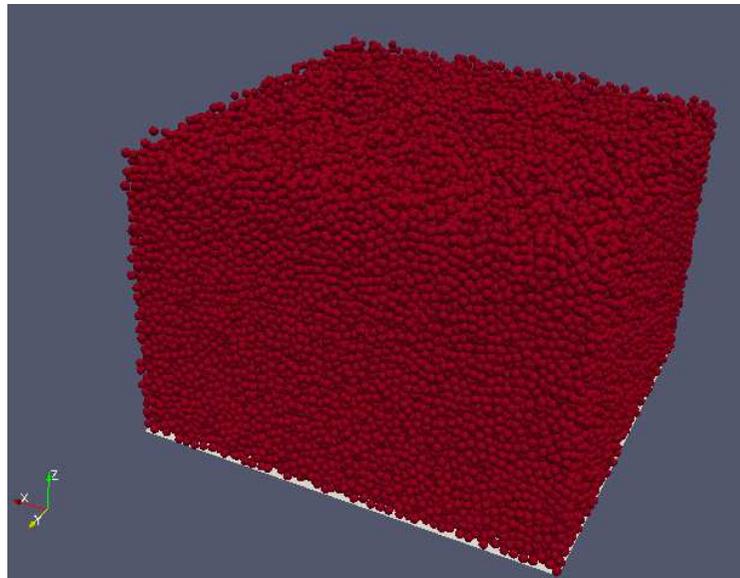
3 – Optimisation des boucles via OPENMP



MDIS : Julien Derouillat et Pierre Kestener

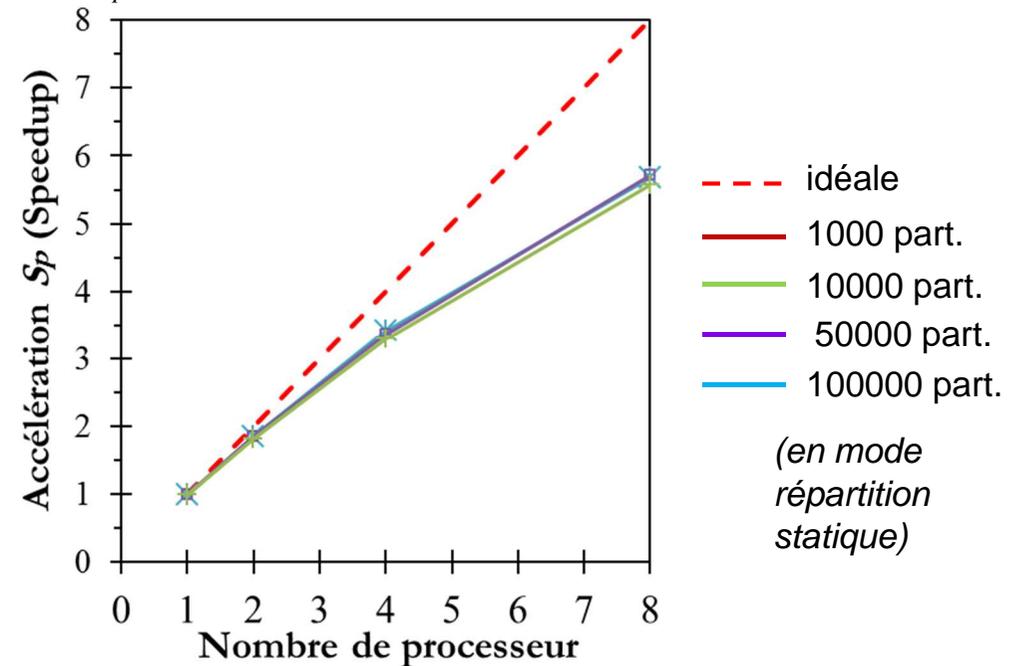
Résultats de parallélisation

► Cas tests : densification d'un empilement de grains sans contact initial



100 000 grains

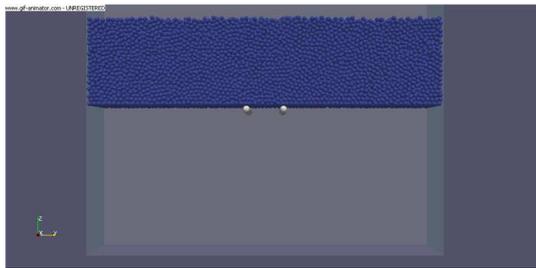
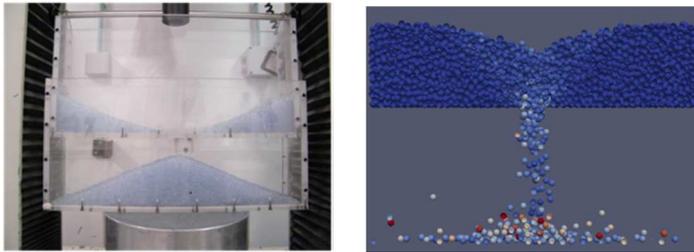
$$S_p = \frac{T_{seq}}{T_p}$$



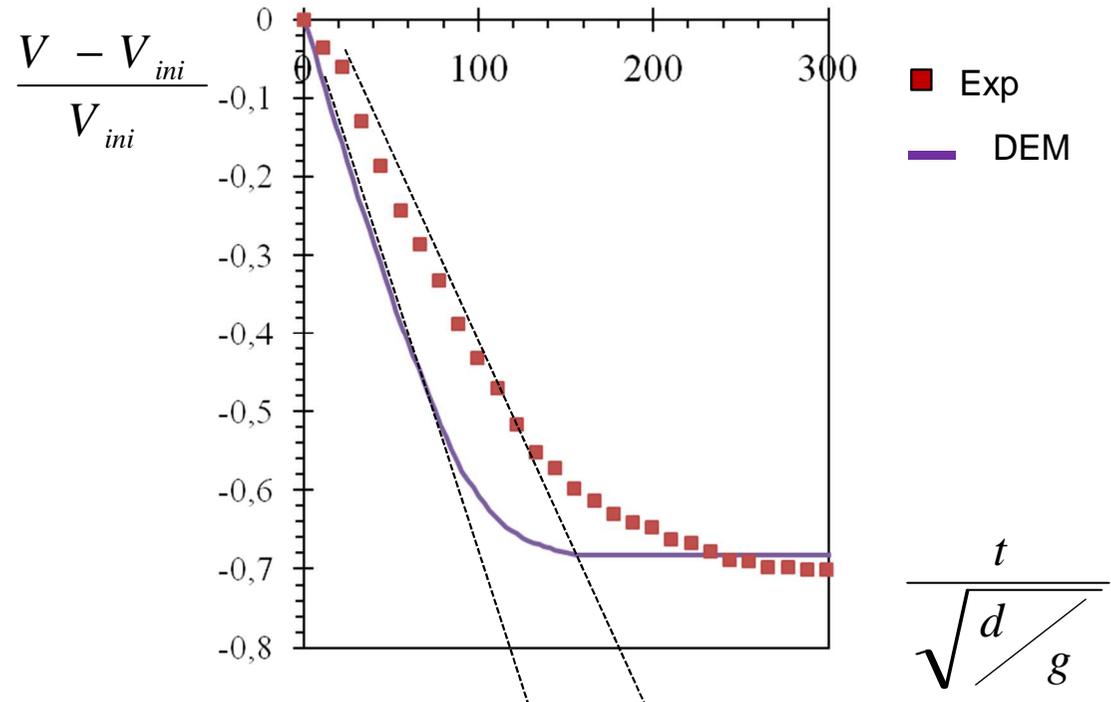
MDIS : Julien Derouillat et Pierre Kestener

Premières applications

► Ecoulement de granulaire (écoulement et quasi statique)



Écoulement milieu granulaire (ex. 20000 grains – 3D)



Physique : débit constant (→ Possibilité de tests loi de Beverloo, comportement typique milieu granulaire)

Point très + : scalabilité de 3 à 4 en pratique

Rq : pas de déploiement du code optimisée aux doctorants à leur fin de thèse (changement d'habitudes, code a dû être « démonté », doctorant « GC », etc.)

Contexte : matériaux granulaire du génie civil (GC)

Modélisation par éléments discrets : principes et applications GC

Contexte et besoin en HPC

Formation et moyen mis en œuvre

Résultats de parallélisation en mémoire partagée

Conclusion, action en cours et perspectives



Conclusion, action en cours et perspectives

- ▶ **Projet à la MDIS → optimisation du code**
 - Gain de scalabilité conséquent
 - A nécessiter d'enlever des fonctionnalités, de repenser des fonctions
 - Questionnement sur l'extensibilité et la conception du code d'un point de vue informatique
- ▶ **Action en cours : apport de l'ingénierie logicielle (aide de la société LOGILAB & dpt IA Mines Douai)**
 - Diagramme d'activité, diagramme de classes,...
 - Passage C → C++ en cours,...
- ▶ **Tests d'autre approche (via GPU)**

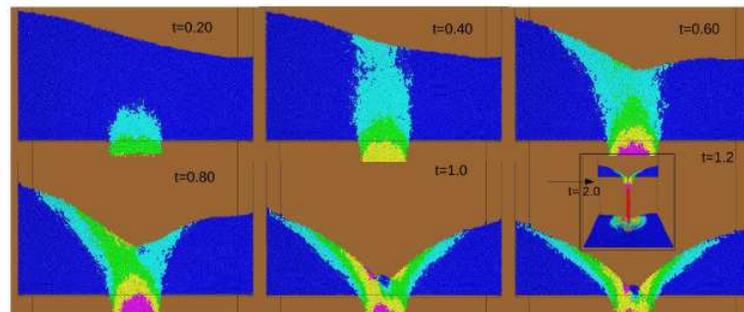


Figure 7: Flow discharge patterns for large-scale simulation colored by velocity.

N. Govender, P. Pizette, D N Wilke, N-E Abriak, (session High Performance Computing for Particle Methods, conférence PARTICLES 2015)