

Offre de post-doctorat: INTégration de lois de COmportement MécaniquE sur GPU

Yushan Wang, Thomas Helfer, Lionel Gélébart, Raphaël Prat
1/07/2022

Nous proposons un post-doctorat sur l'intégration de lois de comportement mécanique sur GPUs pour la période 2022/2023 à la Maison de la Simulation.

Contexte

Le CEA/DES, en collaboration avec la Maison de la simulation, développe des outils de simulation avancés en mécanique non linéaire du solide.

L'étape d'intégration des lois de comportement mécanique a un impact fort sur la robustesse et les temps de calcul de ces codes. Elle est également un verrou majeur pour la conception de codes de mécaniques non linéaires massivement parallèles. On constate ainsi jusqu'à 80% du temps de calcul dans certains cas de lois de comportement complexes, notamment sur des simulations de plasticité cristalline basées sur la dynamique des dislocations réalisées avec le code AMITEX_FFTP [1, 2].

Le générateur de code *open-source* MFront, co-développé par le CEA et EDF, est dédié à l'implantation de ces lois de comportement[3]. Récemment, le projet MGIS a été développé pour simplifier l'intégration de MFront dans de nombreux solveurs et proposer des structures de données efficaces [4].

Le couple MFront/MGIS est utilisé par une large communauté regroupant académiques et industriels dans de nombreux domaines qui dépassent largement le domaine nucléaire. Plus d'informations sur ces projets peuvent être trouvées sur leurs sites web respectifs [5, 6] et sur leurs pages ResearchGate [7, 8].

Objectifs du post-doc

Les lois générées par MFront traitent un unique point d'intégration et s'exécutent aujourd'hui sur les unités de calcul traditionnelles, les CPUs. Au vu de l'évolution des supercalculateurs, à savoir que 70% des 500 supercalculateurs les plus rapides fin 2020 sont basés sur des GPU, la capacité à réaliser des calculs sur ce type d'architecture devient un enjeu beaucoup plus fort qu'auparavant, notamment pour le passage à l'exascale.

Le portage sur GPU nécessite d'implémenter de nouveaux algorithmes afin de traiter en parallèle directement des groupes de points d'intégration, de nouvelles structures de données adaptées au GPU et une attention particulière doit être portée pour minimiser les

transferts d'information Host / Device. Il est donc primordial de considérer le couple MFront/MGIS dans son ensemble.

Dans le cadre d'un post-doctorat, le projet PTC-SIMU utilisera le code AMITEX_FFTP comme support des développements menés autour de deux thématiques :

- Evaluer la pertinence de l'intégration des lois de comportement sur GPUs sur des cas de complexité croissante, allant de lois triviales à des lois de plasticité cristalline réalistes. Cette étape permettra d'évaluer différentes technologies (SYCL, Kokkos, CUDA, HIP, HPX, OpenAcc, etc.) en terme d'efficacité et de maintenabilité. Cette étape s'appuiera sur la bibliothèque tensorielle TFEL/Math utilisée par MFront qui a déjà été partiellement portée sur GPUs.
- Mettre en place une implémentation générique de ce portage, en s'appuyant sur le couple MFront/MGIS. Des structures de données adaptées seront proposées dans MGIS et assureront les transferts de données entre CPU et GPU.
- La mise en place dans un code de production AMITEX_FFTP sera envisagée très tôt, de même que l'identification de simulations d'intérêt (composites à particules, polycristaux, matériaux à propriétés continûment variables...) pour valider les développements réalisés. On envisagera le cas où la loi de comportement fait l'objet d'un traitement en bloc à chaque pas de temps (c.à.d. les opérateurs ne sont pas entremêlés à grains fins ce qui complexifierait les interfaces).

Profil recherché

Nous recherchons des candidats motivés par la réalisation de calculs hautes performances sur GPUs et compétents en développement de codes numériques en C++. Des compétences en calculs GPUs et/ou en développement de codes de mécanique du solide constitueraient des éléments appréciables.

Localisation

Le post-doctorat se déroulera à la Maison de la Simulation (UAR 3441, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex).

Postuler

Les candidats peuvent envoyer leurs candidatures aux adresses suivantes: thomas.helfer@cea.fr, yushan.wang@cea.fr.

Bibliographie

[1] Lionel Gélébart, Julien Derouillat. AMITEX_FFTP - Simulations FFT massivement parallèles en mécanique des matériaux hétérogènes. 13e colloque national en calcul des structures, Université ParisSaclay, May 2017, Giens, Var, France. fhal-01923683f

[2] <https://amitexfftp.github.io/AMITEX/>

[3] Helfer, Thomas, Michel, Bruno, Proix, Jean-Michel, Salvo, Maxime, Sercombe, Jérôme et Casella, Michel. Introducing the open-source mfront code generator: Application to mechanical behaviours and material knowledge management within the PLEIADES fuel element modelling platform. *Computers & Mathematics with Applications*. Septembre 2015. Vol. 70, no. 5, p. 994-1023. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0898122115003132>

[4] Helfer, Thomas, Bleyer, Jeremy, Frondelius, Tero, Yashchuk, Ivan, Nagel, Thomas et Naumov, Dmitri. The “MFront Generic Interface Support” project. *Journal of Open Source Software*. 2020. Vol. 5, no. 48, p. 2003. DOI 10.21105/joss.02003. Available from: <https://doi.org/10.21105/joss.02003>

[5] <https://thelfer.github.io/tfel/web/index.html>

[6] <https://thelfer.github.io/mgis/web/index.html>

[7] <https://www.researchgate.net/project/TFEL-MFront>

[8] <https://www.researchgate.net/project/MGIS-MFrontGenericInterfaceSupport>