

Méthodes Multipôles Rapides pour l'Électromagnétisme : Parallélisme et Basses Fréquences

*Laboratoire Jacques-Louis Lions
Thèse dirigée par O. Pironneau
présentée le 13 Mai 2004*

Pascal HAVÉ

I. L'idée générale de la méthode

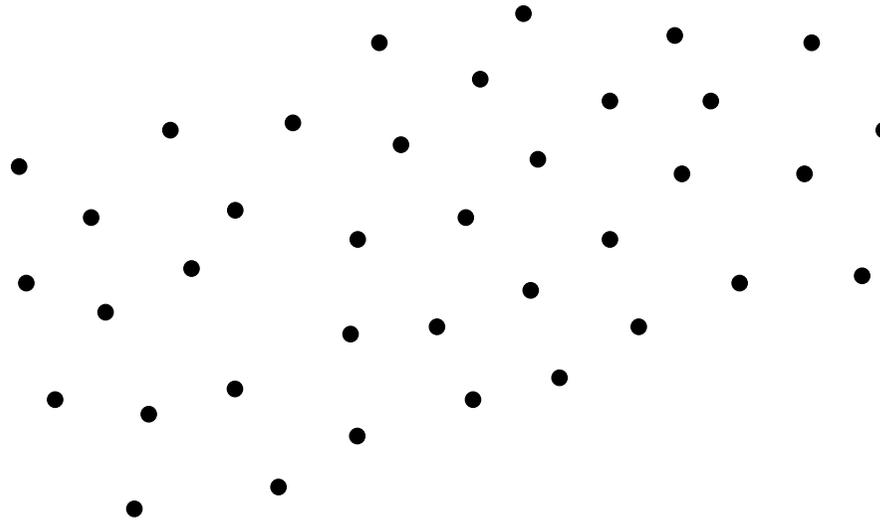
II. La méthode SPW-FMM

III. Développements informatiques pour les FMM

IV. Résultats numériques

V. Conclusions

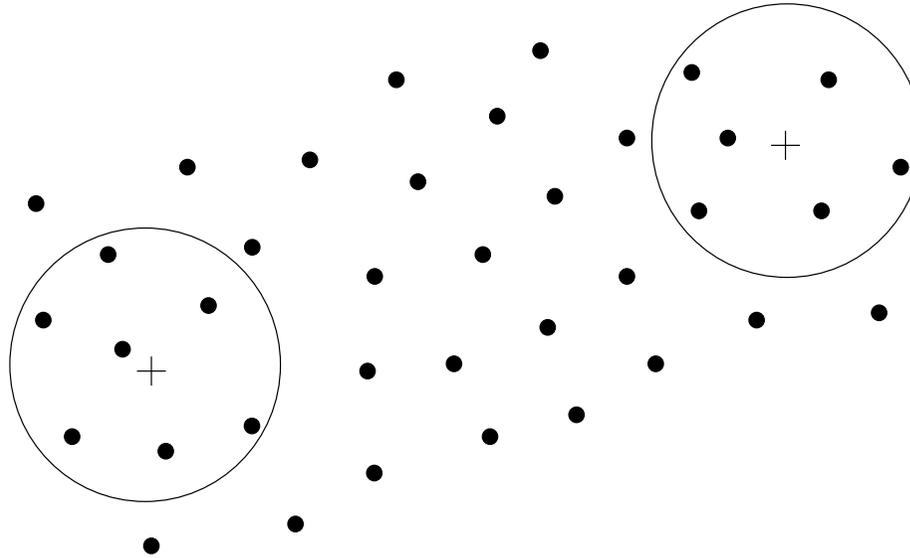
Quelle est l'idée derrière la méthode ?



Problème à N corps

N^2 interactions : système complet
Coût rapidement prohibitif

Quelle est l'idée derrière la méthode ?

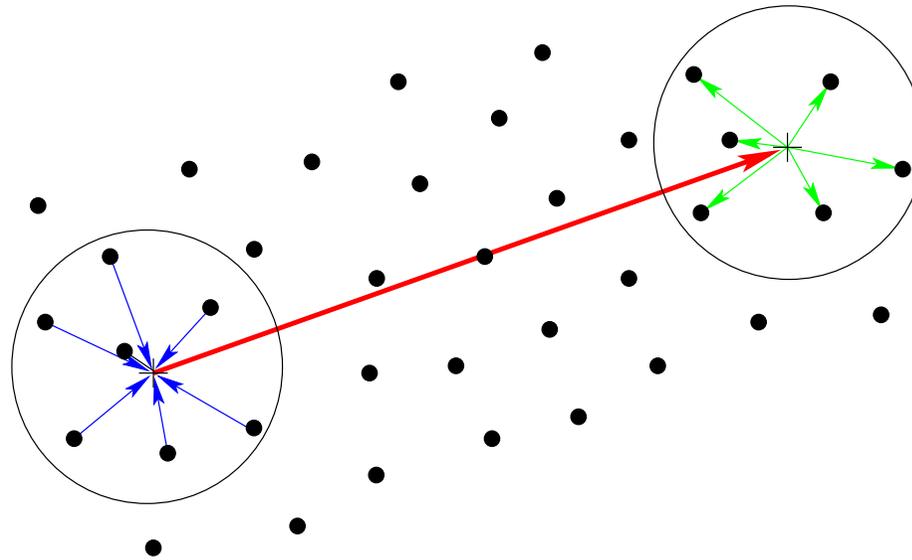


Problème à N corps

L'approche multipôle :

- Calcul *précis* des interactions *proches*.

Quelle est l'idée derrière la méthode ?



Problème à N corps

L'approche multipôle :

- Calcul *précis* des interactions *proches*.
- Calcul *approché* de groupes d'interactions *lointains* suivant 3 étapes :
Gathering, *Transfer*, *Scattering*.
- Dépend de la régularité des potentiels.

Survol de la méthode multipôle

Soient $H(r)$ un potentiel, x et y deux particules,
 $r = x - y$.

Objectif :

$$u_i = \sum_j H(x_i - x_j) v_j \iff u = M_H v$$

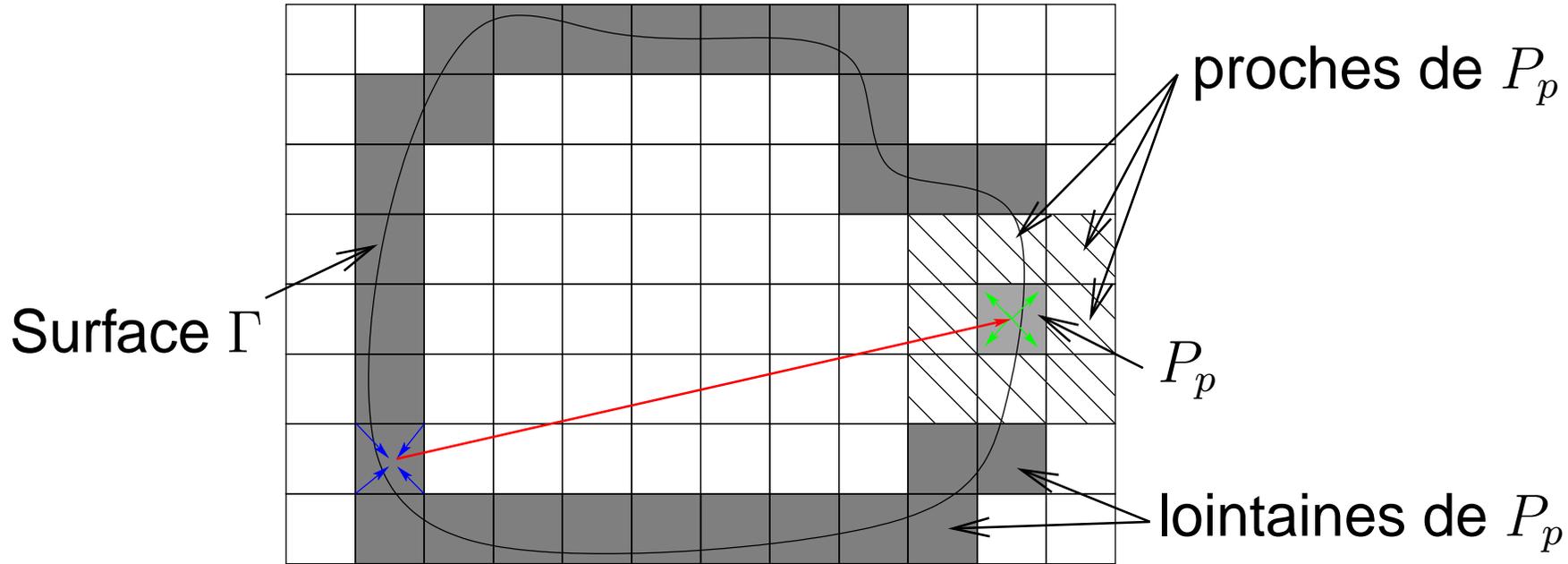
Prérequis :

$$H(r) = \int K(\zeta, s) T(\zeta, t) d\zeta, \quad \text{avec } r = s + t \in \mathbb{R}^3$$

ainsi qu'une propriété d'homomorphisme

$$K(\zeta, r_1 + r_2) = K(\zeta, r_1) \cdot K(\zeta, r_2) \quad \text{pour } r_1, r_2 \in \mathbb{R}^3$$

FMM à 1 niveau : $u^{far} = M_H^{far} v$

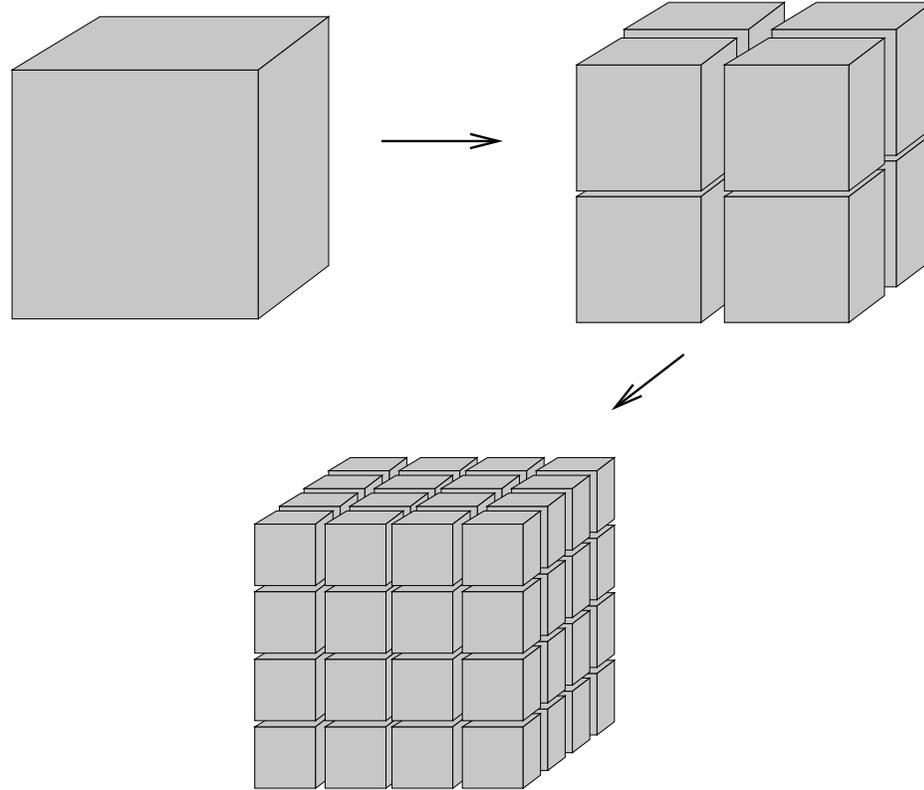


$$\forall x_i \in P_p$$

$$u_i^{far} = \int K(\zeta, x_i - C_r) \sum_{P_q \text{ loin de } P_p} T(\zeta, C_r - C_t) \sum_{x_j \in P_q} v_j K(\zeta, C_t - x_j) d\zeta$$

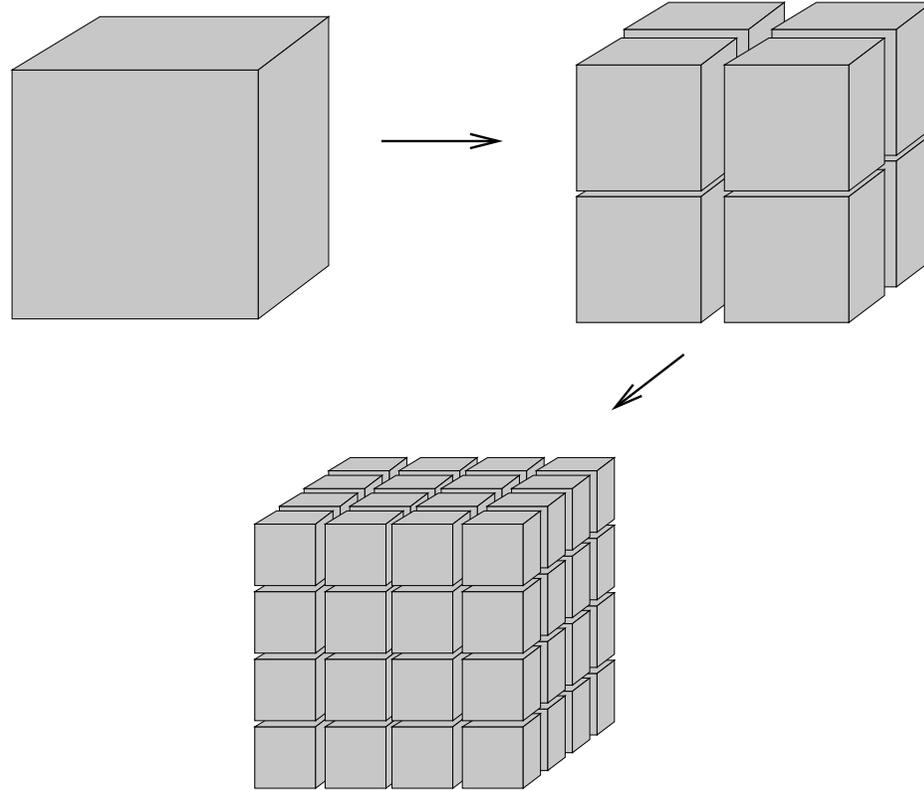
Complexité du stockage et du calcul : $O(N^{3/2})$

FMM multiniveaux



Décomposition hiérarchique de l'espace

FMM multiniveaux



Objectif :

- réduction du coût des interactions proches
- réduction du nombre d'interactions lointaines

FMM multiniveaux

Soit un quadtree à 3 niveaux (L_0, L_1, L_2),
et 3 cellules $P_{p_2} \subset P_{p_1} \subset P_{p_0}$

- À chaque niveau, calcul des fonctions de radiation

$$F_q(\zeta) = \sum_{x_j \in P_q} v_j K(\zeta, C_q - x_j)$$

FMM multiniveaux

Soit un quadtree à 3 niveaux (L_0, L_1, L_2),
et 3 cellules $P_{p_2} \subset P_{p_1} \subset P_{p_0}$

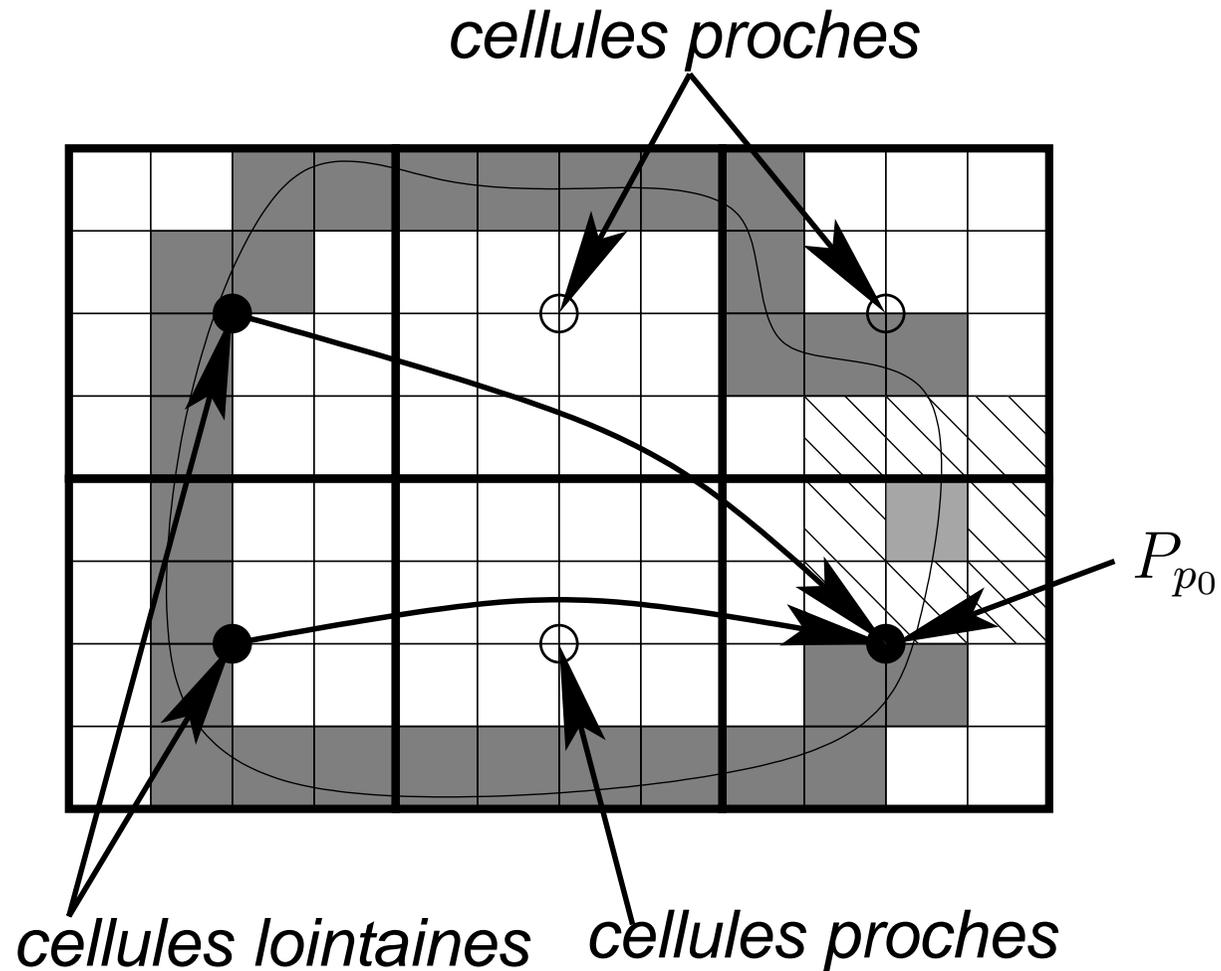
- À chaque niveau, calcul des fonctions de radiation

$$F_q(\zeta) = \sum_{x_j \in P_q} v_j K(\zeta, C_q - x_j)$$

- Calcul des transferts à l'intérieur de chaque niveau

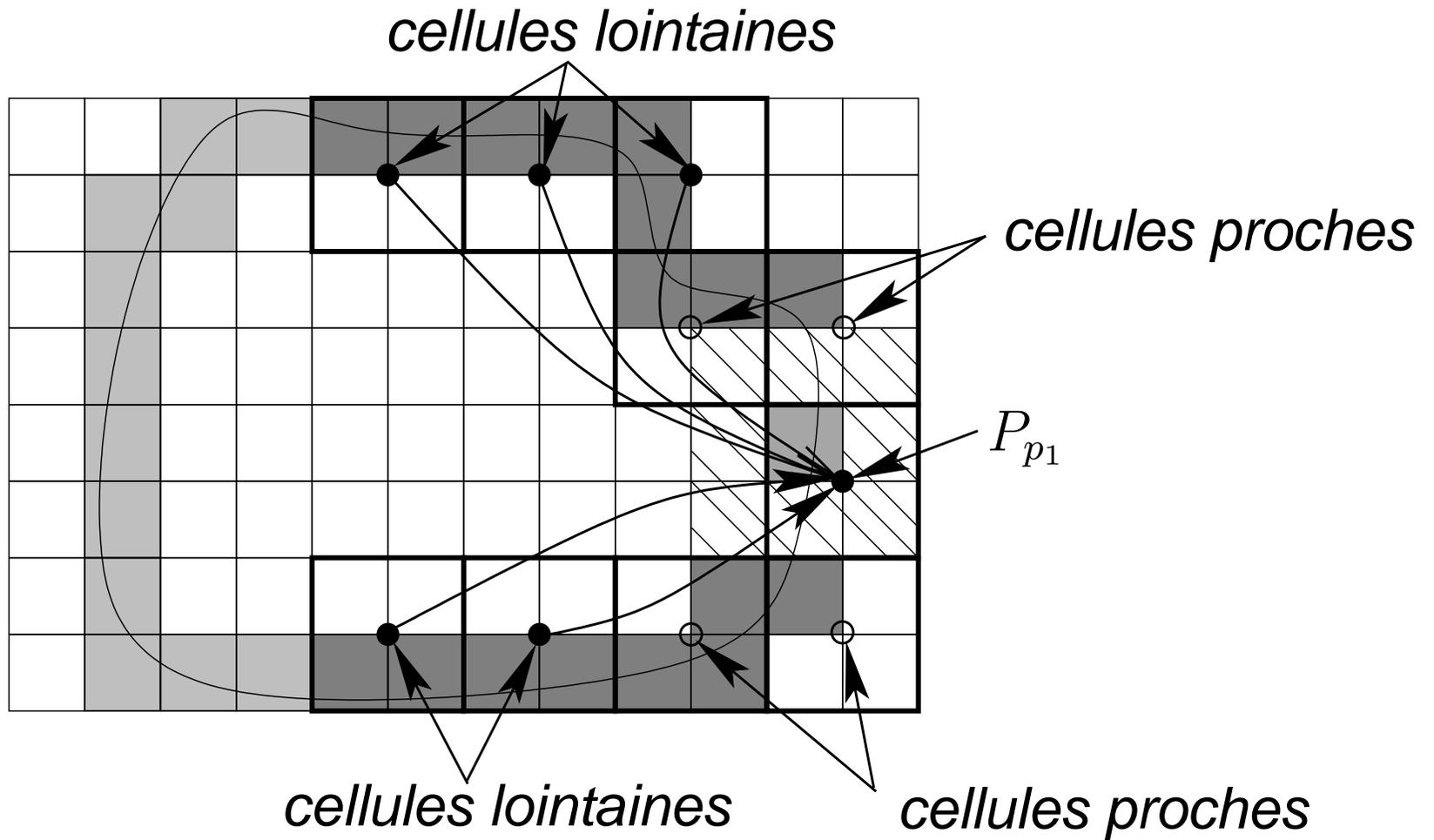
$$G_p(\zeta) = \sum_{\substack{P_q, P_p \text{ non proches} \\ \text{et de parents proches}}} F_q(\zeta) T(\zeta, C_p - C_q)$$

FMM multiniveaux



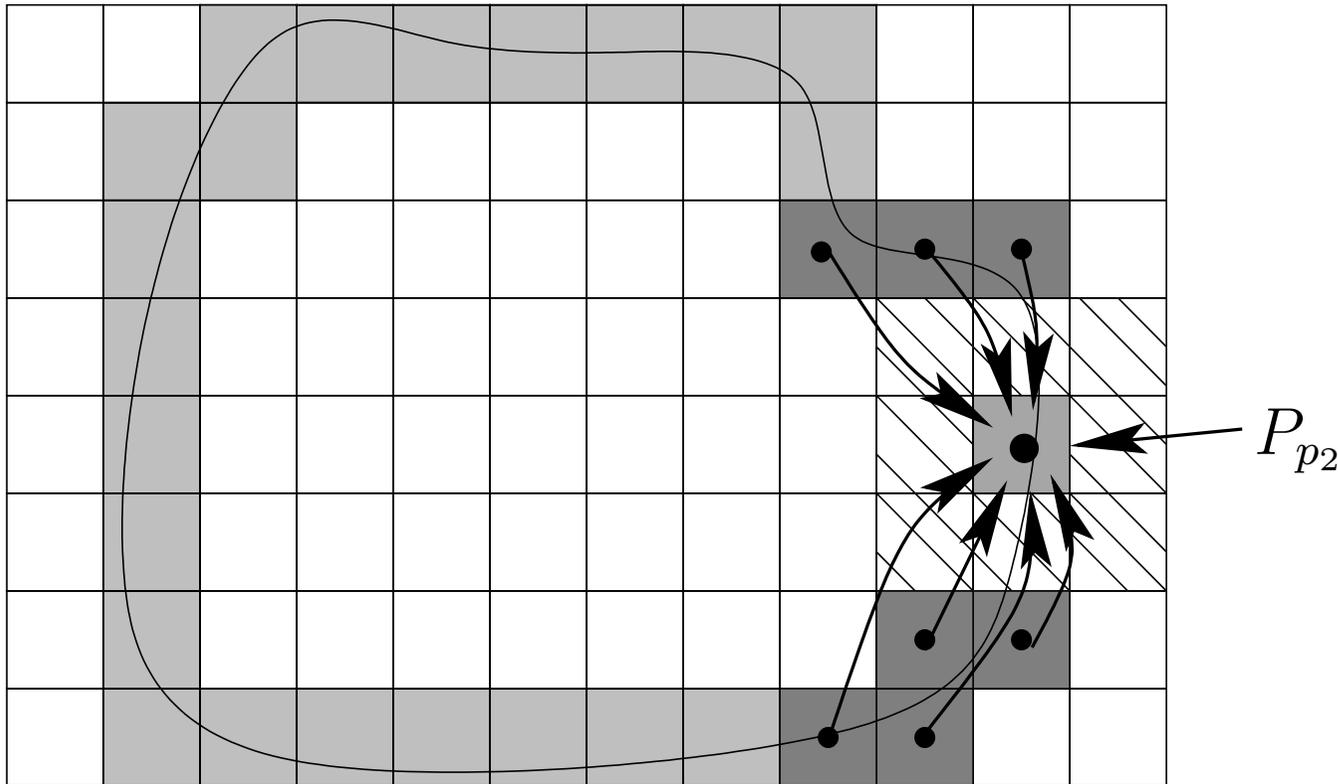
Transferts au niveau L_0

FMM multiniveaux



Transferts au niveau L_1

FMM multiniveaux



Transferts au niveau L_2

FMM multiniveaux

Afin de “propager l’information” du niveau le plus grossier L_0 au plus fin L_2

$$\tilde{G}_{p_1}(\zeta) = G_{p_1}(\zeta) + K(\zeta, C_{p_1} - C_{p_0})G_{p_0}(\zeta)$$

$$\tilde{G}_{p_2}(\zeta) = G_{p_2}(\zeta) + K(\zeta, C_{p_2} - C_{p_1})\tilde{G}_{p_1}(\zeta)$$

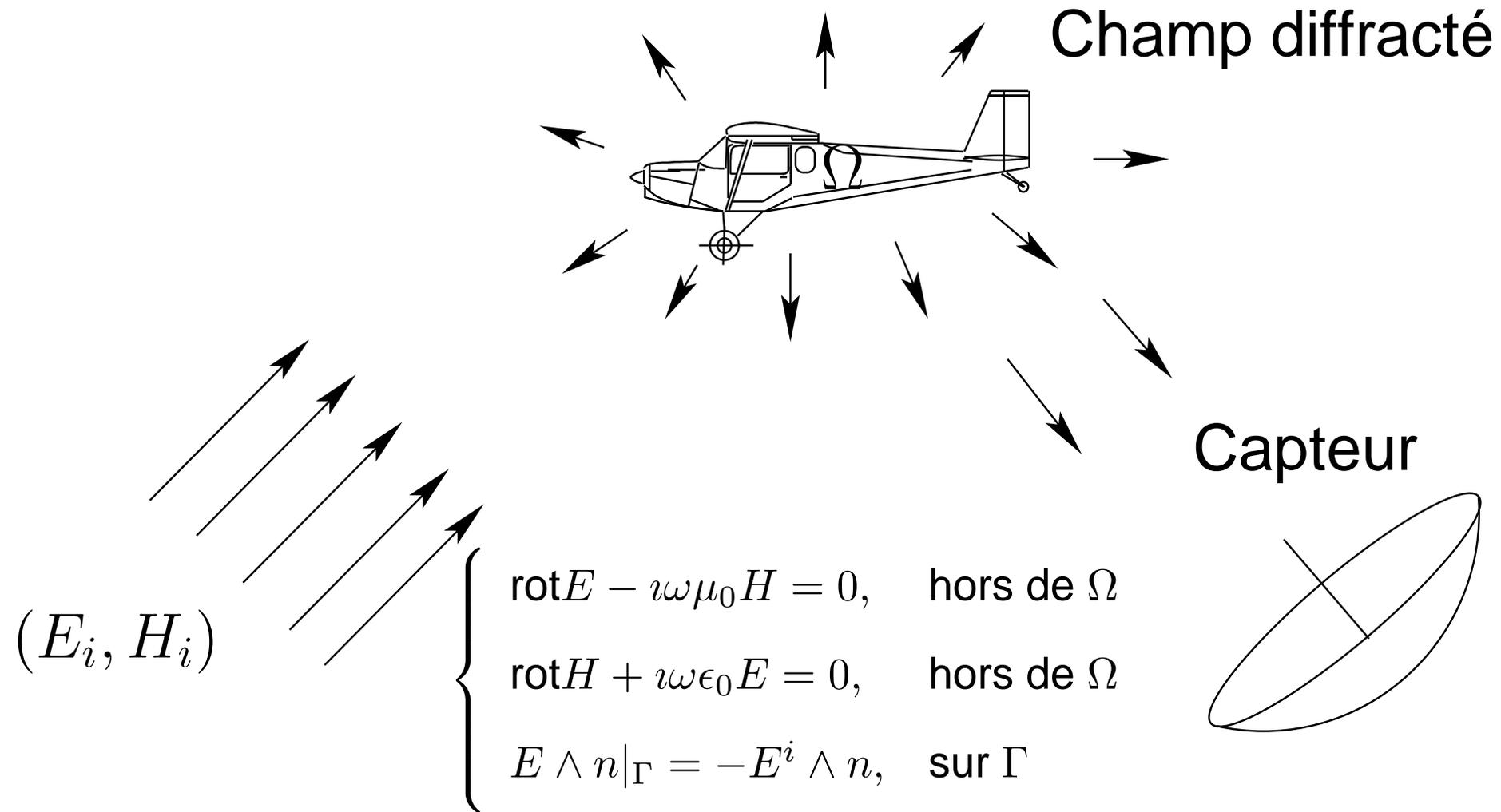
Ce qui nous permet d’obtenir $u^{far} = M_H^{far} v$,

$$\forall x_i \in P_{p_2} \quad u_i^{far} = \int K(\zeta, x_i - C_{p_2}) \tilde{G}_{p_2}(\zeta) d\zeta$$

A quelques détails près ...

- Comment discrétiser en ζ pour remplacer l'intégrale par une quadrature numérique,
- Comment construire \tilde{G}_{p_i} à partir de $\tilde{G}_{p_{i-1}}$ vu que les quadratures peuvent différer,
- Comment utiliser la structure hiérarchique pour réduire le coût des calculs des fonctions de radiations.

Simulation électromagnétique



Condition de radiation à l'infini de Silver-Müller :

$$\lim_{|r| \rightarrow +\infty} |r| |\sqrt{\epsilon_0} E - \sqrt{\mu_0} H \wedge r| = 0$$

Formulation intégrale : EFIE

$\forall y \in \Gamma$ surface parfaitement conductrice,

$\forall t \perp n(y)$

$$\begin{aligned} -4\pi E^i(y) \cdot t = & i\omega\mu_0 \int_{\Gamma} t \cdot G(x - y) j(x) \, d\sigma(x) \\ & + \frac{i}{\omega\epsilon_0} \int_{\Gamma} t \cdot \nabla_x G(x - y) \operatorname{div}_{\Gamma} j(x) \, d\sigma(x) \end{aligned}$$

avec $\kappa = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ et $G(r) = \frac{e^{i\kappa|r|}}{|r|}$.

Discrétisation par les éléments finis de Raviart-Thomas.

Méthodes existantes et limitations

Solveurs directs

- Coûts numériques très importants voire limitants en temps / mémoire

HF-FMM en basses fréquences

- Terme de transfert instable
Limitations en nombre de niveaux, en précision et en fréquence.

LF-FMM en hautes fréquences

- Combinaison des développements multipolaire classique et en ondes planes.
- Nombreuses transformations complexes

Les objectifs d'une nouvelle méthode ?

- Opérateur de transfert diagonal
- Méthode unique stable à toutes fréquences
- Précision arbitraire
- Peu de contraintes sur le nombre de niveaux
⇒ Réduction potentielle du coût des interactions proches

Méthode LF-FMM

L. Greengard *et al.*

$$\frac{e^{i\kappa|r|}}{|r|} = \frac{i\kappa}{2\pi} \int_{S^{z^+}} e^{i\kappa\langle\sigma,r\rangle} d\sigma + \frac{1}{2\pi} \int_{\chi=0}^{+\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} e^{-\chi z} e^{i\sqrt{\chi^2+\kappa^2}(x\cos\phi+y\sin\phi)} d\phi d\chi$$

avec $S^{z^+} = \{r = (x, y, z) \in S^2, z > 0\}$

Méthode LF-FMM

L. Greengard *et al.*

$$\frac{e^{i\kappa|r|}}{|r|} = \frac{i\kappa}{2\pi} \int_{S^{z+}} e^{i\kappa\langle\sigma,r\rangle} d\sigma + \frac{1}{2\pi} \int_{\chi=0}^{+\infty} \int_{\phi=0}^{2\pi} e^{-\chi z} e^{i\sqrt{\chi^2+\kappa^2}(x\cos\phi+y\sin\phi)} d\phi d\chi$$

- 2 termes : $H(r)$ propagatif, $V(r)$ évanescent
- Stabilité numérique apparente
- Présence d'une intégrale généralisée
- Approche directionnelle ($z > 0$).

Terme propagatif : Difficultés

Intégration sur S^{z^+}

$$\int_{S^{z^+}} e^{i\kappa \langle \sigma, x_i - x_j \rangle} d\sigma$$

Terme propagatif : Difficultés

Intégration sur S^{z^+}

$$\int_{S^{z^+}} e^{i\kappa \langle \sigma, x_i - x_j \rangle} d\sigma$$
$$= \int_{S^2} e^{i\kappa \langle \sigma, x_i - C_p \rangle} \left\{ e^{i\kappa \langle \sigma, C_p - C_q \rangle} \mathbf{1}_{S^{z^+}}(\sigma) \right\} e^{i\kappa \langle \sigma, C_q - x_j \rangle} d\sigma$$


Terme propagatif : Difficultés

Intégration sur S^{z^+}

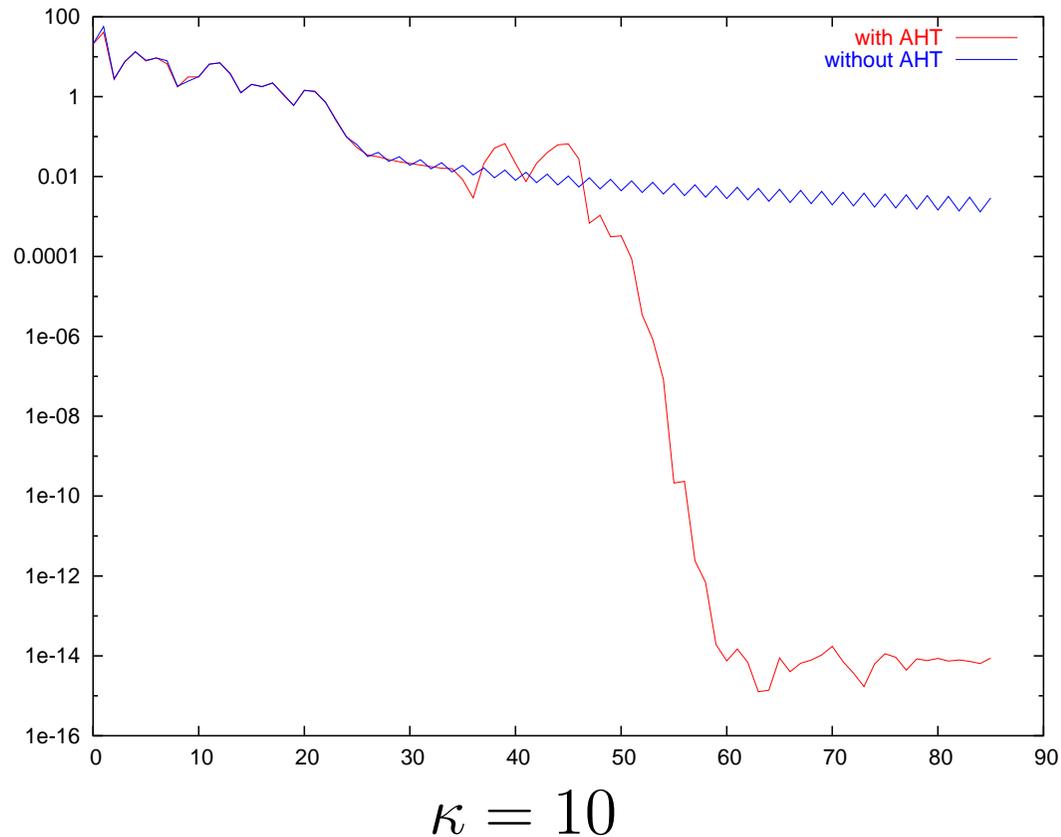
$$\int_{S^{z^+}} e^{i\kappa \langle \sigma, x_i - x_j \rangle} d\sigma$$

$$= \int_{S^2} e^{i\kappa \langle \sigma, x_i - C_p \rangle} \left\{ e^{i\kappa \langle \sigma, C_p - C_q \rangle} \mathbf{1}_{S^{z^+}}(\sigma) \right\} e^{i\kappa \langle \sigma, C_q - x_j \rangle} d\sigma$$

⇒ Supprimer les hautes fréquences induites par la discontinuité

Terme propagatif : Lissage AHT

Estimation de type Song & Chew : $L \approx \kappa d + 1.8 d_0^{2/3} (\kappa d)^{1/3}$,
 $d_0 = \log_{10}(1/\epsilon)$, intégration en $(L + 1) \times (L + 1)$ points.



Réutilisation des opérateurs d'interpolation de la HF-FMM.

Terme propagatif : Lissage DFT

Par symétrisation du transfert suivant

$$S(\theta, \psi) = (2\pi - \theta, \pi + \psi)$$

et lissage en Fourier 2D de fréquences

$\{-L \dots L\}$ avec $L \approx \kappa d + 1.8 d_0^{2/3} (\kappa d)^{1/3}$,

$d_0 = \log_{10}(1/\epsilon)$,

une intégration précise est possible avec seulement $1 + L \times (L + 1)$.

- Relativement peu de points (moins que AHT)
- Opérateurs d'inter/anter-polation de type FFT
- Réutilisation pour HF-FMM

Terme évanescents : Troncature

$$K(\chi, z, \rho) \stackrel{\text{def}}{=} \exp(-\chi z) \exp(i\rho \sqrt{\chi^2 + \kappa^2}),$$

$$V(x, y, z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\chi_{max}=+\infty} d\chi \int_0^{2\pi} d\phi K(\chi, z, x \cos \phi + y \sin \phi),$$

$$V_0(x, y, z) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} V(x, y, z).$$

Terme évanescéent : Troncature

$$K(\chi, z, \rho) \stackrel{\text{def}}{=} \exp(-\chi z) \exp(i\rho \sqrt{\chi^2 + \kappa^2}),$$

$$V(x, y, z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^{\chi_{max}=+\infty} d\chi \int_0^{2\pi} d\phi K(\chi, z, x \cos \phi + y \sin \phi),$$

$$V_0(x, y, z) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\pi} V(x, y, z).$$

$$\text{Erreur } \epsilon \text{ suivant } V_0 : \chi'_{max}(\epsilon) \geq -\frac{\log(z_{min}\epsilon)}{z_{min}}$$

$$\text{Erreur } \epsilon \text{ suivant } K : \chi_{max}(\epsilon) \geq -\frac{\log \epsilon}{z_{min}}.$$

Terme évanescient : Discrétisation ϕ

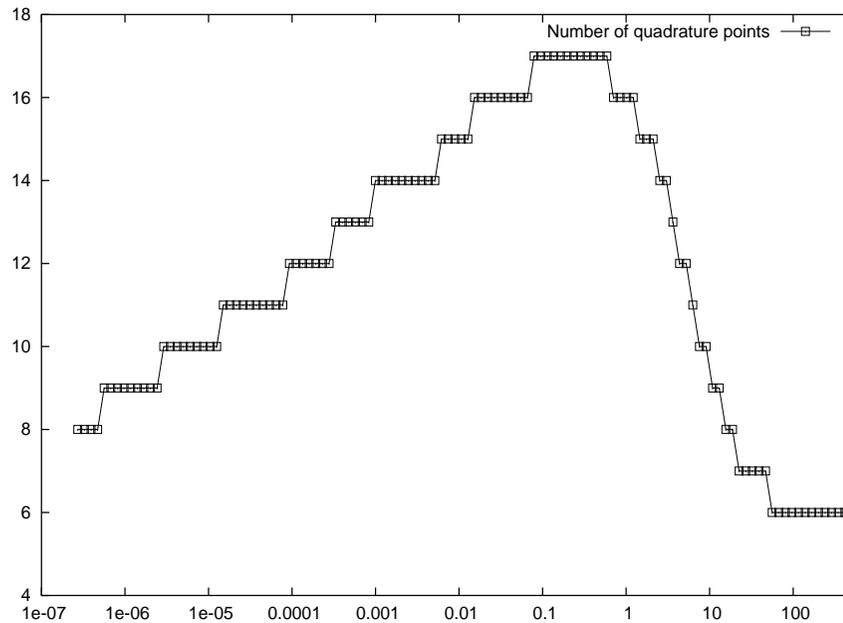
Quadrature uniforme de taille $n_\phi = L + 1$ avec

$$L \approx L_0 + d_e^{2/3} L_0^{1/3},$$

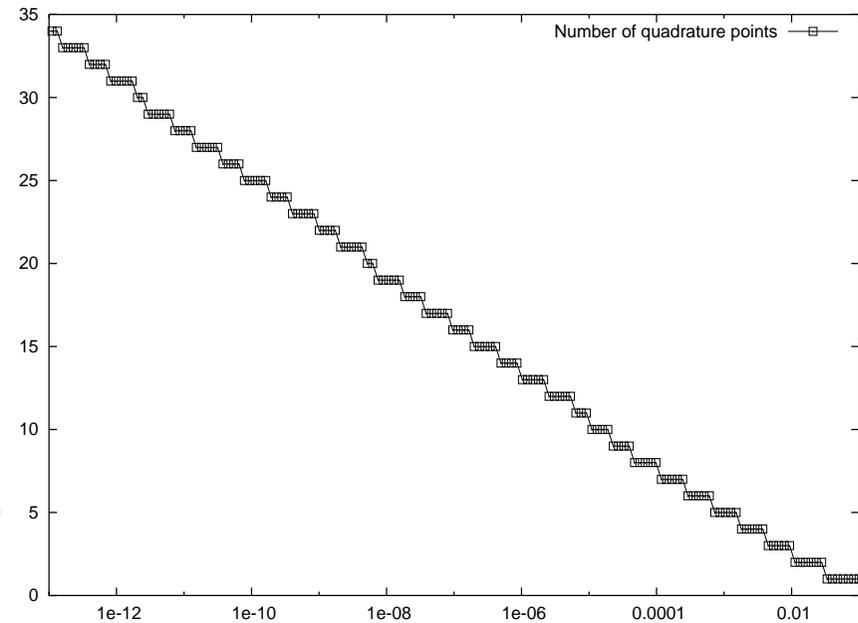
$$d_e \stackrel{\text{def}}{=} \log(1/\epsilon) \quad \text{et} \quad L_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2}R \sqrt{\left(\frac{2d_e}{R}\right)^2 + \kappa^2}.$$

Terme évanescents : Discrétisation χ

Quadrature de Gauss «Optimale» (Greengard & Rokhlin)

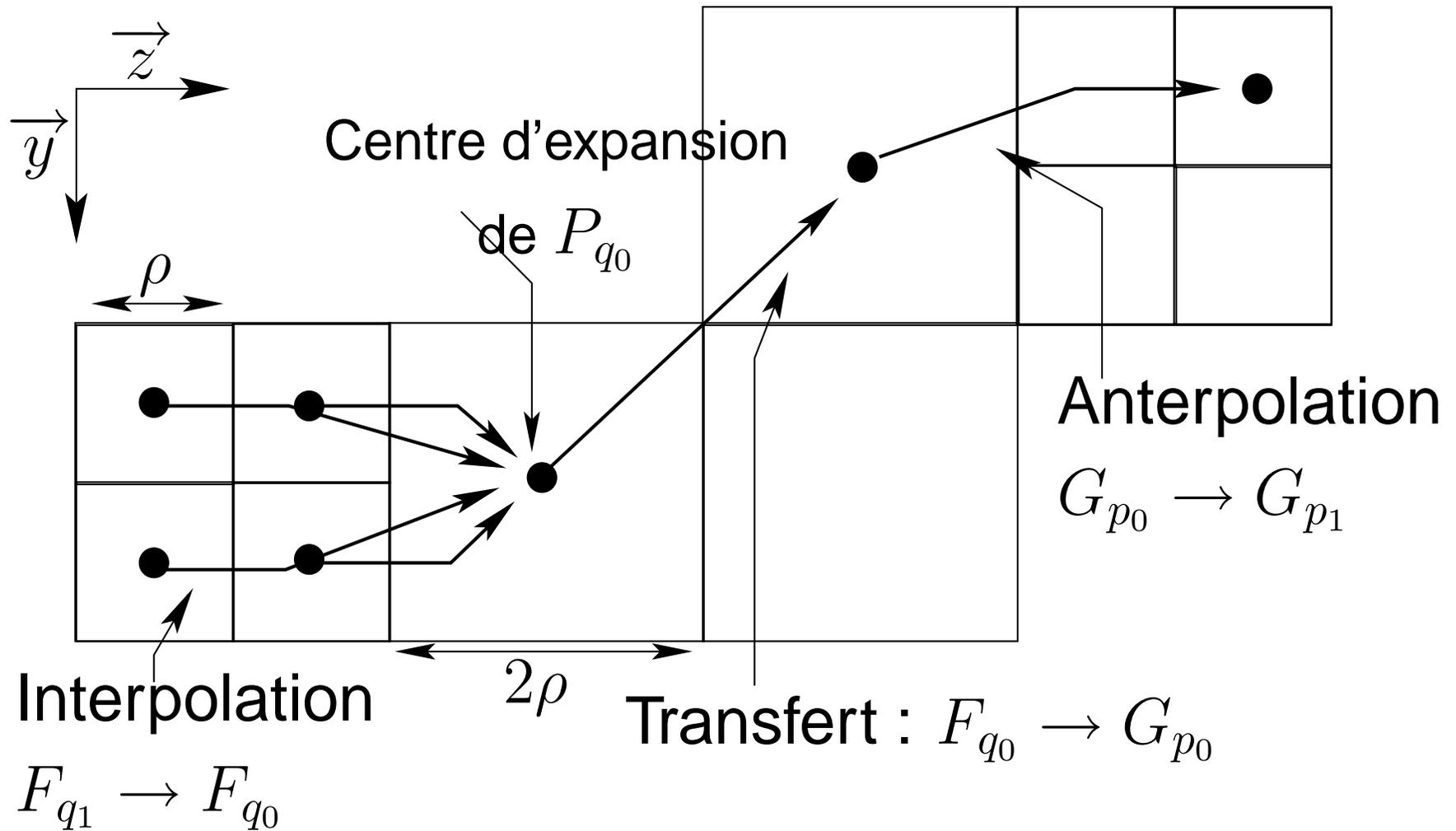


Nombre de points de quadrature
suivant χ en fonction de z



Nombre de points de quadrature
suivant χ en fonction de ϵ

Terme évanescents : Schéma à 2 niveaux



Terme évanescents : Conclusion partielle

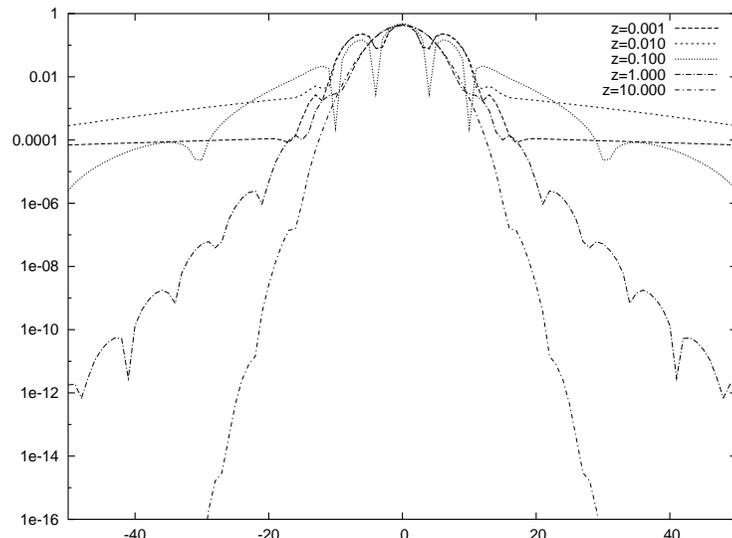
- 6 directions : $+x, -x, +y, -y, +z$ et $-z$

Terme évanescents : Conclusion partielle

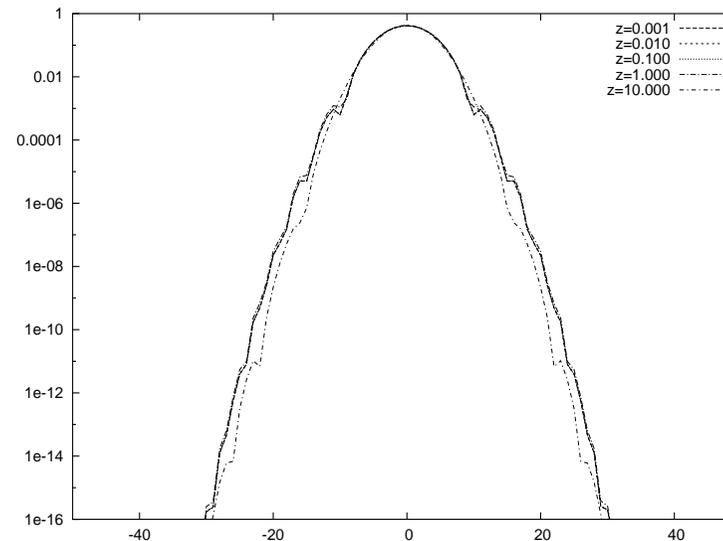
- 6 directions : $+x, -x, +y, -y, +z$ et $-z$
- Coût élevé des interpolations

Terme évanescent : Conclusion partielle

- 6 directions : $+x, -x, +y, -y, +z$ et $-z$
- Coût élevé des interpolations
- Optimisation des opérations aux feuilles



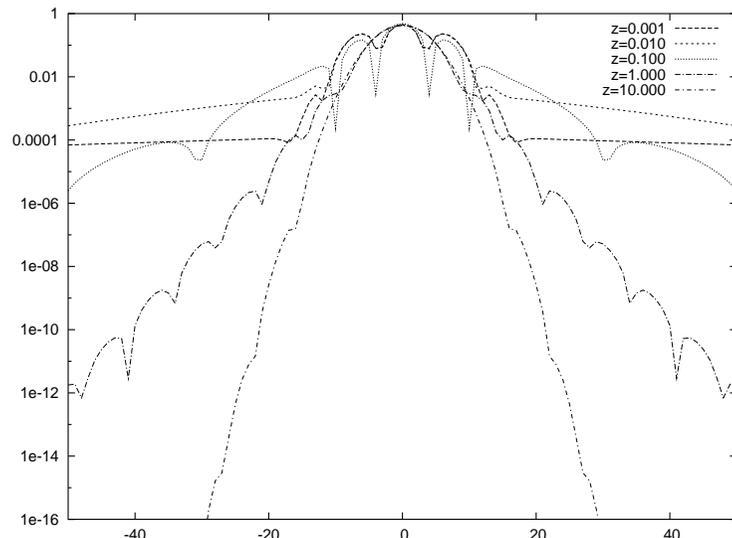
Spectre $\text{Im}K(\chi^2)$



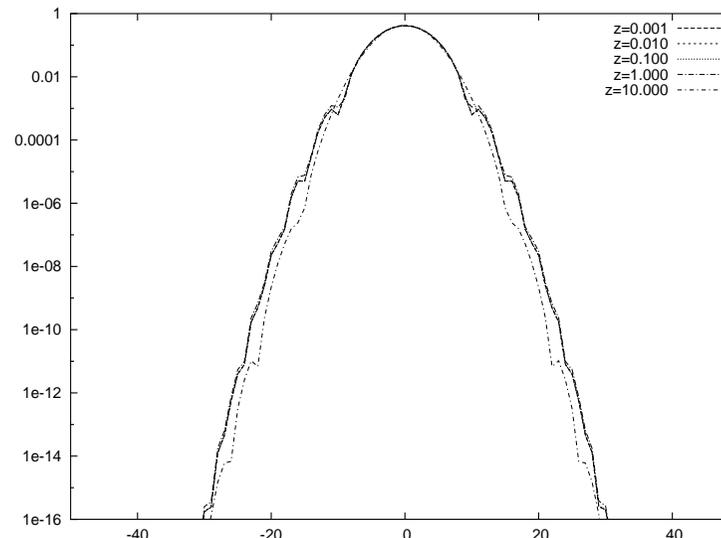
Spectre
 $\text{Im}K(\chi^2) / \sqrt{\chi^4 + \kappa^2}$

Terme évanescient : Conclusion partielle

- 6 directions : $+x, -x, +y, -y, +z$ et $-z$
- Coût élevé des interpolations
- Optimisation des opérations aux feuilles



Spectre $\text{Im}K(\chi^2)$



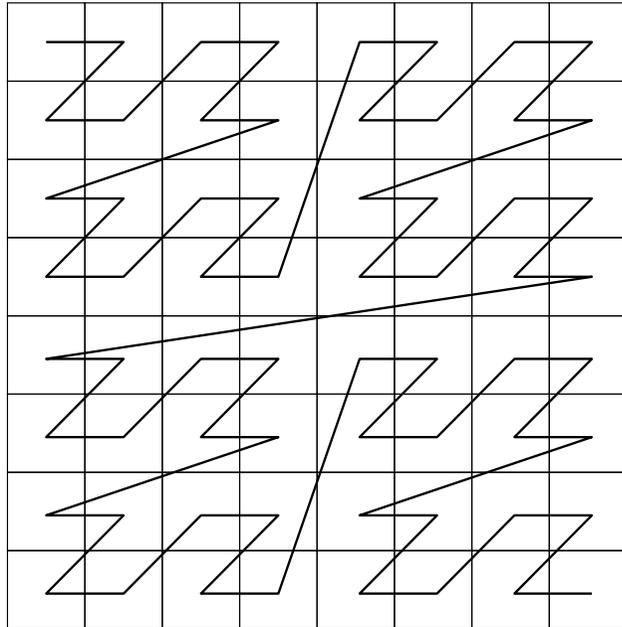
Spectre
 $\text{Im}K(\chi^2) / \sqrt{\chi^4 + \kappa^2}$

Implémentations parallèles

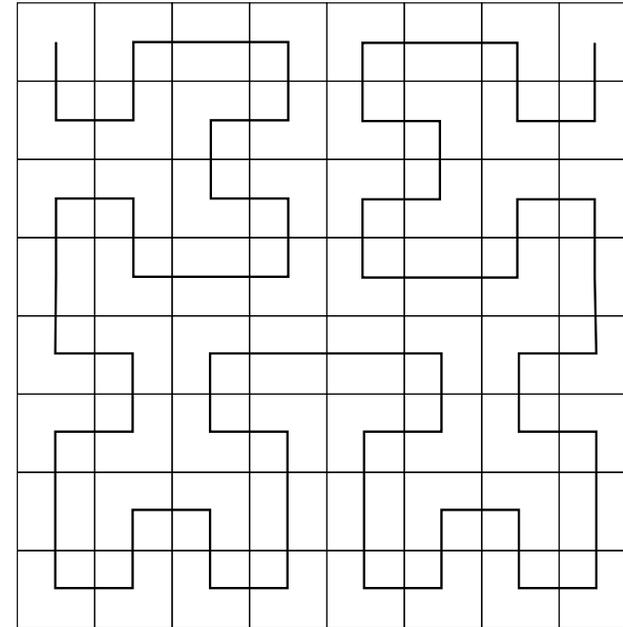
- Formulations intégrales : EFIE, MFIE, CFIE
- 2 modèles : HF-FMM, SPW-FMM
gestion par FMM générique
- Code C++ : Programmation OO, généricité, *iWarp*
- Parallélisme de type Cluster
Mémoire distribuée, MPI, EasyMSG, *Load Balancing*, gestion «in/out of core»
- Bibliothèques optimisées : FFTW, Blas, Lapack, METIS

Partitionnement des dépendances

Méthodes classiques



Courbe de Morton 2D
à 3 niveaux

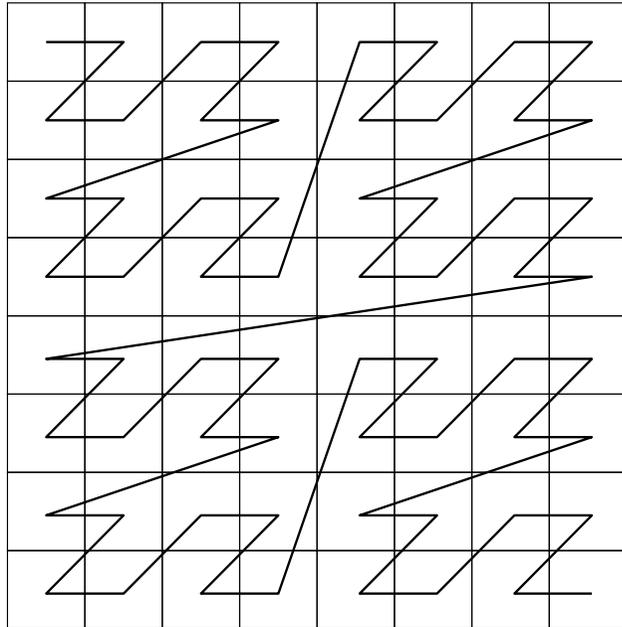


Courbe de Hilbert 2D
à 3 niveaux

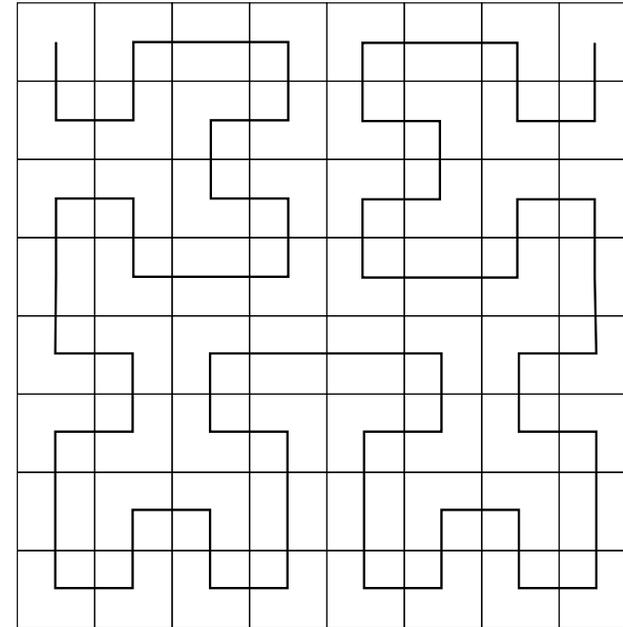
Localité garantie en pleine dimension . . .

Partitionnement des dépendances

Méthodes classiques



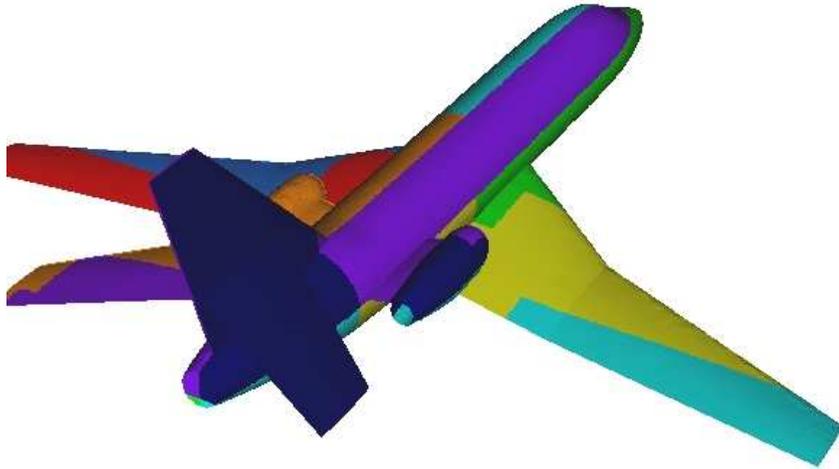
Courbe de Morton 2D
à 3 niveaux



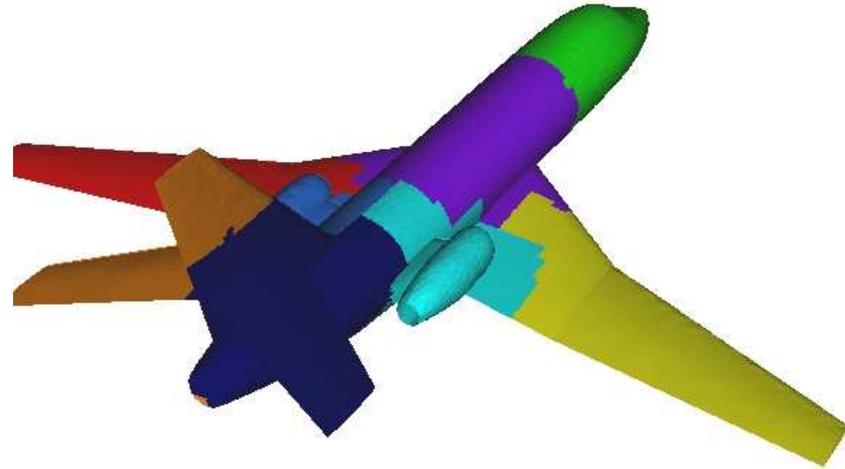
Courbe de Hilbert 2D
à 3 niveaux

Localité garantie en pleine dimension . . .
sinon le pire est possible.

Partitionnement des dépendances



Octree



Graphes à poids

Objet	CPUs	Volume	Transf	Up	Global
Sphere	8	+0.0%	-0.2%	+0.0%	
	10	-8.8%	-8.1%	+2.2%	
Falcon	8	-34.1%	-53.7%	+1.9%	-32.0%
	10	-30.1%	-29.0%	+20.0%	-29.9%
RFalcon	8	-21.6%	-32.7%	+7.1%	-23.0%
	10	-25.7%	-31.4%	+6.5%	-23.5%

Equilibrage dynamique de charge

Pourquoi ?

- Estimations statiques complexes :
Algorithmes, communications...
- Architecture parallèle hétérogène :
Processeurs, réseaux, compétition d'accès...

Equilibrage dynamique de charge

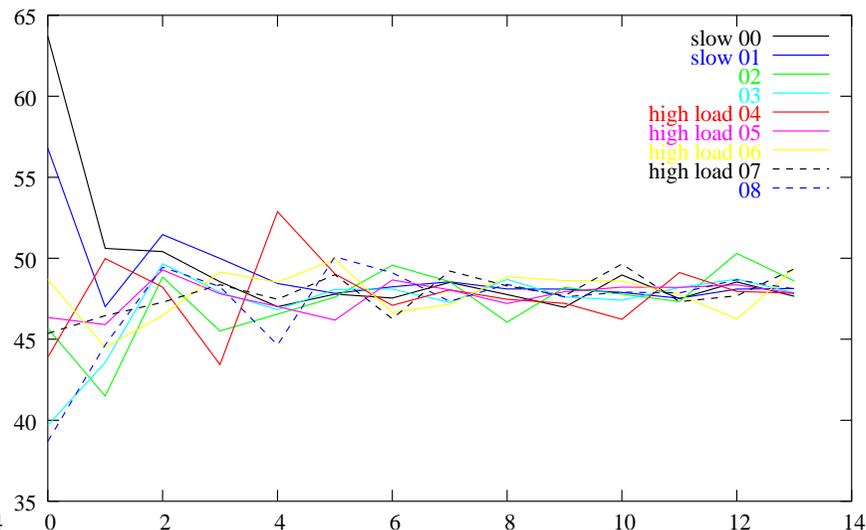
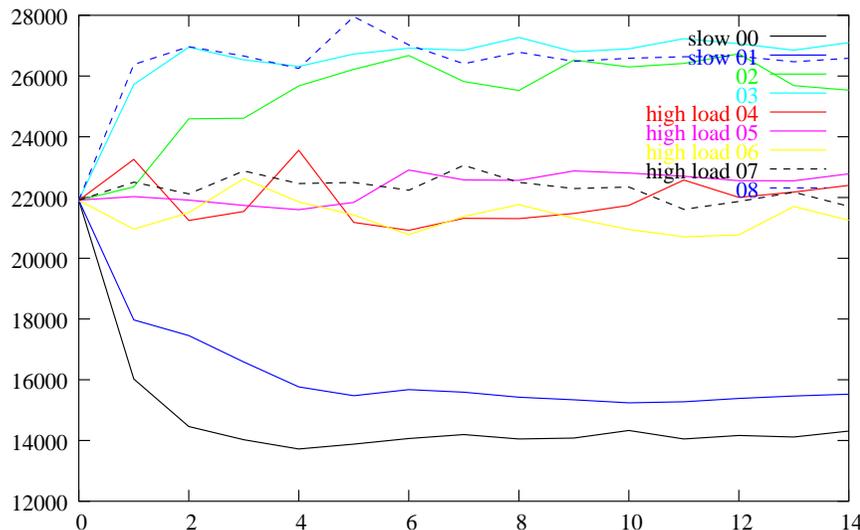
Pourquoi ?

- Estimations statiques complexes :
Algorithmes, communications...
- Architecture parallèle hétérogène :
Processeurs, réseaux, compétition d'accès...

Prérequis :

- Estimateurs *a priori*
~ quantité de données
- Estimateurs *a posteriori*
~ ressources consommées (ex : temps)

Equilibrage dynamique de charge

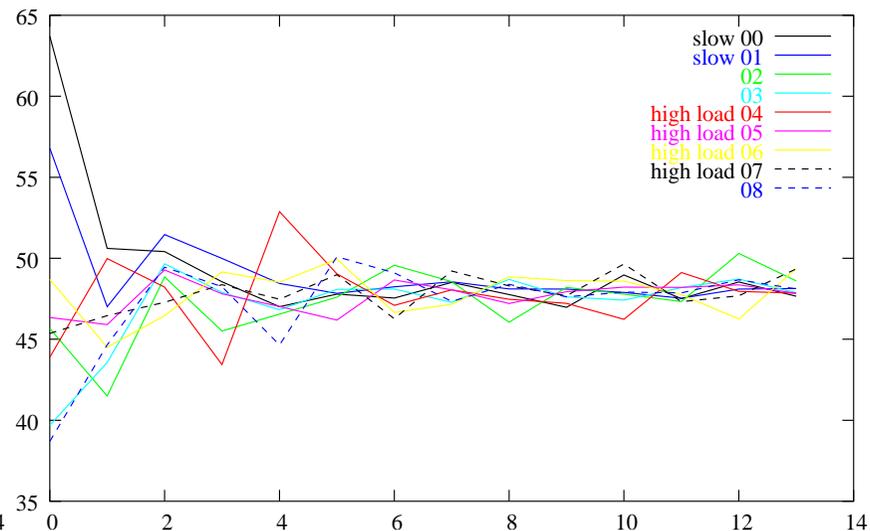
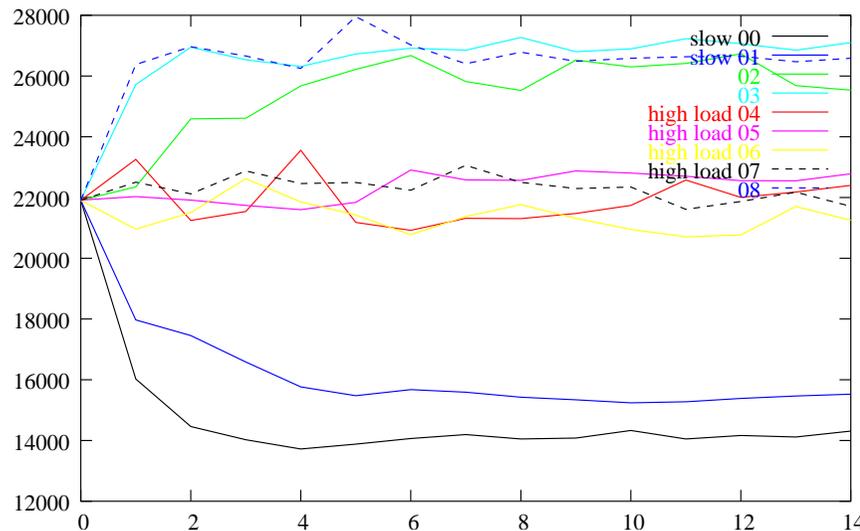


Convergence de la charge

Temps d'une itération

Environnement hétérogène

Equilibrage dynamique de charge



Convergence de la charge

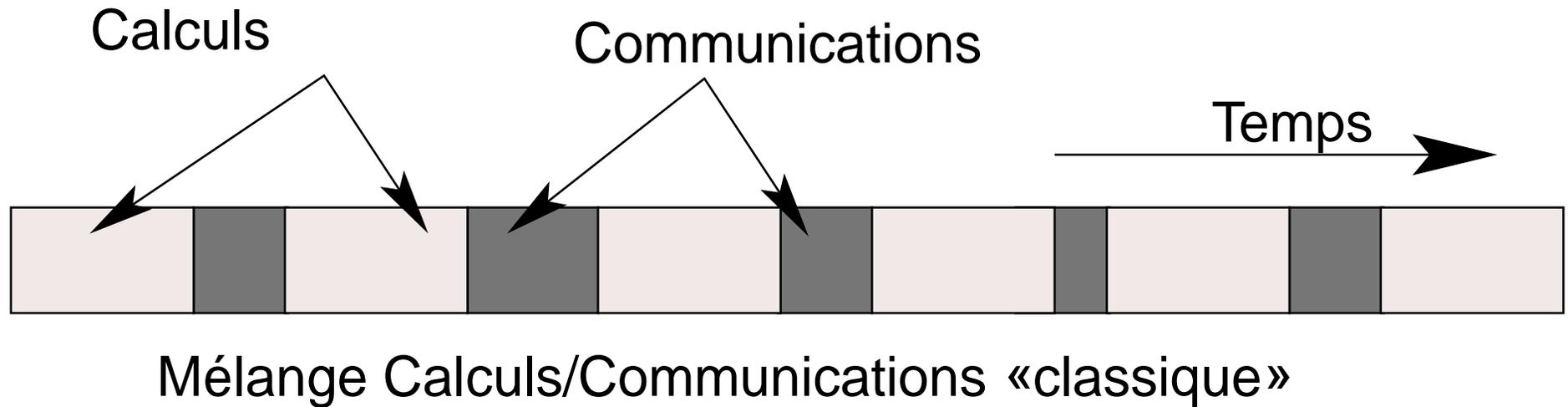
Temps d'une itération

Environnement hétérogène

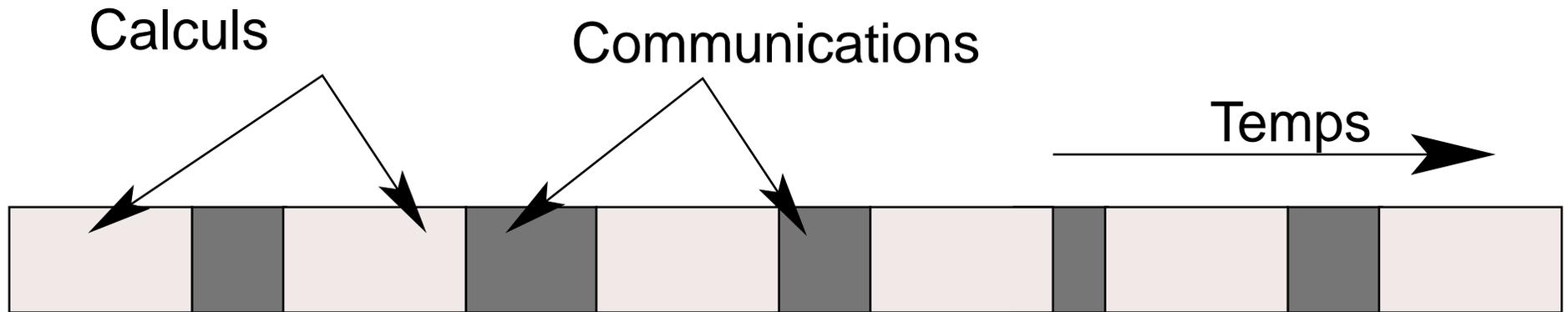
Accompagné de méthodes de

- Partitionnement «from scratch»
- Re-partitionnement de graphes
- Migration + reconstructions locales

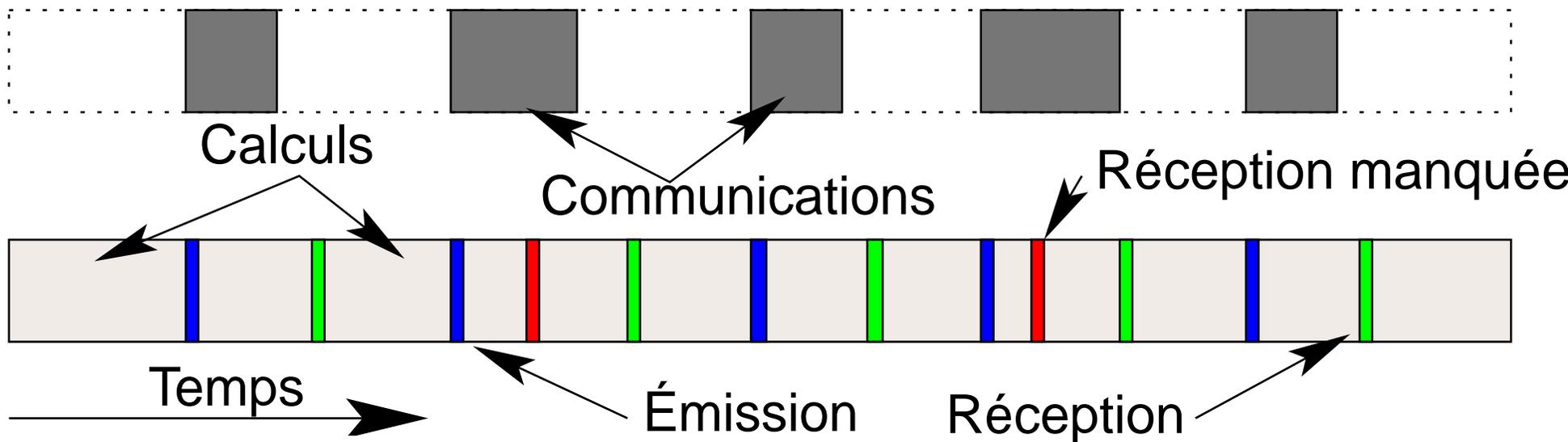
Optimisation par «Overlapping»



Optimisation par «Overlapping»



Mélange Calculs/Communications «classique»



«Overlapping» de Calculs/Communications

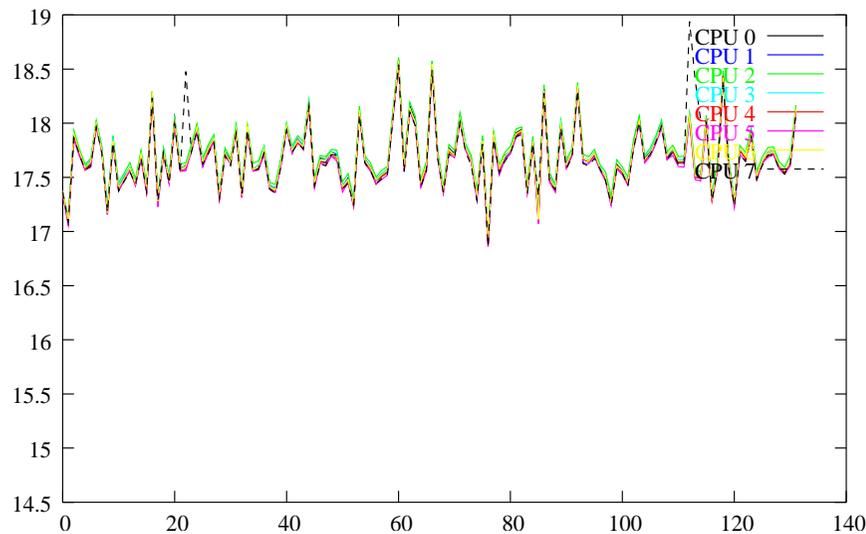
Optimisation par «Overlapping»

CPU	local interactions	interactions non locales	temps	efficacité
CSR	-	-	6.60s	-
1	1150×10^3	0	4.08s	100%
2	577×10^3	2300	2.02s	101%
4	287×10^3	2300	1.00s	102%
8	143×10^3	1700	0.49s	104%
16	71×10^3	2000	0.31s	82%*

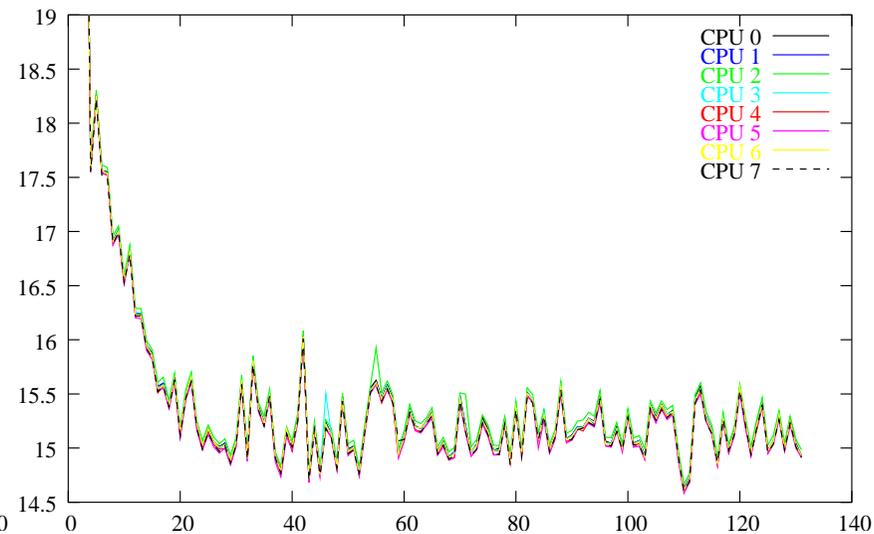
Interactions proches (matrice «Block CSR Matrix» de 16×10^6 valeurs)

Optim. par «Overlapping» Adaptatif

EasyMSG : Bibliothèque C++/MPI de gestion simplifiée de communications pour l'«Overlapping»

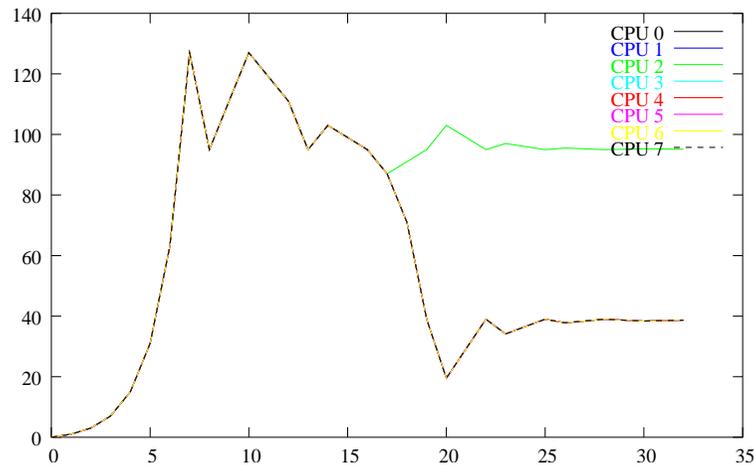


«Overlapping» Statique



«Overlapping» Dynamique

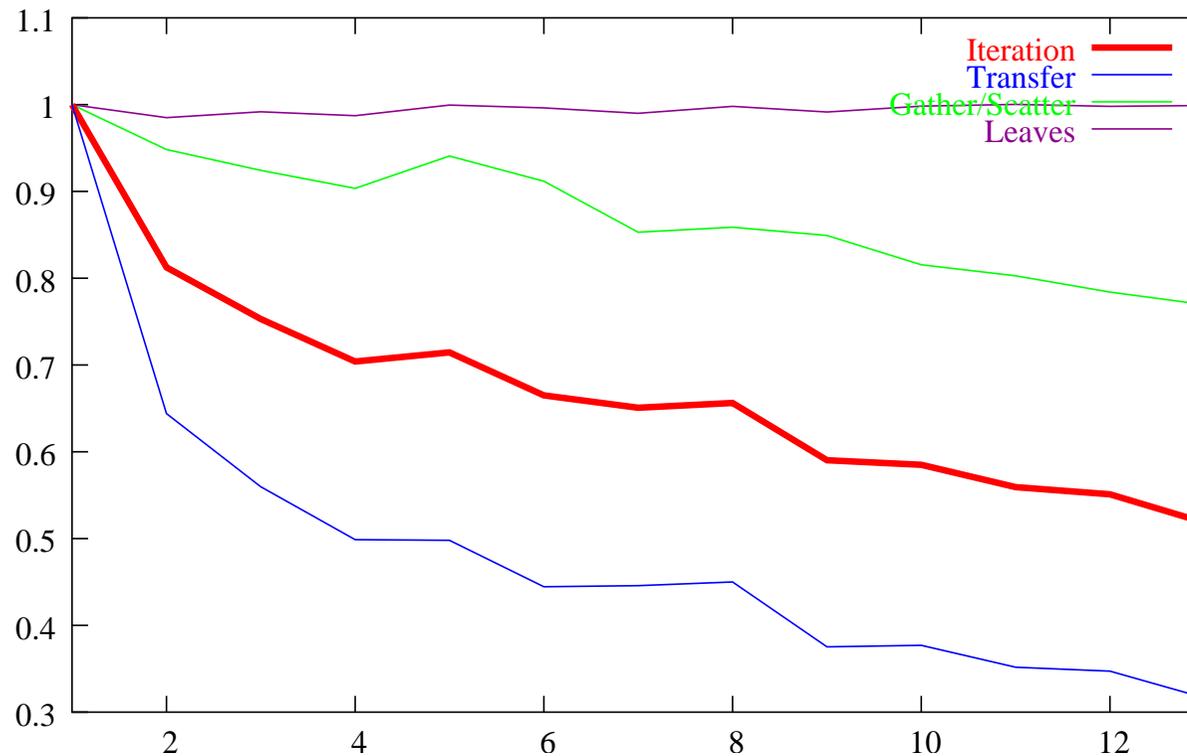
Optim. par «Overlapping» Adaptatif



Évolution du paramètre
d'agrégation

- Réglage automatique :
Optimisation par compétition
Réseau hétérogène
- Adaptativité plus réactive :
à l'intérieur d'une itération
fort trafic & collisions

Performance parallèle

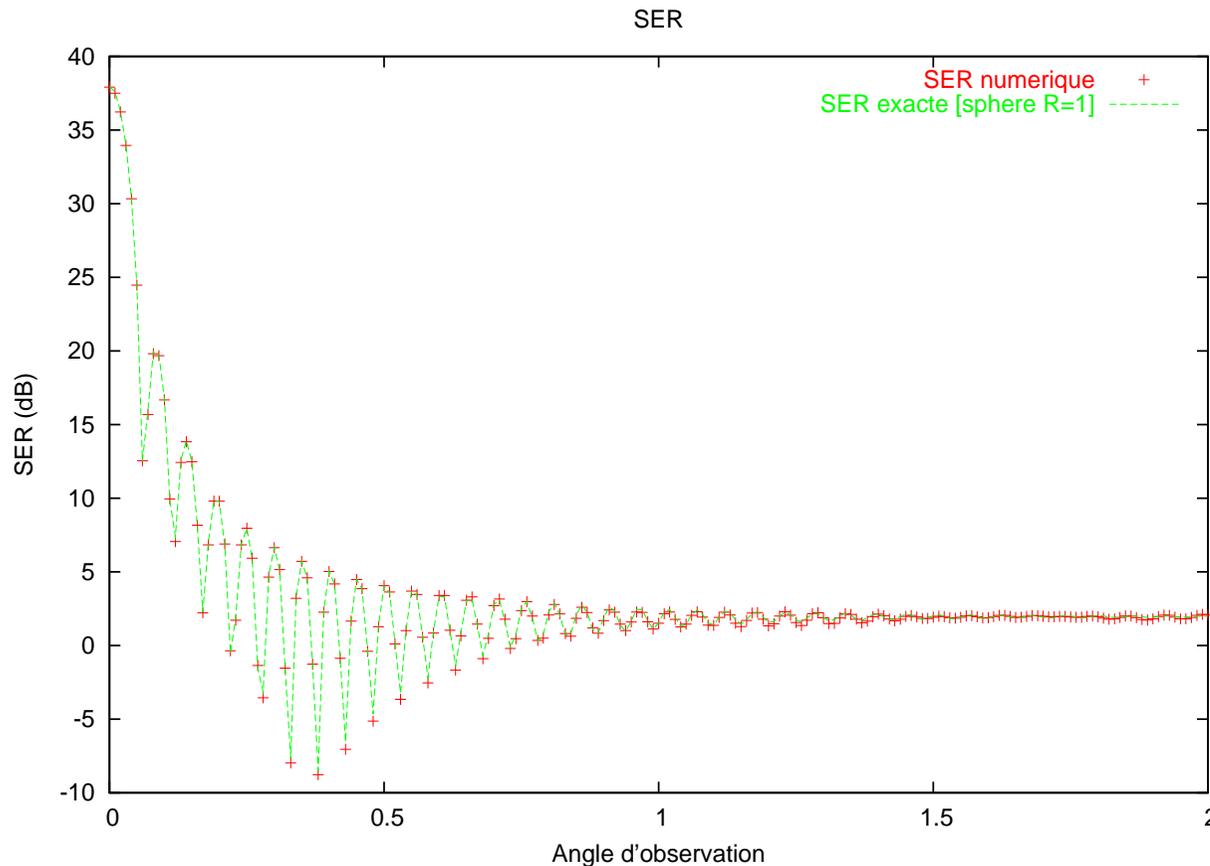


Effi cacité des composants FMM

Résultats Numériques

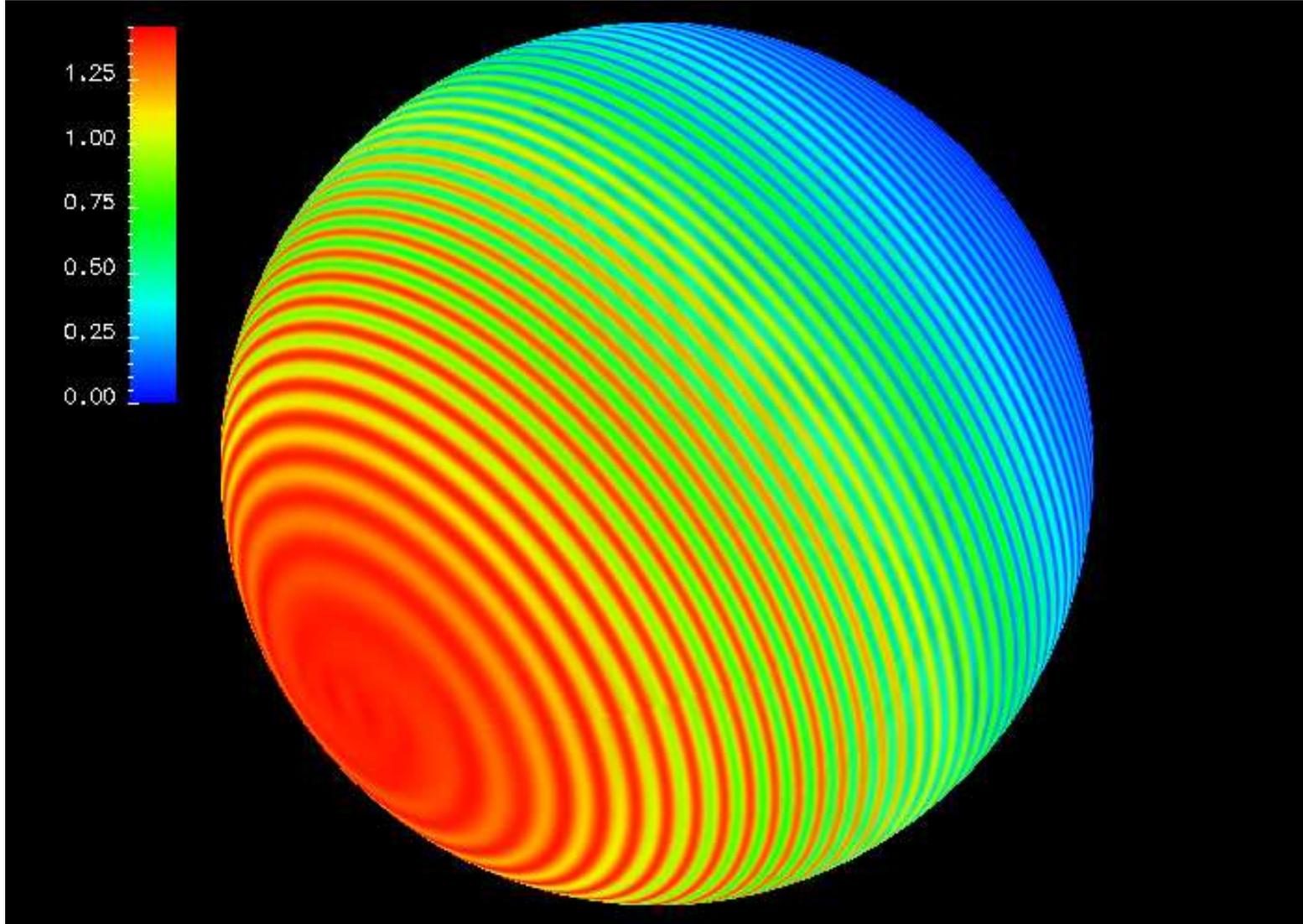
- Objets parfaitement conducteurs
- Constantes diélectriques :
 $\mu_0 = 1.25751 \times 10^{-6}$, $\epsilon_0 = 8.84806 \times 10^{-12}$
($c = 299792548.2m/s$)
- Formulation CFIE
- Solveur Iteratif : GMRES
- Approximation du noyau à $\epsilon = 10^{-4}$

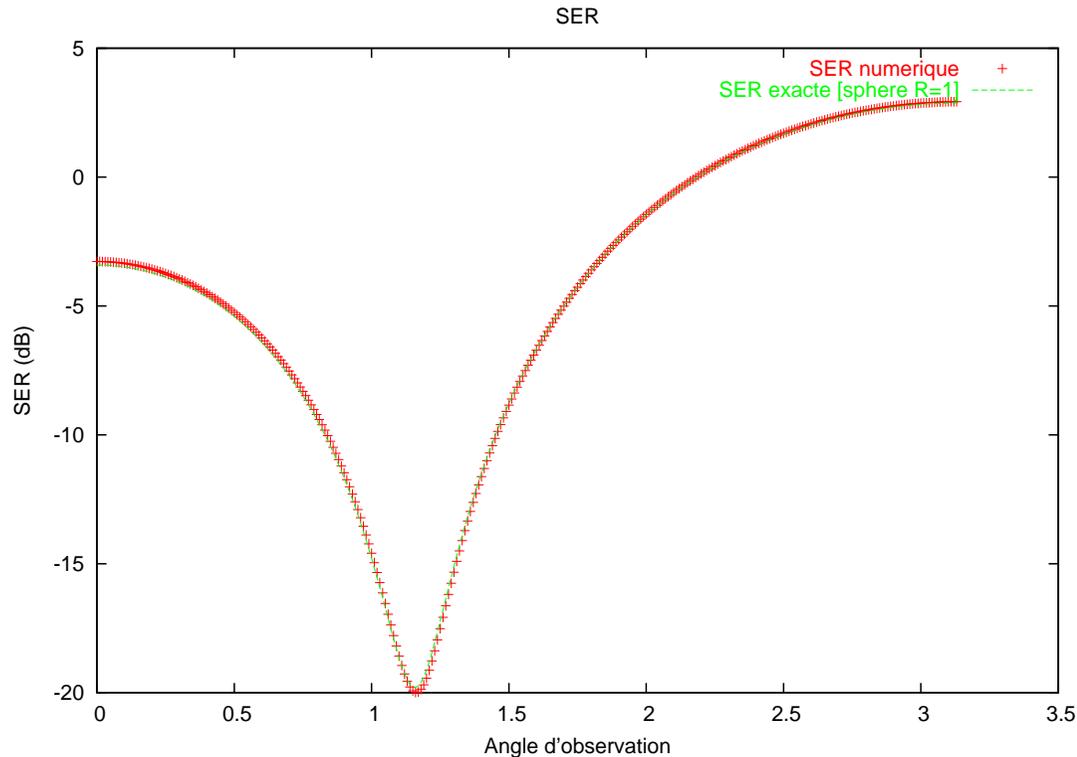
Résultats Numériques : Sphère 600K20.



FMM à 8 niveaux avec des discrétisations de 160×81 à 20×11 et de $(7 : 4) \times 140$ à $(14 : 5) \times 40$.

Résultats Numériques : Sphère 600K20.

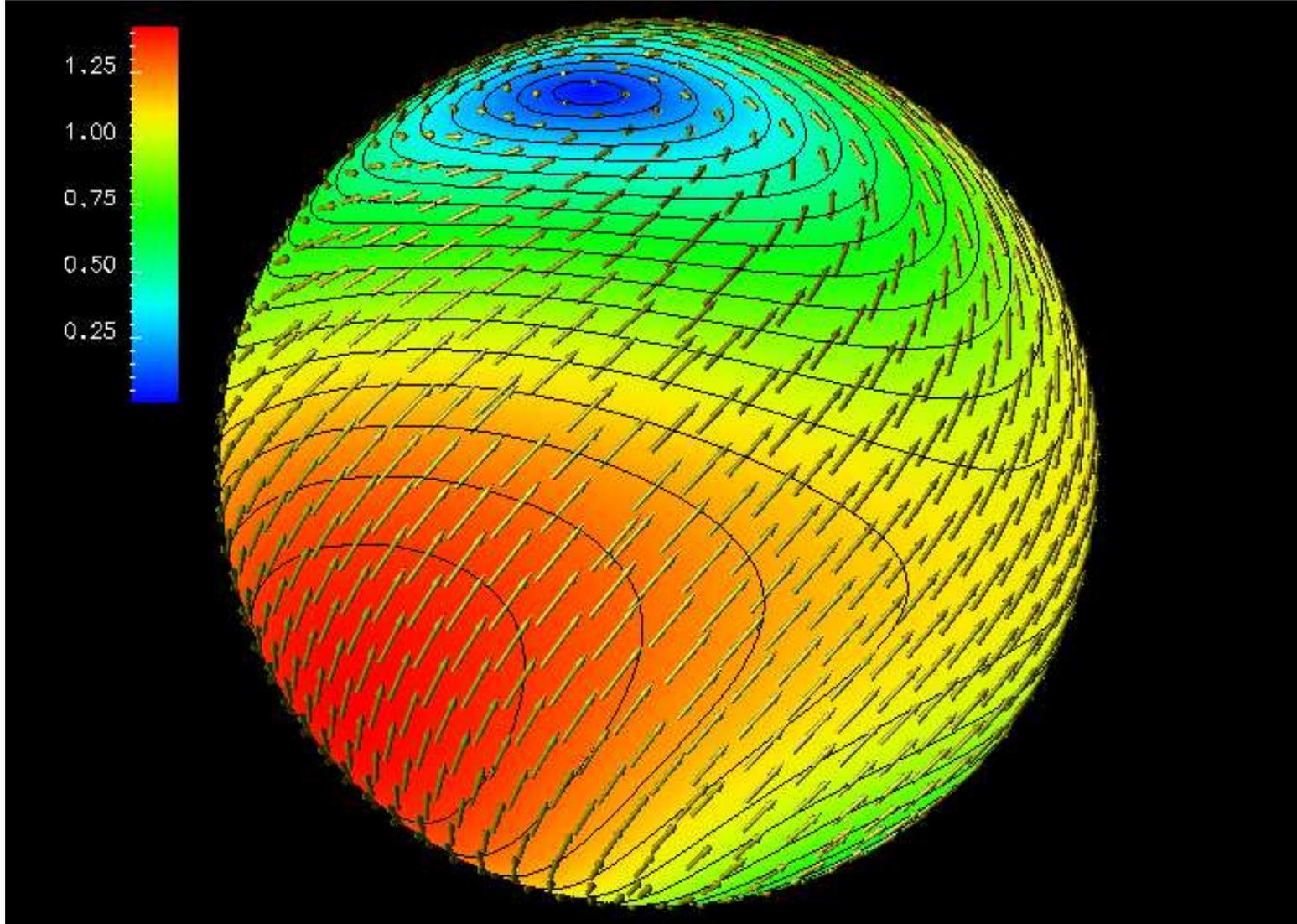


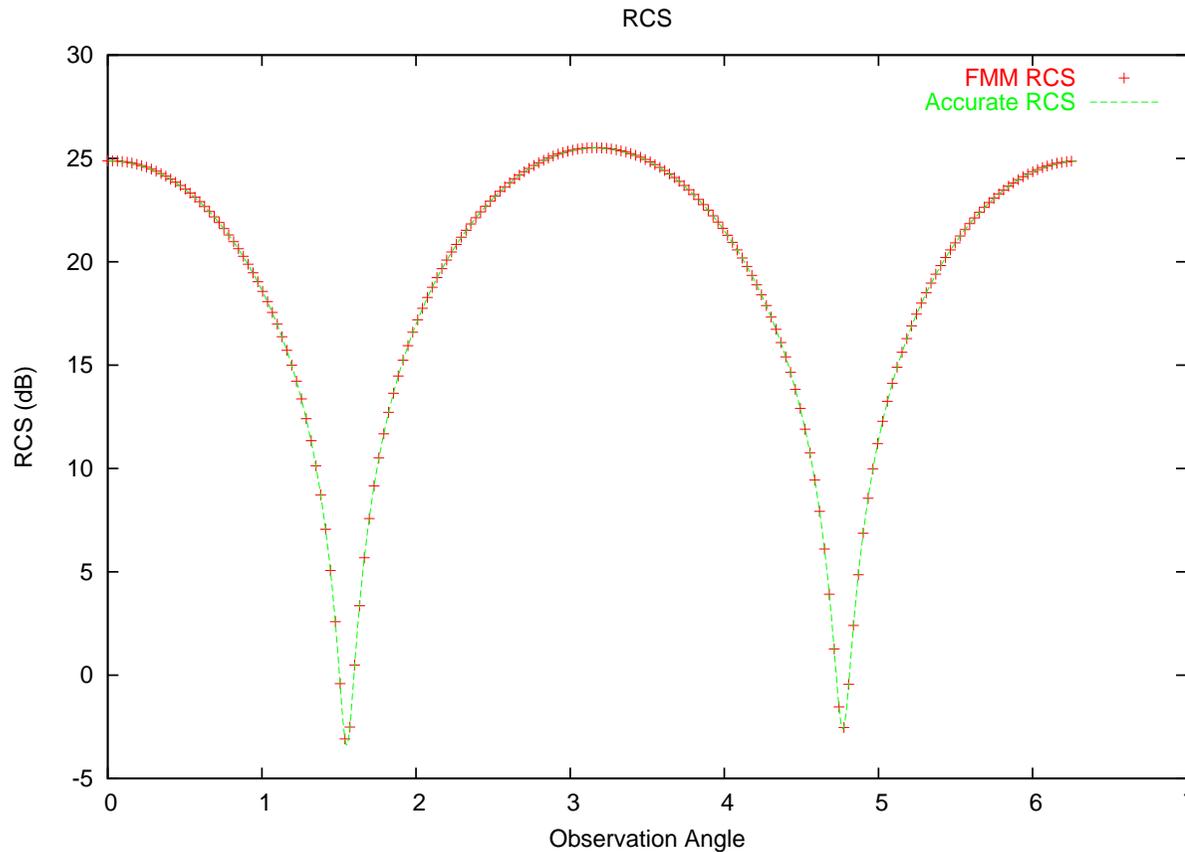


FMM à 8 niveaux avec des discrétisations de 12×7 à 6×4 et de $(17 : 6) \times 40$ à $(16 : 5) \times 40$.

Résultats Numériques : Sphère 50K $\frac{\lambda}{5}$

$\frac{\lambda}{5}$

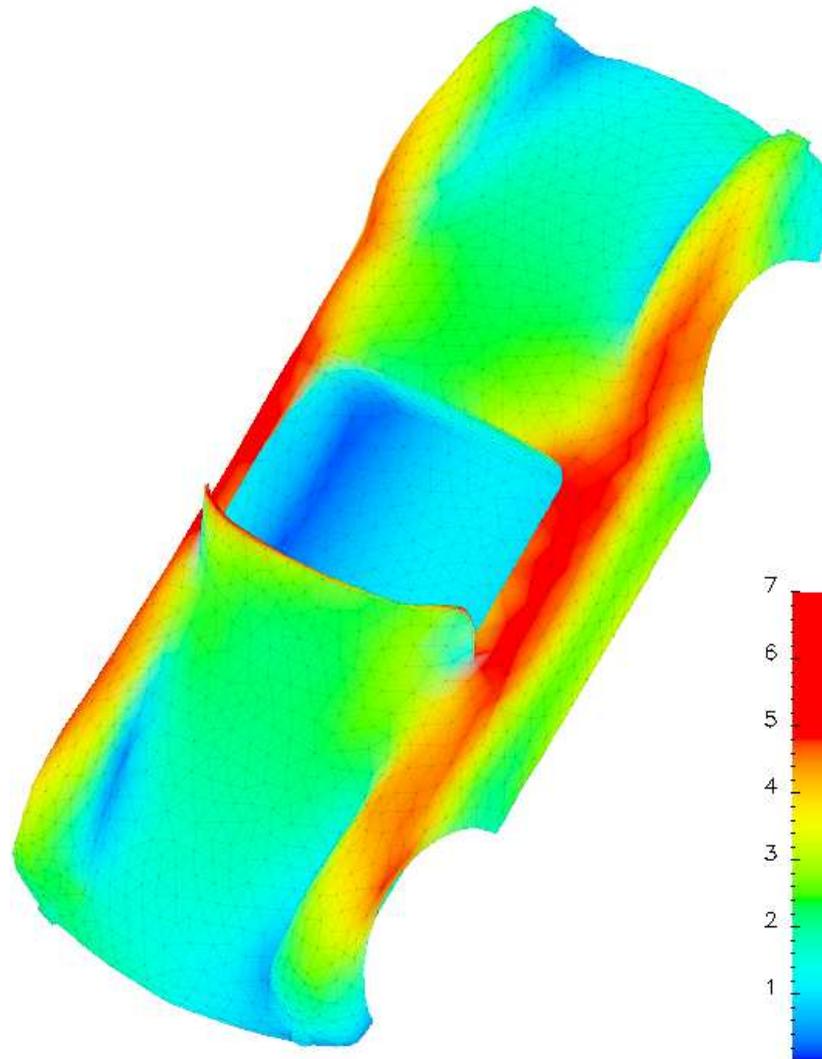




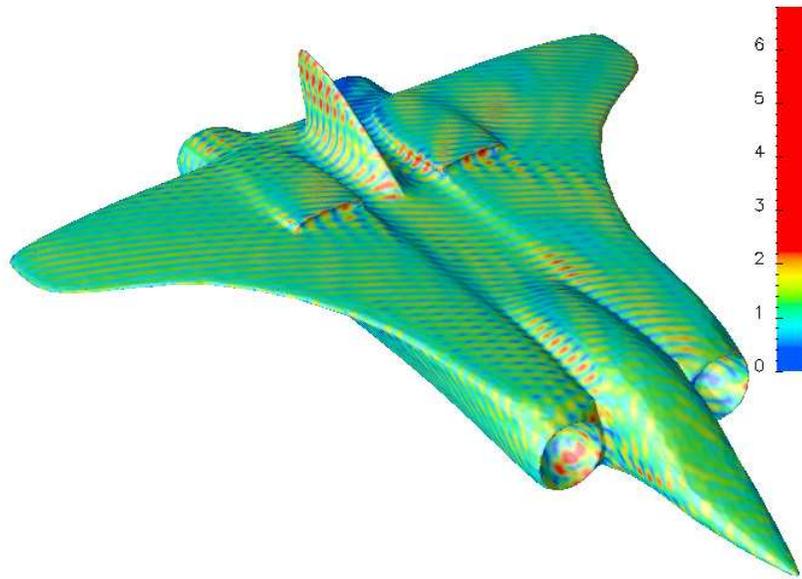
Comparaison des SER entre par SPW-FMM et par assemblage de la matrice du système.

42min/320Mo et 6min/3.2Go pour 352 itérations.

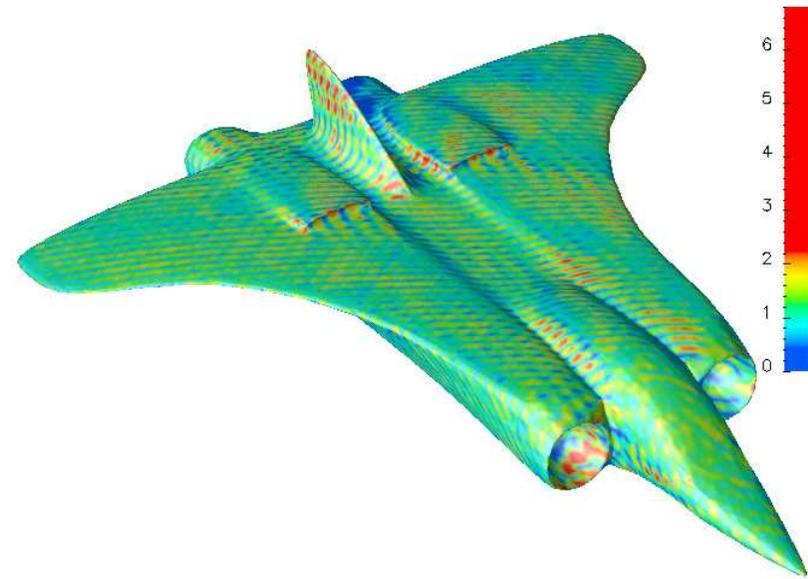
Résultats Numériques : Voiture 11K $\frac{\lambda}{2}$



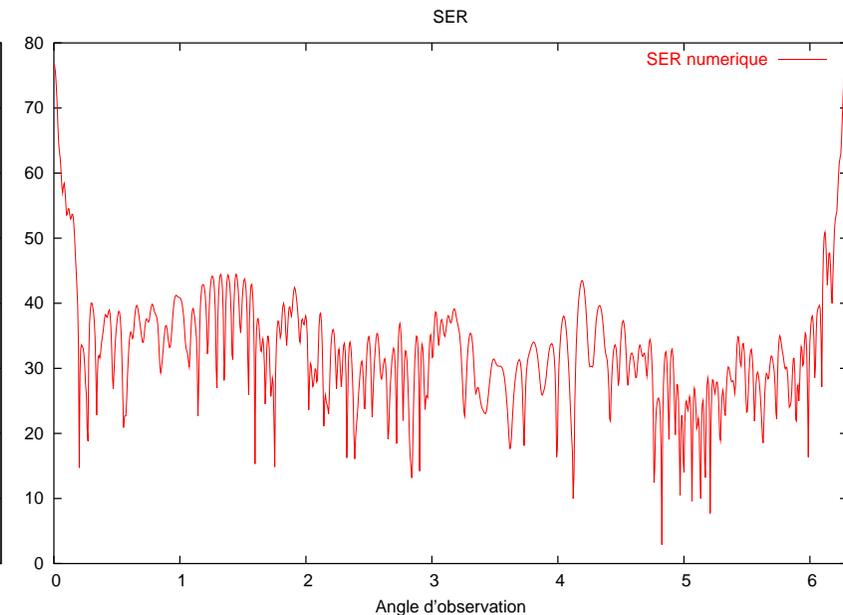
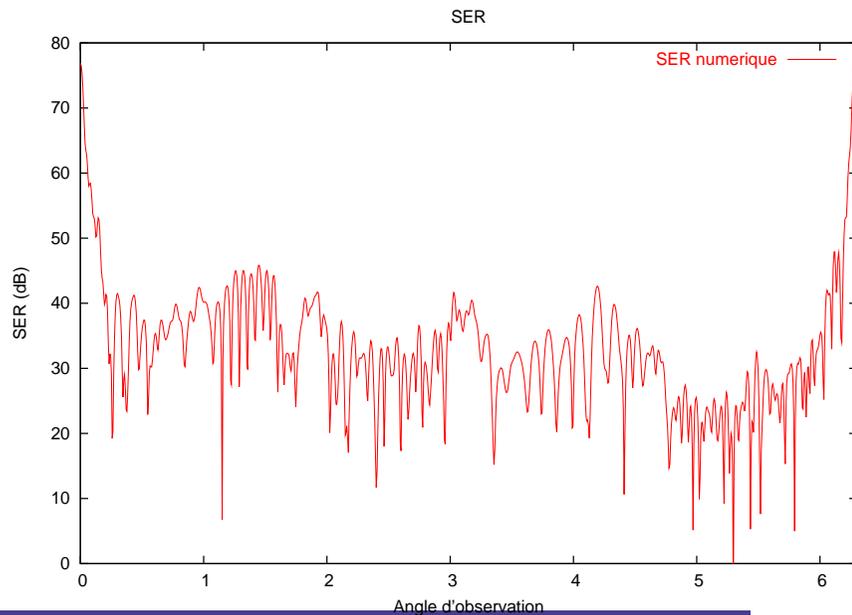
Avion 42λ, 500K



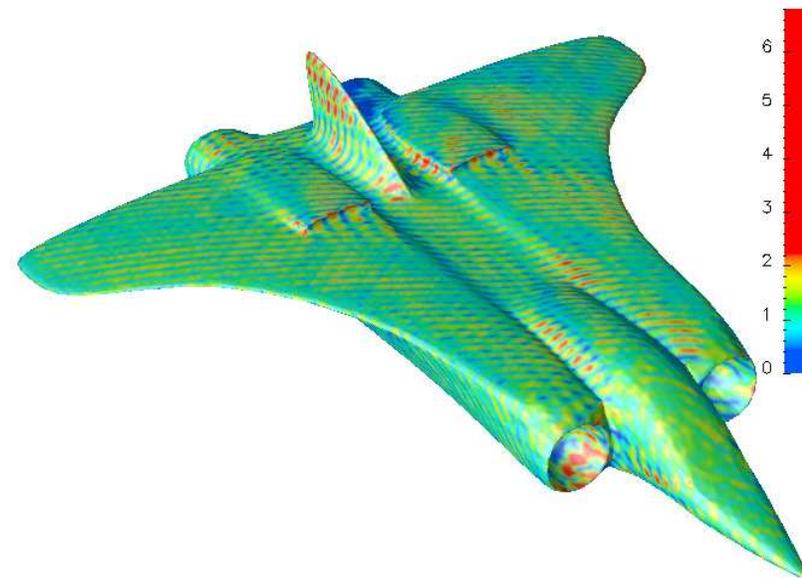
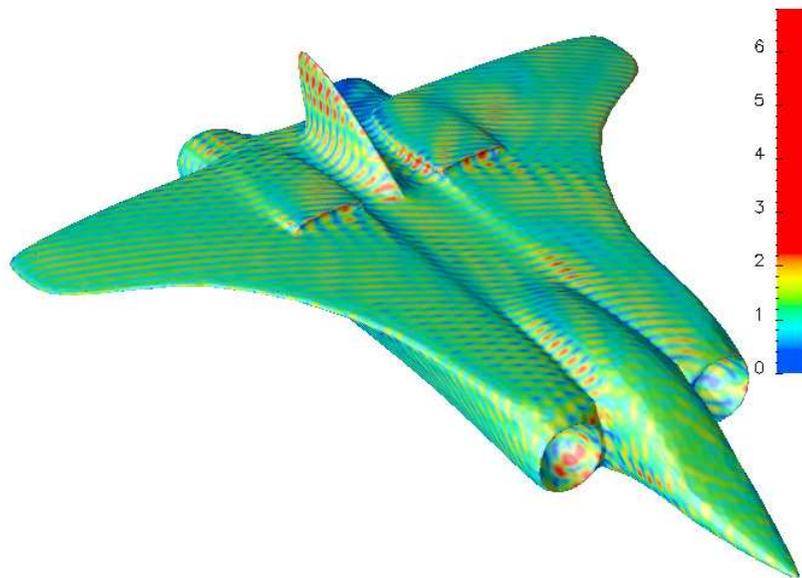
HF-FMM



SPW-FMM



Avion 42λ, 500K



	HF-FMM	SPW-FMM
Initialisation+Intégration	9s (6%)	92s (16%)
Agrégation	18s (13%)	96s (17%)
Transfert	103s (73%)	318s (57%)
Dispersion	11s (8%)	52s (9%)
Total	141s	557s

Coûts FMM par itération

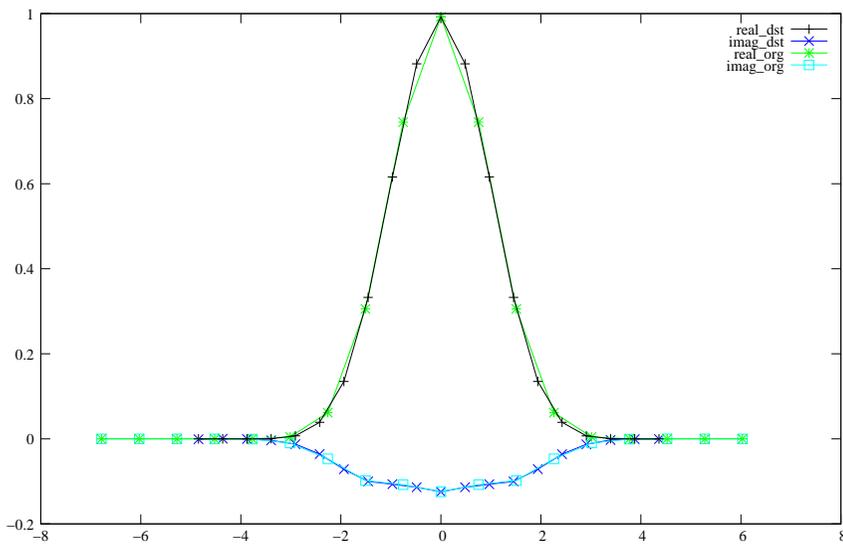
Conclusions

- Stabilité à toutes fréquences :
Domaine de performance plutôt orienté de basses à moyennes fréquences
- De fort gain potentiel au niveau de la réduction du nombre de transferts
$$K(\zeta, \vec{z}_1 + \vec{z}_2) = K(\zeta, \vec{z}_1)K(\zeta, \vec{z}_2)$$
- Les prémisses de l'adaptativité
 \rightsquigarrow au niveau FMM
 \rightsquigarrow maillage adaptatif
- Des outils d'optimisations du parallélisme
 \rightsquigarrow Plus de coopération moins de compétition.

Conclusions

- Améliorations à base de FFT
 \rightsquigarrow Plus rapides, plus fiables

Interpolation



Fonction de transfert

