

ACTION CONCERTEE INCITATIVE 2002

Globalisation des **R**essources **I**nformatiques et des **D**onnées

DOSSIER COMPLET

INSCRIPTION

DATE LIMITE D'ENVOI : **lundi 21 janvier 2002**

2 EXEMPLAIRES PAPIER :

Ministère de la Recherche
Département Sciences Mathématiques et STIC
Maryse LA GREVE
ACI-GRID
1, Rue Descartes
75231 Paris cedex 05

1 EXEMPLAIRE PAR COURRIER ELECTRONIQUE :

ACI-GRID@sophia.inria.fr.

CONTENU :

Description détaillée : 4 à 8 pages,
L'ensemble n'excédant pas 15 pages.

Pour toute information complémentaire contacter :

ACI-GRID@sophia.inria.fr.

Tel : 04.92.38.77.95

Fax : 04.92.38.79.78

ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

DOSSIER COMPLET

Catégorie :

Exemple : Animation, International,
Jeune Equipe....

pluridisciplinaire

Référence et titre du Projet :

Exemple : PPL1 -XYZ

**HydroGrid
Couplage de codes pour le
transfert de fluides et de solutés
dans les milieux géologiques : une
approche par composants
logiciels**

Coordinateur du projet :

Michel Kern
Projet Estime – INRIA Rocquencourt

Liste des établissements et des laboratoires

partenaires du projet :

(on précisera le nom complet du
laboratoire et l'abréviation usuelle)

- * Projet **Estime**, INRIA Rocquencourt.
- * Projet **Aladin**, INRIA Rennes / IRISA.
- * Projet **Paris**, INRIA Rennes / IRISA.
- * Equipe **ASCII**, INRIA Rennes / IRISA.
- * Équipe **Transferts Physiques et Chimiques**, Géosciences, Université de Rennes I (TPC).
- * Equipe **Hydrodynamique et transferts en Milieu Poreux**, Institut de Mécanique des Fluides et des Solides, Université Louis Pasteur de Strasbourg (**HTMP**).

ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des **R**essources **I**nformatiques et des **D**onnées

DOSSIER COMPLET

**Visa du directeur du
laboratoire auquel
appartient le coordinateur
du projet :**

(ce visa n'est demandé que sur les deux
exemplaires papier à envoyer au
Ministère de la Recherche)

A- Identification du Coordinateur et des autres partenaires du Projet :

A1- Coordinateur du Projet :

M. ou Mme. Prénom Nom	M Michel Kern
Fonction	Chargé de Recherche
Laboratoire	Projet Estime, INRIA Rocquencourt
Adresse	BP 105, 7153 Le Chesnay Cedex
Téléphone	01 39 63 58 41
Fax	01 39 63 58 84
Mél	Michel.Kern@inria.fr

A2- Autres partenaires du Projet :

M. ou Mme. Prénom Nom	Mme Jocelyne Erhel
Fonction	Directeur de Recherche
Laboratoire	Projet Aladin, IRISA / INRIA Rennes
Adresse	Campus de Beaulieu 35042 Rennes
Téléphone	02 99 84 73 39
Fax	02 99 84 25 27
Mél	Jocelyne.Erhel@irisa.fr

ACTION CONCERTEE INCITATIVE 2002Globalisation des **R**essources **I**nformatiques et des **D**onnées**DOSSIER COMPLET**

M. ou Mme. Prénom Nom	M Christian Perez
Fonction	CR INRIA
Laboratoire	Projet Paris, IRISA / INRIA Rennes
Adresse	Campus de Beaulieu 35042 Rennes
Téléphone	02 99 84 72 05
Fax	02 99 84 25 28
Mél	Christian.Perez@irisa.fr

M. ou Mme. Prénom Nom	M Hugues Leroy
Fonction	IR INRIA
Laboratoire	Service ASCII, IRISA / INRIA Rennes
Adresse	Campus de Beaulieu, 35042 Rennes
Téléphone	02 99 84 74 17
Fax	02 99 84 71 00
Mél	Hugues.Leroy@irisa.fr

M. ou Mme. Prénom Nom	M Philippe Davy
Fonction	DR CNRS
Laboratoire	Géosciences Rennes — UMR 6118
Adresse	Bat 15 – Recherche Géosciences 263 Ave. du Général Leclerc CS 74205 35042 RENNES CEDEX
Téléphone	02 99 28 60 76
Fax	02 99 28 16 43
Mél	Philippe.Davy@univ-rennes1.fr

M. ou Mme. Prénom Nom	M Philippe Ackerer
Fonction	DR CNRS
Laboratoire	IMFS Strasbourg — UMR 7507
Adresse	2, rue Boussingault 67000 STRASBOURG
Téléphone	03 90 24 29 09
Fax	03 88 61 43 00
Mél	Ackerer@imfs.u-strasbg.fr

B- Description du Projet :

B1- Objectif, contexte et description du projet (4 à 8 pages) :

Vous préciserez :

- *Les objectifs scientifiques et les résultats attendus,*
- *Les réalisations logicielles,*
- *Le calendrier des différentes phases du projet,*
- *Le calendrier de réalisation,*
- *L'implication des différents partenaires dans chacune des phases du projet,*
- *Le mode d'organisation du projet : rôle du coordinateur, responsables de tâches, mode d'interaction, organisation budgétaire, etc..*

Motivations

Les transferts de fluides et de solutés dans les milieux souterrains sont au centre de nombreuses problématiques énergétiques et environnementales. Des problèmes apparus récemment concernent la contamination des aquifères par des polluants, l'intrusion d'eau salée dans les aquifères et le stockage profond des déchets nucléaires. Ils ont fait apparaître l'importance de phénomènes physico-chimiques complexes.

- Pour la **contamination des aquifères**, le devenir d'un polluant dépend à la fois de la physique des écoulements et de la réactivité chimique du polluant. Ces deux phénomènes physiques et chimiques sont en eux-mêmes complexes et sont par conséquent traités traditionnellement séparément, malgré la connaissance de couplages importants. Dans un sens la réactivité chimique détermine les propriétés physiques. Par exemple, les réactions de précipitation et de dissolution modifient les propriétés hydrauliques du milieu. À l'extrême, les réactions de dissolution dans les milieux karstiques transforment un milieu poreux faiblement perméable en un milieu très perméable où les écoulements sont très rapides et éventuellement turbulents. Dans l'autre sens, la physique des écoulements influence la réactivité chimique des éléments en solution. Par exemple, la dispersion ou la concentration des écoulements et la large gamme des vitesses d'écoulement conduisent à la sélection des réactions chimiques et de leur contrôle cinétique ou thermodynamique.
- **L'intrusion d'eau salée dans les aquifères** menace les ressources d'eau douce d'une part importante des populations. La modélisation des mélanges eau douce- eau salée se heurte au premier abord à l'instabilité de l'interface entre l'eau douce et l'eau salée. Il existe un couplage des équations d'écoulement de fluide et de transport de sel. Dans un sens, l'écoulement conditionne la diffusion de sel de l'eau salée vers l'eau douce. Dans l'autre sens, la concentration de sel détermine la viscosité du fluide et par conséquent l'écoulement de fluide.
- **Le stockage profond de déchets nucléaires** de longue durée de vie est le problème le plus complexe à cause de l'échelle temporelle à considérer (plusieurs dizaines de milliers d'années), du couplage thermo-hydro-mécanique à modéliser et de la qualité de la prédiction demandée. L'introduction des déchets nucléaires induit une élévation de température dans le milieu qui à son tour modifie les propriétés mécaniques et hydrauliques du milieu. Le problème se situe à plusieurs niveaux dans la caractérisation physique des couplages, dans l'influence de l'hétérogénéité sur ces couplages et dans la mise au point de méthodes de simulation numérique adaptées. L'impact croissant du stockage avec la proximité du site de stockage et la méconnaissance du milieu loin du site nécessitent une adaptation du type et de la précision du modèle avec la distance au site. Des modèles déterministes peuvent être utilisés autour du site de stockage, là où les mesures hydrauliques et géophysiques peuvent donner une image précise du milieu. Loin du site, à cause du manque de données, des modèles stochastiques moyens (pas forcément homogènes) devront

être utilisés. Le caractère aléatoire traduit l'absence d'une image parfaite du milieu. Les modèles moyens sont des modèles simplifiés de milieu qui retiennent les principaux facteurs entrant dans la détermination des phénomènes physiques étudiés. Au-delà de la mise au point des modèles moyens, l'estimation *a priori* de leur précision est capitale en ce qu'elle détermine la capacité à évaluer le risque de fuite d'un site de stockage.

Ces différents problèmes couplés ont lieu dans des milieux souterrains caractérisés par leur très forte hétérogénéité venant de la large variabilité des propriétés hydrauliques du milieu, de la présence de fractures et de minéraux ayant des propriétés chimiques différentes. Cette forte hétérogénéité a deux conséquences majeures:

- l'expression des phénomènes physiques est éventuellement fonction de l'échelle
- le milieu ne peut être décrit que partiellement par les données. Il est ainsi nécessaire de mettre au point des modèles moyens plus simples que le milieu réel et ayant les mêmes propriétés physiques.

Objectifs scientifiques

Le projet HydroGrid a pour but de modéliser et simuler des transferts de fluides et de transport de solutés dans des milieux géologiques souterrains. Les logiciels ont des besoins en capacité de stockage et de calcul qui croissent très vite avec le nombre de mailles utilisées pour discrétiser les modèles. Dans beaucoup de simulations, la taille du domaine de calcul entraîne un nombre de mailles très important. Des simulations réalisées récemment, sur un modèle simplifié 2D, ont montré qu'il fallait environ 50 000 degrés de libertés pour atteindre une précision satisfaisante, et qu'un temps de calcul typique était de l'ordre de 10 heures. Pour traiter des domaines tridimensionnels avec une résolution suffisante, la capacité mémoire requise serait au moins de l'ordre de dix à cent Giga-octet et le temps de calcul serait de l'ordre de plusieurs mois sur une station de travail.

Le recours au parallélisme permet d'accélérer les calculs. Après les machines parallèles et les grappes de PC, le développement des réseaux longues distances a fait apparaître la grille, ensemble de machines parallèles et/ou de grappes de PC. Il est ainsi possible d'agréger d'énormes puissances de calcul, notamment pour coupler des modèles physiques.

Chaque phénomène physico-chimique est simulé par un code spécifique. Pour simuler numériquement un problème physique couplé, il est souhaitable de laisser ces codes intacts. En effet, les modèles sont discrétisés en espace par des méthodes différentes selon les propriétés physico-chimiques, afin de conserver les invariants, de respecter le principe du maximum, etc. Ensuite, les schémas en temps sont également spécifiques, afin de respecter les échelles temporelles, de conserver les invariants, etc. Enfin, certains logiciels peuvent nécessiter des bibliothèques numériques qui ne sont disponibles que dans certains centres de calcul.

Afin de pouvoir interfacier simplement et efficacement ces différents codes, nous choisissons une approche de couplage : chaque code est un composant logiciel de l'application qui n'interagit avec les autres codes qu'au niveau de son interface. Ainsi, la maintenance des codes en est grandement facilitée.

Cette approche du couplage de codes par composants logiciels soulève immédiatement le problème de son adéquation aux grilles de calcul. Les infrastructures logicielles, telles que Globus ou Légion, ne proposent pas l'utilisation de modèles de composant car ils présupposent des courtiers d'objets (ORB pour CORBA ou RMI pour Java) capables de fonctionner dans un environnement de grille de calcul. Le couplage de code est souvent réalisé à l'aide de bibliothèques de messages (comme par exemple MPI) ou de sur-couches logicielles au-dessus de ces bibliothèques (tel que MpCCI¹). La réalisation de courtiers d'objets pour des grilles de calcul est un sujet de recherche en soi. En effet, la plupart des courtiers d'objets actuellement disponibles ne prennent que des technologies réseaux

¹ <http://www.mpcci.org>

disposant d'une mise en œuvre du protocole TCP/IP alors que les grilles de calcul disposent très souvent d'un grand nombre de réseaux (WAN, LAN, SAN – System Area Network). Un courtier d'objets doit être capable d'exploiter les ressources réseaux de façon transparente, comme par exemple Myrinet ou bien SCI dans le domaine des SAN, sans que le concepteur de l'application n'ait à modifier son application. Des travaux ont débuté dans ce sens dans le cadre de l'ACI GRID RMI qui permettent d'entrevoir la disponibilité de courtiers d'objets haute-performance pour des grilles de calcul d'ici quelque mois. Ceci permettra donc d'utiliser des modèles de composants tels que CCM – CORBA Component Model - de CORBA ou bien des EJB – Enterprise Java Beans - de Java). Nous souhaitons donc exploiter les résultats du projet ACI GRID RMI pour expérimenter un modèle de composant logiciel (CCM de CORBA) pour le couplage de codes. C'est dans cet objectif que C. Perez, coordinateur du projet ACI GRID RMI, participe à cette proposition. Enfin, nous avons également pour ambition d'expérimenter un modèle de composant capable de passer à l'échelle. En effet, les modèles existants ne sont pas capables d'encapsuler efficacement des codes parallèles, notamment lors de la composition. Il s'agit par exemple de permettre le transfert d'une matrice ou d'un maillage distribués dans plusieurs espaces d'adressage au sein d'un composant parallèle vers un autre composant parallèle en effectuant éventuellement une redistribution. On voit cependant ici que l'expression de la composition n'est pas triviale et ne passe tout simplement pas à l'échelle avec les modèles de composant actuels. Les travaux du projet PARIS portent sur ce point. Un modèle de composant parallèle a été défini sur la base de celui de l'OMG (modèle CCM). Nous souhaitons expérimenter ce modèle dans le cadre de notre application de couplage.

Dans les couplages étudiés, l'encapsulation et les interactions entre les composants de la grille reposent sur un couplage numérique. Nous proposons d'étudier deux types de couplage : le couplage des équations, qui sont en général non linéaires, et le couplage des milieux hétérogènes. Le couplage des équations est traditionnellement réalisé par l'implémentation d'une méthode « pas à pas ». Cette méthode pose des difficultés numériques bien connues des praticiens. La convergence ne peut souvent être assurée que par une réduction sévère des pas de temps. Un des objectifs de ce projet sera de mettre en œuvre des algorithmes de couplage d'équations avec une meilleure convergence. Pour les milieux hétérogènes, nous considérons deux approches : des méthodes de type sous-domaine pour des milieux avec quelques fractures et des modèles multi-échelles pour des réseaux de fractures.

Nous proposons d'étudier la mise en œuvre sur une grille de calcul à l'aide de quatre applications. Les deux premiers couplages sont de type physico-chimique et physico-physique (couplage algébrique d'équations). Il seront appliqués respectivement à la contamination d'aquifères et à l'intrusion d'eau salée. Les deux autres couplages sont géométriques de type multi-domaines ou multi-échelles et seront appliqués au stockage profond de déchets, d'une part dans un milieu peu fracturé, d'autre part dans un réseau de fractures. Le stockage de déchets est un couplage thermique-mécanique-hydraulique beaucoup plus sévère que le transport physico-chimique.

Autres projets dans ce domaine

Il y a peu de projets équivalents dans le domaine de la simulation des écoulements et du transport en milieu souterrain. Le groupe de M. F. Wheeler à l'Université du Texas à Austin développe depuis plusieurs années un cadre logiciel très ambitieux nommé « IPARS » (Implicit Parallel Accurate Reservoir Simulator) qui vise plutôt le calcul massivement parallèle, mais qui devrait avoir des extensions distribuées (il sera accessible par l'interface Netsolve).

En France, le projet RNTL Salomé vise à mettre en œuvre une plate-forme de couplage de codes. Ce projet est plus ambitieux que le notre (son cadre applicatif est plus vaste, et il intègrera tous les aspects du cycle de simulation) mais ne vise pas explicitement le calcul distribué. D'autres coupleurs existent, comme Calcium à EDF, et MetaChess (spécialisé pour le couplage Chimie-transport), développé au Centre d'Informatique Géologique à l'École des Mines de Paris.

Le GdR du CNRS intitulé MOMAS, qui devrait être créé en 2002, a pour objectifs la modélisation et la simulation du stockage profond de déchets. Il regroupe l'ANDRA, le CEA, l'EDF,

le BRGM, et des laboratoires de recherche. Les équipes Estime, Aladin et HTMP font partie de ce GdR.

Actions proposées dans Hydro-Grid

Nous avons défini quatre tâches dans le projet. Les deux premières tâches sont les exemples de couplages de modèles que nous proposons de développer. La troisième tâche concerne le développement des composants logiciels parallèles. Enfin, la dernière tâche est la mise en œuvre sur une grille.

Tâche T1	Couplage algébrique
Tâche T2	Couplage géométrique
Tâche T3	Composants logiciels parallèles
Tâche T4	Mise en œuvre sur une grille

Notre objectif est de mettre en œuvre sur une grille chacune des quatre applications proposées. Pour chacun de ces couplages, il faut mettre au point et implémenter une méthode de couplage numérique efficace (tâches T1 et T2), paralléliser les codes en prévoyant l'interfaçage de couplage (tâche T3) et développer l'application sur une grille (tâche T4).

Les logiciels seront testés sur les applications suivantes, qui serviront de démonstration au projet :

- T1 : intrusion d'eau salée et contamination d'aquifères par des polluants chimiques
- T2 : stockage de déchets radioactifs dans un milieu hétérogène peu fracturé ou un réseau de fractures

T1. Couplage algébrique

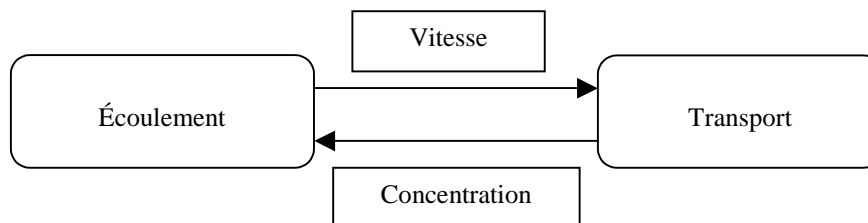
Le déplacement de deux fluides miscibles est modélisé par un système d'équations aux dérivées partielles et d'équations algébriques non linéaire couplé. Il permet de modéliser des situations comme l'intrusion d'eau salée dans l'eau douce. Il est connu que ce modèle peut générer des phénomènes complexes de recirculation dans des situations instables. Il a donné lieu à d'assez nombreux travaux, mais la plus grande partie de ceux-ci concerne les méthodes de discrétisation. Notre objectif est d'utiliser cette application pour tester la parallélisation des codes et la distribution sur la grille.

Savoir quantifier et simuler le transport de polluants dans les aquifères, en améliorant la connaissance des processus physico-chimiques intervenant dans la dynamique d'une pollution, est un objectif fondamental. La modélisation du transport réactif (plus spécifiquement le transport de solutés chimiquement réactifs dans les eaux souterraines) nécessite la résolution d'équations qui représentent le couplage entre le transport de soluté (par un processus de type dispersion convection) et les diverses réactions chimiques, telles que les réactions acido-basiques, l'oxydation, les phénomènes de complexation et de précipitation. Le système global, où les équations d'équilibre chimique sont écrites directement dans les équations de transport, est un système fortement non linéaire couplé d'équations aux dérivées partielles et d'équations algébriques.

Pour réaliser ces deux couplages d'équations, nous utiliserons une méthode basée sur une séparation des équations, avec un schéma de discrétisation différent pour chaque partie. Le code d'écoulement traite les équations sur la pression et la vitesse, tandis que le code de transport traite les équations sur la concentration et la masse volumique. Le code de chimie traite les équations sur les

concentrations. La première application couple les codes écoulement et transport et la deuxième application couple les codes transport et chimie. Le couplage des codes se fait par échanges de variables, la procédure d'échange étant fixée par le choix des schémas de discrétisation.

Prenons l'exemple du couplage écoulement-transport. Le champ de vitesse est transmis du code écoulement vers le code transport et inversement, la concentration est transmise du code transport vers le code écoulement. Ce couplage doit tenir compte des différentes discrétisations et parallélisations. La grille doit assurer les transferts des champs de vitesse et des concentrations, dans les formats requis, à haut débit, avec les synchronisations voulues.



T2. Couplage géométrique

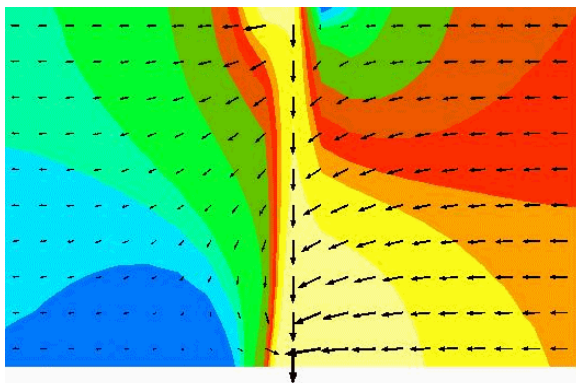


Figure 1 : Écoulement dans un milieu avec une fracture
Exemple d'un milieu asymétrique avec une fracture. On constate une réelle interaction entre la fracture et le milieu, en particulier la fracture relâche du fluide dans le milieu de gauche.

Certains milieux poreux hétérogènes sont traversés par un petit nombre de fractures qu'il est important de modéliser. En effet, les fractures sont les voies préférentielles des transferts des fluides et des solutés dans les milieux souterrains. Une approche efficace est d'utiliser une méthode inspirée de la décomposition de domaines. La fracture, supposée sans épaisseur mais avec des propriétés physiques propres, est remplacée par une condition de transmission. En éliminant la pression dans les sous-domaines ainsi définis, on se ramène à un problème d'interface de type non-standard. Cette méthode est très souple, et permet la prise en compte de modèles physiques différents, ou de discrétisations différentes, de part et d'autres des fractures. Notre objectif est d'utiliser les méthodes de sous-domaines pour simuler l'écoulement dans des milieux hétérogènes avec quelques dizaines de fractures.

A chaque sous-domaine correspond un code d'écoulement ; ces codes sont couplés par le problème d'interface modélisant l'écoulement dans la fracture.

Très souvent, les fractures s'organisent en réseaux complexes, qui entraînent des structures d'écoulement et des propriétés hydrauliques spécifiques. Le but de cette étude est la simulation des écoulements de fluide et des transferts de solutés dans les milieux tridimensionnels contenant des fractures (milieux fracturés). Il s'agit d'un couplage fractures 2D-réseau 3D.

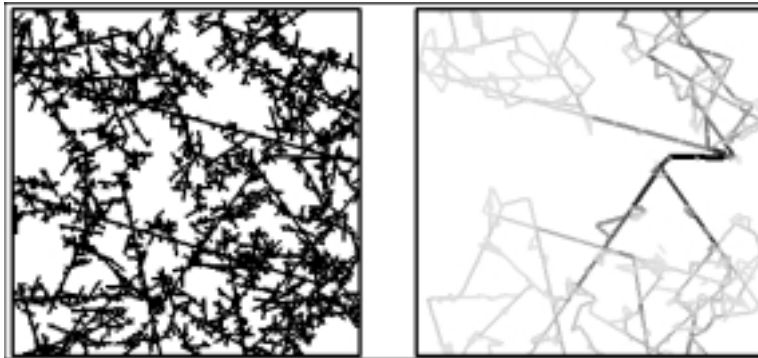


Figure 2: Influence de la large distribution des longueurs de fracture sur les propriétés hydrauliques du milieu.

A gauche: amas infini (réseau de fractures dans lequel le fluide s'écoule) d'un modèle de réseau de fractures généré avec une distribution de longueurs de fractures suivant la loi puissance $n(l) \sim l^{-2.7}$.

A droite : flux dans le réseau de droite en supposant l'équation de Darcy applicable dans chaque segment de fracture et avec les conditions aux limites suivantes : différence de charge entre les limites haute et basse et flux nul sur les arrêtes verticales. La teinte de gris est proportionnelle au flux dans le segment. La structure des écoulements ainsi que l'évolution de la perméabilité avec l'échelle définissent le modèle hydraulique [de Dreuzy et al., 2001a; de Dreuzy et al., 2001b].

Nous proposons de mettre au point une méthode numérique qui soit à la fois moins lourde que les éléments finis et plus précise que la méthode des réseaux de liens. Cette méthode se sert de l'idée des méthodes multi-échelles et repose sur l'existence de deux niveaux de complexité scindés venant respectivement de la fracture et du réseau. L'utilité de cette nouvelle méthode numérique est double. D'une part il s'agit de pouvoir modéliser des systèmes naturels sur lesquels une partie des fractures a pu être déterminée. D'autre part, plus fondamentalement, cette nouvelle méthode numérique est un outil pour la recherche des lois hydrauliques pertinentes pour les milieux fracturés.

Le code dit « fractures » simule en parallèle l'écoulement dans chacune des fractures, tandis que le code dit « réseau » simule l'écoulement dans le réseau de liens. Le couplage est réalisé par le choix de la méthode multi-échelles.

T3. Composants logiciels parallèles

Une des étapes du projet HydroGrid est de paralléliser les codes qui sont couplés sur la grille.

Nous utiliserons dans la plupart des cas un modèle de programmation parallèle avec variables distribuées et la bibliothèque de communications MPI. Pour au moins un des codes, nous utiliserons également une version parallèle avec variables partagées, programmée avec OpenMP, de façon à tester le couplage sur une grille de codes MPI et OpenMP.

Les modèles numériques dans tous ces codes sont des systèmes d'équations aux dérivées partielles qui sont discrétisés par des méthodes d'éléments finis ou de différences finies. Les problèmes discrets sont linéarisés par des méthodes de point fixe ou de Newton par exemple. Ensuite, les calculs sont soit des calculs explicites sur le maillage soit une résolution de système linéaire de dimension finie. Nous considérons donc deux types de parallélisation.

Pour paralléliser des calculs explicites, nous utiliserons l'approche classique de partition du domaine de calcul en sous-domaines. Les calculs sur chaque sous-domaine sont indépendants et les calculs sur chaque frontière font l'objet de communications. Pour décomposer un maillage d'éléments finis irrégulier en sous-domaines, nous utiliserons un logiciel du domaine public, par exemple Metis.

Pour paralléliser la résolution de systèmes linéaires, nous comparerons deux approches : une méthode directe de type méthode multifrontale, avec un logiciel du domaine public, par exemple Mumps ; et une méthode semi-itérative de type sous-domaines, avec là encore décomposition du maillage. Dans le premier cas, une des difficultés est d'interfacer la parallélisation des calculs explicites avec celle du solveur direct. Dans le second cas, une des difficultés est de développer un préconditionnement efficace pour résoudre itérativement le système du complément de Schur sur les frontières de sous-domaines.

Enfin, à l'issue de ces étapes de parallélisation, nous étudierons l'encapsulation de ces codes au sein de composants parallèles tels que ceux définis par les chercheurs du projet PARIS. Il s'agira notamment de bien définir l'interface de couplage des codes de calcul afin que ceux-ci puissent aussi être utilisés dans d'autres applications.

T4. Méthodes de mise en œuvre sur une grille

La mise en œuvre des applications de couplage sur la grille s'appuiera sur l'exécutif Padico™ dont une première version sera disponible d'ici le printemps 2002. Padico™ permet à des intergiciels (comme par exemple des implémentations de CORBA) d'exploiter les réseaux disponibles au sein d'une grille de calcul. La grille que nous souhaitons utiliser est celle en cours d'élaboration dans le cadre du projet RNTL E-Toile. Il s'agit de plusieurs grappes de PC disponibles dans plusieurs sites de l'INRIA (Rennes, Grenoble, ...). Ces grappes sont munies de réseaux très variés (Ethernet, SCI, Myrinet, ...). Les grappes de PC seront interconnectées via le réseau VTHD++. Notre objectif est de montrer que nos applications de couplage, fondées sur l'assemblage de composants, sont capables de fonctionner efficacement quelle que soit la configuration de la grille et des ressources allouées pour l'exécution. Le travail consistera à adapter Padico™ à l'infrastructure logicielle de la grille e-Toile (Globus ou Unicore), de façon à permettre l'exécution des composants sur les ressources offertes par la grille. Cette adaptation consistera essentiellement à exploiter l'architecture de sécurité de Globus ou d'Unicore.

Implications des différents partenaires

Le projet HydroGrid est un projet de calcul scientifique, par nature pluridisciplinaire. Les compétences des partenaires du projet couvrent un large spectre, comprenant la modélisation des phénomènes géophysiques (équipes TPC, HTMP), la conception de méthodes numériques et d'algorithmes (équipe HTMP, projet Estime, projet Aladin), la parallélisation de codes (projet Estime, projet Aladin, équipe ASCII), la conception de grilles (équipe ASCII, projet Paris).

H. Leroy, de l'équipe ASCII, est impliqué dans l'ACI Géno-Grid et C. Perez, du projet Paris, est responsable de l'ACI RMI-Grid.

Les projets Estime, Aladin et l'équipe HTMP sont partenaires du GdR MOMAS.

Les tableaux ci-dessous présentent l'implication des partenaires dans les différentes tâches : plusieurs équipes seront impliquées dans chaque tâche, l'une d'entre elles jouant un rôle de coordination. Chaque tâche possède un responsable, chargé de s'assurer de l'avancement du travail.

ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des **R**essources **I**nformatiques et des **D**onnées

DOSSIER COMPLET

Tâche		Équipes impliquées	Responsable
T1	Couplage algébrique	HTMP , Estime, TPC	M. Kern
T2	Couplage géométrique	Estime , TPC, HTMP	P. Ackerer
T3	Parallélisation des composants logiciels	Aladin , Paris, Estime, ASCII	J. Erhel
T4	Mise en œuvre sur une grille	Paris , Aladin, ASCII	C. Perez

Développement logiciel et échancier

Le projet est prévu sur une durée de **trois ans**.

Nous disposons pour démarrer le projet d'un code d'écoulement séquentiel, d'un code de transport séquentiel et d'un code de chimie séquentiel. Le code d'écoulement sera utilisé dans les tâches T1 et T2, les codes de transport et de chimie seront utilisés dans la tâche T1.

Tâche T1

- consolidation du code d'écoulement séquentiel (durée 2 mois)
- consolidation du code de transport séquentiel (durée 2 mois)
- consolidation du code de chimie séquentiel (durée 2 mois)
- définition et programmation du couplage numérique écoulement-transport (durée 6 mois)
- définition et programmation du couplage numérique transport-chimie (durée 9 mois)
- application à l'intrusion d'eau salée dans un aquifère (durée 3 mois)
- application à la contamination d'aquifères (durée 3 mois)

Tâche T2

- utilisation du code d'écoulement de la tâche T1 (durée 1 mois)
- définition et programmation du couplage par sous-domaines (durée 9 mois)
- application au stockage de déchets (durée 3 mois)
- définition d'une méthode multi-échelles (durée 6 mois)
- développement d'un code d'écoulement dans une fracture (durée 3 mois)
- développement d'un code d'écoulement dans un réseau de liens (durée 3 mois)
- programmation de la méthode multi-échelles (durée 3 mois)
- application au stockage de déchets (durée 3 mois)

Tâche T3

- parallélisation du code d'écoulement (durée 6 mois)
- parallélisation du code de transport (durée 6 mois)
- parallélisation du code de chimie (durée 6 mois)
- parallélisation du codes de fractures et du code réseau (durée 3 mois)
- encapsulation des codes au sein de composants parallèles

Tâche T4

- mise en œuvre sur une grille des applications de couplages (durée 6 mois)
- expérimentation et analyse de performance (durée 6 mois)

ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

DOSSIER COMPLET

Au bout d'un an, nous disposerons des codes réalisant en séquentiel les quatre applications proposées, avec les couplages numériques. Au bout de deux ans, nous aurons développé les versions parallèles. Enfin, au bout des trois ans, le couplage sur la grille sera effectué.

B2- Partenaires :

On donnera ici la liste du personnel de recherche de chaque équipe impliqué dans le projet (on rappelle que pour les enseignants chercheurs, le % du temps consacré à la recherche ne saurait excéder 60%).

Nom	Prénom	Laboratoire ou équipe de rattachement	Poste statutaire	% du temps de recherche consacré au projet
Erhel	Jocelyne	Aladin	DR INRIA	20 %
Canot	Edouard	Aladin	CR CNRS	20%
Philippe	Bernard	Aladin	DR INRIA	20 %
Hoteit	Hussein	Aladin / HTMP	Doctorant	80 % (sur un an)
Leroy	Hugues	ASCII	IR INRIA	10 %
Perez	Christian	Paris	CR INRIA	20 %
Ribes	André	Paris	Doctorant	30%
Davy	Philippe	TPC	DR CNRS	10 %
De Dreuzy	Jean-Raynald	TPC	CR CNRS	20 %
Clément	François	Estime	CR INRIA	20 %
Jaffré	Jérôme	Estime	DR INRIA	10 %
Kern	Michel	Estime	CR INRIA	30 %
Ackerer	Philippe	HTMP	DR CNRS	20 %
Mosé	Robert	HTMP	CR CNRS	20 %
X		Aladin / Paris/ASCII	Ingénieur	30 mois
X		TPC	Stagiaires	18 mois
X		Estime/HTMP	Post Doc	18 mois

B3- Références :

- *Liste des quelques publications les plus significatives du (des) groupe(s) demandeur(s) du projet (de l'ordre de trois à cinq par chercheur concerné).*
- *Liste des logiciels développés et évaluation de leur diffusion.*
- *Liste des brevets.*

B. Philippe (Rédacteur principal), Les applications du calcul parallèle – pratique et outils. *Réseaux et systèmes répartis – calculateurs parallèles*, , vol. 11, 2000.

H. Hoteit, R. Sauleau, B. Philippe, Ph. Coquet, and J.P. Daniel. Vector and parallel implementations for the FDTD analysis of millimeter wave planar antennas. *International Journal of High Speed Computing*, 10, no. 2 pp. 209-234, 1999.

M. Brieu, F. Devries, J. Erhel, Algorithme parallèle non incrémental pour la simulation de l'évolution d'endommagements en milieux hyperélastiques, . *Réseaux et systèmes répartis – calculateurs parallèles*, , vol. 13, pp 83-106, 2001.

Ph. Chartier, Post-projected Runge-Kutta Methods for Index-2 Differential-Algebraic Equations, *NumDiff-9*, Halle. Sept. 2000.

- A. Denis, C. Pérez, et T. Priol, Portable parallel CORBA objects: an approach to combine parallel and distributed programming for grid computing. *Proc. of the Intl. Euro-Par'01 conf.*, Manchester, UK, 2001.
- A. Denis, C. Pérez, et T. Priol, PadicoTM: An Open Integration Framework for Communication Middleware and Runtimes. *Proc. of the CCGRID'02 conference, Berlin, Germany, 2002.*
- C. René et T. Priol, MPI Code Encapsulation using Parallel CORBA Object. *Proceedings of the Eighth IEEE International Symposium on High Performance Distributed Computing*, IEEE, pp 3-10, August 1999.
- T. Priol, Efficient support of MPI-based parallel codes within a CORBA-based software infrastructure. *Response to the Aggregated Computing RFI from the OMG*, Document orbos/99-07-10, July 1999.
- F. Bodin, H. Leroy, Y. Mével, R. Quiniou, Portage de code pour architectures hautes performances, *TSI*, vol. 17, n° 5, p. 541-562, 1998.
- J. R. De Dreuzy, P. Davy, et O. Bour, Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following a power law length distribution: 1-Effective connectivity, *Water Resour. Res.* (in press).
- J. R. De Dreuzy, P. Davy, et O. Bour, Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following a power law length distribution: 2-Permeability of networks based on log-normal distribution of apertures, *Water Resour. Res.* (in press),
- J. R. De Dreuzy et J. Erhel, Efficient algorithms for the determination of the connected fracture network and the solution of the steady-state flow equation in fracture networks, submitted.
- J. R. De Dreuzy, et J. Erhel, Appraisal of a backward differentiation method for simulating transient flow in multiscale fracture networks, in preparation.
- C. Alboin, J. Jaffré, J.E. Roberts, X. Wang, et C. Serres. Domain Decomposition for Some Transmission Problems in Flow in Porous Media. In Z. Chen, R.E. Ewing, Z.-C. Shi, editors, *Numerical Treatment of Multiphase Flows in Porous Media*, Lecture Notes in Physics, pages 22-34., Springer 2000. Proceedings, Beijing, China 1999.
- C. Alboin, J. Jaffré, J. Roberts, C. Serres, Domain decomposition for flow in fractured porous media, *Eleventh International Conference on Domain Decomposition Methods*, C.-H. Lai, P. E. Bjorstad, M. Cross, O. Widlund (éditeurs), Domain Decomposition Press, Bergen, Norway, p. 371-379, 1999.
- P. Havé, M. Kern, Ch. Lemuét, Parallel Simulation of Acoustic Waves, *First SIAM Conference on Computational Science and Engineering*, Washington, Etats-Unis, 2000.
- G. Chavent et J. Jaffré. *Mathematical Models and Finite Elements for Reservoir Simulation. Studies in Mathematics and its applications.* North Holland, Amsterdam, 1986.
- P. Siegel, R. Mosé, Ph. Ackerer, et J. Jaffré. Solution of the advection-diffusion equation using a combination of discontinuous and mixed finite elements. *International Journal For Numerical Methods in Fluids*, 24:595-613, 1997.
- A. Younes, R. Mose, P. Ackerer, et G. Chavent. A new formulation of the mixed finite element method for solving elliptic and parabolic PDE with triangular elements. *J. of Computational Physics*, 149:148-167, 1999.
- Ph. Ackerer, A. Younes, R. Mosé, Modelling variable density flow and solute transport in porous medium : 1. Numerical model and verification, *Transport in Porous Media*, Vol. 35, pp.345-373, 1999.
- A. Younes, Ph. Ackerer, R. Mosé, Modelling variable density flow and solute transport in porous medium : 2. Re-evaluation of the salt dome flow problem, *Transport in Porous Media*, Vol. 35, pp.375-394, 1999.
- H. Hoteit et R. Mosé et B. Philippe et P. Ackerer et J. Erhel. About the maximum principle violations of the mixed-hybrid finite element method applied to diffusion equations. Rapport de recherche 4227, INRIA, 2001, à paraître dans *Numerical Methods in Engineering*.

ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des Ressources Informatiques et des Données

DOSSIER COMPLET

H. Hoteit, J. Erhel, R. Mosé, B. Philippe and P. Ackerer. Numerical reliability and CPU time for the mixed methods applied to flow problems in porous media. Rapport de recherche 4228, INRIA, 2001, à paraître dans Computational Geosciences.

B4 – Moyens financiers demandés et durée dans le cadre de l'ACI (en Euros TTC) :

On présentera ici une justification des moyens demandés pour chacune des équipes impliquées dans le projet. L'équipement et le fonctionnement sont à distinguer en raison des règles sur la TVA.

Une partie importante de ce projet sera consacrée au développement de logiciels parallèles et à l'implantation effective sur une grille des quatre couplages proposés. En conséquence, la plus grande partie du budget demandé est affectée à des dépenses de personnel. Le reste du budget servira essentiellement à financer des missions, des participations à des conférences internationales et un workshop annuel avec tous les participants.

Un ingénieur sera affecté à Rennes (projets Aladin, Paris, équipe ASCII) pour aider à la réalisation des tâches T3 et T4, pendant 2 ans et demi (6 mois sur l'année 1).

Pour la tâche T1, nous prévoyons un post-doc d'un an et demi (projet Estime, équipe HTMP), avec 1 an l'année 1.

Pour la tâche T2, nous prévoyons trois stages de 6 mois (équipe TPC), un par an.

Coût d'un stage de 6 mois : 6 720 Euros.

Coût annuel d'un ingénieur : 46 880 Euros.

Coût annuel d'un post-doc : 36480 Euros.

Coût annuel des missions et workshop : 23 680 Euros.

Par an : un ingénieur et deux stages : 60320 Euros.

Récapitulatif global (en Euros TTC) :

	Année 1	Année 2	Année 3	Total
Equipement				
Fonctionnement	18360	18160	18400	54920
Personnels (CDD)	66640	71840	53600	192080
Total / année	85000	90000	72000	247000

B5 – Autres soutiens financiers apportés au projet :

Il vous est demandé ici de présenter le budget global du projet hors financement des personnels titulaires et des coûts d'infrastructures. En cas de financement complémentaire à celui demandé dans le cadre de cette ACI, vous veillerez à préciser si le financement est obtenu ou s'il fait l'objet d'une demande et le programme correspondant. On précisera en particulier si le projet fait l'objet d'une demande ou d'un soutien déjà obtenu dans le cadre d'une autre ACI.

Pas d'autre soutien.

B6 – Autres actions contractuelles dans lesquelles les partenaires sont engagés :

On mentionnera en particulier ici, pour chacun des participants au projet présenté à l'ACI-GRID, son implication dans d'autres projets et leur degré d'avancement. En particulier, on précisera pour chacune des équipes participantes, si elle est impliquée dans d'autres projets de l'ACI GRID, dans des projets européens ou dans le cadre du RNTL et du RNRT. Si tel est le cas, on veillera à préciser le positionnement de chacun de ces projets.

Aladin

- Contrat avec le CEFE (Montpellier) sur la dynamique des populations.

ACTION CONCERTÉE INCITATIVE 2002

Globalisation des **R**essources **I**nformatiques et des **D**onnées

DOSSIER COMPLET

- En attente de la confirmation d'un contrat avec l'Ifremer, pour la participation à un contrat de plan Etat Région sur l'off-shore profond.

HTMP

- Contrat européen « SAHARA », *modélisation des dipôles injection pompage pour la dépollution des aquifères.*
- Contrat avec MDPA, *modélisation du transport de solution fortement salée sous les terrils des mines de potasse d'Alsace.*
- Projet PNRH sur le thème problèmes inverses en hydrogéologie.
- Projet de l'Institut Franco-Allemand de Recherche sur l'Environnement, *Pollution de captage d'eau potable dans la nappe.*

Estime

- Contrat avec l'ANDRA, modélisation du terme source.
- Projet PNRH sur le thème problèmes inverses en hydrogéologie.
- Contrat avec la DGA sur la détermination des profils de température pendant la détonation d'un explosif liquide, le nitrométhane.

Paris

Projet déjà financé :

- RNTR : Projet VTHD, sous-projet 5. Le sous-projet 5 a pour but de porter des applications de simulation numérique et de réalité virtuelle sur la plate-forme VTHD.
- RNRT : le projet VTHD++. Le projet PARIS intervient au sein du sous-projet Metacomputing.
- RNTL ; le projet E-Toile. Réalisation d'une grille de calcul à l'échelle nationale
- RNTL : le projet CASPER : modèle ASP pour le calcul scientifique
- ACI GRID : GRID2, projet d'animation coordonné par J.-L. Pazat.
- ACI GRID : RMI, projet logiciel coordonné par C. Perez
- FET Open (projet Européen) : POP (Portable OpenMP).

TPC

- Contrat européen « SALTRANS » : *Methods for assessing salt intrusion and transport in heterogeneous and fractured aquifers.*