

Plan de Trabajo

Título: “Técnicas de Descomposición de Dominio para problemas caracterizados por procesos no-lineales localizados”

1. Objetivos

Objetivo general: se desarrollarán técnicas numéricas destinadas a la resolución de problemas de interés ingenieril, poniendo especial énfasis en el rendimiento computacional en computadoras paralelas y consecuente reducción del tiempo requerido para obtener la solución. Un aspecto primordial es que las técnicas a implementar sean suficientemente robustas, y la implementación posea flexibilidad y mínima invasividad, de tal manera que se puedan incorporar fácilmente a una plataforma computacional de cálculo por elementos finitos existente. Al final del doctorado se espera obtener como producto una herramienta computacional que pueda resolver de manera robusta problemas no lineales caracterizados por poseer no linealidades concentradas, las cuales deterioran la condición del problema y la convergencia.

Objetivo específico: Desarrollar solvers basados en métodos de descomposición de dominios, que demuestran un buen rendimiento en arquitecturas de memoria distribuida. La implementación estará orientada a permitir el tratamiento de un número elevado de ecuaciones e incógnitas (orden 10^8). Se considerarán en particular los métodos tipo FETI (Finite Element Tearing and Interconnect). Además, se estudiará la posibilidad de incorporar comportamientos de carácter multi-escala en el tiempo combinando métodos multi-rate y métodos de descomposición de dominios.

2. Antecedentes

La utilización de computadoras para simular problemas físicos está ampliamente extendida debido a que ayuda a comprender la naturaleza de los fenómenos estudiados y a diseñar experiencias orientadas a la optimización de procesos industriales. Se puede notar un crecimiento paralelo entre el incremento en el uso de computadoras para estudiar problemas físicos, y el incremento en la complejidad de las formulaciones utilizadas para modelar estos problemas. Por ejemplo, últimamente se reconoce un progresivo interés en la formulación de modelos que tomen en cuenta el carácter multi-escala de los fenómenos físicos. Este interés responde al hecho de que considerar la interacción de diferentes escalas, permite describir respuestas materiales más complejas sin descansar tanto en leyes altamente fenomenológicas. A esto hay que agregar que para que las soluciones numéricas obtenidas sean confiables, muchas veces se requiere el modelado multi-físico del problema. A pesar de la potencia de cálculo disponible, la descripción multi-física y multi-escala de fenómenos físicos es tan costosa que hace necesario desarrollar técnicas y formulaciones que hagan tratables este tipo de problemas desde el punto de vista de la complejidad computacional.

Para reducir los tiempos de simulación de problemas complejos es necesario utilizar y desarrollar técnicas de computación de alto rendimiento que hagan uso eficiente del hardware disponible. Se pueden encontrar diferentes arquitecturas de computación de alto rendimiento, entre ellas multiprocesadores de paso de mensajes y arquitecturas de memoria compartida. En el caso de multiprocesadores de paso de mensajes se debe utilizar alguna técnica de subestructuración o descomposición de dominios que garantice el buen condicionamiento del problema. Sin embargo, se debe tener en cuenta que garantizar el buen condicionamiento de problemas mecánicos de materiales elasto-plásticos no es una tarea sencilla y hay mucho por investigar.

Durante una beca doctoral realizada en nuestro instituto se ganó experiencia en la programación de arquitecturas de memoria compartida, con la paralelización del software de Multi-física Oofelie [1]. El conocimiento adquirido en este proceso permitió a su vez paralelizar la implementación de las técnicas de reducción presentadas en [2, 3] (otro tipo de método numérico destinado a atacar el alto costo computacional). Adicionalmente, se estuvo trabajando con técnicas de computación de alto rendimiento en el contexto de multiprocesadores de paso de mensajes [4], lo que posibilita tener una visión global del problema en lo que respecta a la Mecánica Computacional de Alto Rendimiento.

En los trabajos [5, 6, 7, 2, 8], realizados en nuestro instituto, se trabajó en distintos aspectos de la simulación de procesos de soldadura con aporte de material. En ellos se identifica la necesidad de realizar análisis 3D, el cual se evaluó como algo imposible de resolver adoptando solvers directos para los sistemas de ecuaciones resultantes. Es necesario observar que la adopción de solvers iterativos que presenten un mejor rendimiento computacional que los solvers directos no es sencillo, ya que los primeros no son tan robustos a problemas mal condicionados como los segundos. Es importante notar que los problemas de soldadura se caracterizan por procesos no-lineales localizados que contribuyen a obtener sistemas de ecuaciones altamente mal condicionados.

Una posible alternativa para lidiar de manera eficiente con problemas mal condicionados y de grandes dimensiones es utilizar técnicas de descomposición de dominios, siendo la familia de métodos FETI (Finite Element Tearing and Interconnect) [11, 12] una alternativa interesante que aporta robustez y escalabilidad. Básicamente, estos métodos se basan en descomponer el dominio de análisis en subdominios e imponer la continuidad de la solución en la interfaz entre subdominios utilizando multiplicadores de Lagrange. Así, cada problema local se resuelve utilizando solvers directos y el problema en la interfaz se trata con solvers iterativos.

En este contexto, se han hecho recientemente interesantes contribuciones dirigidas a optimizar la robustez de solvers basados en FETI y a explotar ciertas características del problema físico a resolver. Por ejemplo, Gosselet *et al.* [13] introdujeron el FETI simultáneo (S-FETI), cuyos conceptos se pueden extender a cualquier versión de FETI. La característica más interesante de S-FETI es que muestra una robustez muy buena frente a problemas con diferentes patrones de heterogeneidades materiales, que se sabe muy bien son la causa de deterioro de las propiedades de convergencia de métodos basados en FETI. El éxito de S-FETI se basa en el uso de múltiples direcciones de búsqueda en el método iterativo adoptado para resolver el problema de la interfaz. Esto resulta en mejores propiedades de convergencia y menores tiempos de cómputo cuando se lo compara a metodologías FETI estándar.

Para poder lidiar con problemas no-lineales en el contexto de formulaciones FETI se pueden mencionar dos alternativas: los métodos Newton-Krylov-FETI y nonlinear-FETI. En los métodos Newton-Krylov-FETI, la técnica FETI se aplica al sistema de ecuaciones linealizado [14]. Por lo tanto, las iteraciones no-lineales son de carácter global. En el caso de procesos no-lineales localizados, las iteraciones globales son innecesarias. Esto fue notado primero por Pebrel *et al.* [15], quienes propusieron el método nonlinear-FETI-1 para evitar las iteraciones no-lineales globales. Para mejorar el rendimiento, nonlinear-FETI-1 tienen en cuenta el comportamiento localizado de la no-linealidad del problema, y lleva a cabo iteraciones no-lineales localmente en cada subdominio. En un trabajo reciente, Klawonn *et al.* [16], basados en el trabajo de Pebrel *et al.*, propusieron extensiones no-lineales al método FETI-DP (FETI-Dual-Primal). Adicionalmente, puede acelerarse la convergencia de las iteraciones que realiza FETI para problemas no-lineales reutilizando el espacio de Krylov generado en pasos no-lineales anteriores, como se propone en [17, 18].

Dentro de nuestro instituto muchos grupos poseen experiencia en formulaciones multi-escala. Es interesante observar que el tipo de técnica descrito en este plan podría ayudar a reducir el tiempo de cómputo de formulaciones multi-escala, como ya lo han demostrado otros investigadores [19]. Es más, puede ayudar a introducir múltiples escalas temporales combinando ideas de descomposición de dominios e integradores multi-rate. Actualmente, este tema está tomando mucho interés en la comunidad de Mecánica Computacional como se puede apreciar en los trabajos [20, 21, 22, 23]. Sin embargo, estas técnicas aún no han demostrado poder utilizarse con problemas de grandes dimensiones, con lo cual es innovador estudiar esta problemática desde una perspectiva de Computación de Alto Rendimiento.

Hasta donde sabemos, no existen librerías de código abierto que implementen métodos FETI, salvo las librerías HPDDM [24] y PETSc [25]. HPDDM es una librería altamente templatizada (característica que puede llegar a ser contraproducente desde un punto de vista del diseño), y que recién se está iniciando por lo que no tiene soporte de herramientas para depurar el código o facilitar el desarrollo de nuevos métodos. Por el contrario, PETSc es una librería para cálculo científico que ya dispone de buena madurez y tiene herramientas que facilitan el desarrollo de nuevos métodos. Sin embargo, en PETSc sólo está implementado el preconditionador algebraico de FETI-DP. En este contexto, una buena opción consiste en implementar los métodos FETI desarrollados durante el curso de la investigación como extensiones a la librería PETSc. En parte ya se ha comenzado a desarrollar extensiones FETI a PETSc durante un proyecto de investigación que tuvo lugar en la Universidad Técnica de Munich en una estancia post-doctoral de uno de los integrantes de nuestro instituto.

3. Actividades y metodología

Las actividades a desarrollar durante el trabajo de investigación se estructurarán en tres *paquetes de trabajo* destinados a hacer frente al alto costo computacional de simulaciones numéricas de problemas de la ingeniería. Inicialmente, estas técnicas serán aplicadas a problemas de soldadura, pero gradualmente se comenzarán a estudiar problemas que se caractericen por no linealidades localizadas que generan una dinámica de alta frecuencia, como lo es un problema de fractura dinámica. En los primeros dos años, el becario deberá invertir la mayor parte del tiempo en realizar los cursos de doctorado. Simultáneamente se irá introduciendo en el estado de arte de la temática y comenzará a familiarizarse con PETSc, las extensiones FETI a PETSc, y con la plataforma computacional adoptada en el contexto del Proyecto de Unidad Ejecutora. Cabe notar que al implementar los métodos FETI como extensiones a PETSc, se estará haciendo un aporte nuevo a la comunidad de Mecánica Computacional, ya que no se dispone de librerías de código abierto que implementen una variedad amplia de métodos FETI. Se considera que el becario invertirá tiempo sólo en la programación de solvers FETI, que pueden ser solvers no-lineales e incluso integradores temporales, pero no implementará un modelo particular del problema físico a resolver, como puede ser el problema de soldadura o de fractura dinámica. Se supone que dichos modelos ya estarán implementados en la plataforma computacional adoptada por el instituto.

Luego de completar los cursos de doctorado, el becario estructurará su trabajo de acuerdo a los siguientes paquetes de trabajo:

- **Escalabilidad de solvers FETI existentes.** Es bien sabido que para problemas de dimensiones muy grandes la escalabilidad de solvers FETI se deteriora, en parte debido al ensamble y la resolución del problema *coarse* que en general se resuelve de manera redundante en cada subdominio y con un solver directo [26]. Este paquete de trabajo servirá para introducir al becario a los detalles de la implementación de solvers FETI. Una solución innovadora en este caso es estudiar posibles implementaciones haciendo uso de las extensiones para memoria compartida introducidas por el estándar MPI-3, permitiendo, por ejemplo, que los núcleos de un nodo físico puedan trabajar con la misma instancia en memoria del problema *coarse*.
- **Solvers robustos basados en FETI para problemas caracterizados por procesos no-lineales localizados.** Ciertos problemas de la ingeniería, como lo son los problemas de soldadura, se caracterizan por procesos no-lineales localizados. En este paquete de trabajo se desarrollarán solvers basados en FETI que puedan lidiar de manera robusta y eficiente con el problema mecánico de soldadura utilizando una relación constitutiva elasto-plástica. Como punto de partida se estudiará aplicar a este problema el método nonlinear-FETI presentado por Pebrel *et al.* [15] y Klawonn *et al.* [16], que efectúa las iteraciones no-lineales a nivel local de los subdominios y no de manera global como lo hace el método Newton-Krylov-FETI estándar. Se deberá determinar cuán robusto es el método nonlinear-FETI para problemas elasto-plásticos y proponer mejoras para reducir el desbalanceo de carga inherente a este tipo de método.

El hecho de que en problemas con no-linealidades localizadas muchos de los subdominios permanecen lineales se puede explotar reutilizando direcciones en la resolución iterativa del problema de la interfaz. Para desarrollar una estrategia siguiendo esta filosofía, el trabajo de Gosselet *et al.* [18] que introduce la reutilización de espacios de Krylov para acelerar la convergencia de métodos FETI, puede ser utilizado como punto de partida. También en este punto es interesante estudiar cómo mejorar la robustez del método utilizando múltiples direcciones de búsqueda como lo hace el método S-FETI.

- **Aplicación de métodos FETI a problemas multi-escala.** En este paquete de trabajo el becario tendrá más libertad en establecer la dirección a seguir, ya que hay muchas cuestiones por esclarecer en este contexto y el tiempo que dura el doctorado puede no llegar a ser suficiente para dar respuesta a esas cuestiones. El objetivo principal de este paquete de trabajo es desarrollar técnicas basadas en FETI que permitan reducir el costo computacional inherente a formulaciones multi-escala.

La problemática aquí tratada es muy amplia, ya que las dificultades que se deberán solucionar dependen del tipo de formulación multi-escala que se adopte. Se ha establecido como parte del objetivo específico de este trabajo, describir múltiples escalas temporales en donde cada subdominio puede tener su propio incremento temporal. Aquí se tienen que estudiar integradores multi-rate y su implementación eficiente en computadoras de alto rendimiento, un tema que no ha sido correctamente abordado en el estado del arte. Probablemente, se tengan que solucionar problemas inherentes a utilizar distintos pasos de tiempo en cada subdominio. Por ejemplo, se podrían producir reflexiones numéricas en la interfaz definida por subdominios con diferente resolución temporal.

También se pueden considerar formulaciones con múltiples escalas espaciales de manera concurrente, en donde cada subdominio puede tener diferentes resoluciones espaciales. Esto introduce la dificultad adicional de que las mallas serán no conformes en las interfaces de subdominios con diferente resolución. En el contexto de solvers FETI, la dificultad en este caso radica en desarrollar preconditionadores para el problema de la interfaz que sean eficientes y baratos. En el transcurso del doctorado, el becario deberá definir si es factible estudiar el caso de múltiples escalas espaciales.

4. Factibilidad

Las actividades se realizarán en el Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), dependiente de UNL y CONICET e integrado al Centro Científico Tecnológico (CCT) Santa Fe. Estas dos últimas instituciones proveen al CIMEC la infraestructura y servicios tales como biblioteca, biblioteca electrónica, copiado e impresiones especiales, internet, reparación y mantenimiento de equipos informáticos, entre otros. El CIMEC se encuentra actualmente integrado por alrededor de 50 personas, entre ellas investigadores y profesionales del CONICET, becarios de posgrado de CONICET y de otras instituciones científico-tecnológicas, así como también profesores y pasantes de la UNL. Además se dispone de varios clusters tipo Beowulf: Bora (7 nodos proc. i7, 42 cores/Ethernet), Coyote (32 nodos,+200 cores/Ethernet), Seshat (69 nodos,+400 cores/Infiniband) y Pirayú (24 nodos,+800 cores/Infiniband), los dos últimos basados en procesadores Xeon E16xx y E2-56xx, con un total de +1000 cores (el último tiene prevista su instalación en agosto 2016).

Referencias

- [1] Rojas Fredini, E., Benitez, F., Cosimo, A., and Cardona, A., 2012. "Paralelización de un código de elementos finitos en multiprocesadores de memoria compartida". In *Mecánica Computacional*, A. Cardona, P. H. Kohan, R. Quinteros, and M. Storti, eds., Vol. XXXI, pp. 3153–3164 (complete article).
- [2] Cosimo, A., Cardona, A., and Idelsohn, S., 2014. "Improving the k-compressibility of hyper reduced order models with moving sources: Applications to welding and phase change problems". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **274**(0), pp. 237 – 263.

- [3] Cosimo, A., Cardona, A., and Idelsohn, S., 2016. "General treatment of essential boundary conditions in reduced order models for non-linear problems". *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, **3**(1), pp. 1–14.
- [4] Dalcin, L. D., Paz, R. R., Kler, P. A., and Cosimo, A., 2011. "Parallel distributed computing using python". *Advances in Water Resources*, **34**(9), pp. 1124 – 1139.
- [5] Anca, A., Fachinotti, V., Escobar-Palafox, G., and Cardona, A., 2011. "Computational modelling of shaped metal deposition". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **85**(1), pp. 84–106.
- [6] Anca, A., Cardona, A., Risso, J., and Fachinotti, V., 2011. "Finite element modeling of welding processes". *Applied Mathematical Modelling*, **35**(2), pp. 688–707.
- [7] Fachinotti, V., Cardona, A., Cosimo, A., Baufeld, B., and Van der Biest, O., 2010. "Evolution of temperature during shaped metal deposition: Finite element predictions vs. observations". In *Mecánica Computacional*, E. Dvorkin, M. Goldschmit, and M. Storti, eds., Vol. XXIX, pp. 4915–4926 (complete article).
- [8] Cosimo, A., Cardona, A., and Idelsohn, S., 2013. "Modelos de orden reducido para el problema térmico de soldadura". In *Mecánica Computacional*, C. García Garino, A. Mirasso, M. Storti, and M. Tornello, eds., Vol. XXXII, pp. 3151–3163 (complete article).
- [9] Cosimo, A., and Cardona, A., 2014. "Aspectos de implementación informática para el modelado computacional de la evolución microestructural de materiales". In *Mecánica Computacional*, G. Bertolino, M. Cantero, M. Storti, and F. Teruel, eds., Vol. XXXIII, pp. 3295–3312 (complete article).
- [10] Cosimo, A., Cardona, A., Novara, P., and Calvo, N., 2014. "Weld Residual Stresses modelling. Application to a nuclear power plant welded joint". In *Mecánica Computacional*, G. Bertolino, M. Cantero, M. Storti, and F. Teruel, eds., Vol. XXXIII, pp. 3277–3294 (complete article).
- [11] Farhat, C., and Roux, F.-X., 1991. "A method of finite element tearing and interconnecting and its parallel solution algorithm". *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, **32**(February 1990), pp. 1205–1227.
- [12] Farhat, C., Lesoinne, M., Letallec, P., Pierson, K., and Rixen, D., 2001. "FETI-DP: A dual-primal unified FETI method part I: A faster alternative to the two-level FETI method". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **50**(7), pp. 1523–1544.
- [13] Gosselet, P., Rixen, D., Roux, F.-X., and Spillane, N., 2015. "Simultaneous FETI and block FETI: Robust domain decomposition with multiple search directions". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, pp. n/a–n/a.
- [14] Gosselet, P., and Rey, C., 2006. "Non-overlapping domain decomposition methods in structural mechanics". *Archives of Computational Methods in Engineering*, **13**(4), Dec., pp. 515–572.
- [15] Pebrel, J., Rey, C., and Gosselet, P., 2008. "A Nonlinear Dual-Domain Decomposition Method: Application to Structural Problems with Damage". *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, **6**(3), pp. 251–262.
- [16] Klawonn, A., Lanser, M., and Rheinbach, O., 2014. "Nonlinear FETI-DP and BDDC methods". *SIAM Journal on Scientific Computing*, **36**(2), pp. 737–765.
- [17] Rey, C., Devries, F., and Lene, F., 1995. "Parallelism in non linear computation of heterogeneous structures". *Calculateurs Parallèles*, **7**(3).
- [18] Gosselet, P., Rey, C., and Pebrel, J., 2013. "Total and selective reuse of Krylov subspaces for the resolution of sequences of nonlinear structural problems". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **94**(1), Apr., pp. 60–83.
- [19] Klawonn, A., Lanser, M., and Rheinbach, O., 2015. EXASCALE - Computational Scale Bridging using FE2TI approach with ex.nl/FE2. Tech. rep., Universität zu Köln and Technische Universität Bergakademie Freiberg.
- [20] Confalonieri, F., Ghisi, A., Cocchetti, G., and Corigliano, A., 2014. "A domain decomposition approach for the simulation of fracture phenomena in polycrystalline microsystems". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **277**, Aug., pp. 180–218.
- [21] Brun, M., Gravouil, A., Combescure, A., and Limam, A., 2015. "Two FETI-based heterogeneous time step coupling methods for Newmark and α -schemes derived from the energy method". *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **283**, pp. 130–176.
- [22] Gravouil, a., Combescure, a., and Brun, M., 2015. "Heterogeneous asynchronous time integrators for computational structural dynamics". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **102**(3-4), pp. 202–232.
- [23] Subber, W., and Matouš, K., 2016. "Asynchronous space–time algorithm based on a domain decomposition method for structural dynamics problems on non-matching meshes". *Computational Mechanics*, **57**(2), pp. 211–235.

- [24] Jolivet, P., and Nataf, F., 2016. HPDDM Web page. <https://github.com/hpddm>.
- [25] Balay, S., Abhyankar, S., Adams, M. F., Brown, J., Brune, P., Buschelman, K., Dalcin, L., Eijkhout, V., Gropp, W. D., Kaushik, D., Knepley, M. G., McInnes, L. C., Rupp, K., Smith, B. F., Zampini, S., and Zhang, H., 2015. PETSc Web page. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
- [26] Klawonn, A., and Rheinbach, O., 2007. "Inexact FETI-DP methods". *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **69**(2), pp. 284–307.