

Sujet : Calcul des contraintes par la méthode des multiples rapides en dynamique des dislocations

Responsables : Olivier Coulaud, Arnaud Etcheverry

Téléphone : 05 24 5740 80

Courriel : Olivier.Coulaud@inria.fr

Présentation du sujet :

Les matériaux utilisés dans l'industrie nucléaire sont soumis à des sollicitations extrêmement complexes dans la mesure où elles combinent des contraintes thermomécaniques, des effets d'environnement mais aussi des effets d'irradiation. Dans un domaine où l'expérimentation est aussi délicate que coûteuse, l'approche *in silicio* offre la possibilité de modéliser et de comprendre les phénomènes physiques à l'origine de la dégradation de la tenue des matériaux en service.

Le développement d'un code efficace sur un grand nombre de processeurs est un enjeu majeur pour aborder des tailles de domaines et un nombre de dislocations significatifs pour définir de manière plus précise ces lois de comportement. Une des caractéristiques des simulations de dislocations est qu'elles sont très dynamiques dans le sens où le nombre de dislocations évolue très rapidement en cours de la simulation. A chaque pas de temps le calcul des forces entre les dislocations est une étape très coûteuse. Il implique de calculer les contributions entre paire de dislocations. Le calcul direct conduit à une complexité quadratique et ne peut être utilisé que pour un petit nombre de dislocations. En utilisant des méthodes hiérarchiques comme la méthode des multipôles rapides [3], nous obtenons une complexité linéaire et aborder de très gros systèmes. La mise en œuvre de ces méthodes est un challenge pour obtenir des codes de dynamique des dislocations efficaces.

Le travail à réaliser portera dans un premier temps sur la compréhension du formalisme de la méthode des multipôles rapides développée dans [2] et [3]. Puis, il s'agira de l'implémenter au sein de notre bibliothèque parallèle ScalFMM. Cette intégration nécessitera d'étendre la bibliothèque d'une part, pour prendre en compte des interactions entre segments plutôt qu'entre particules et d'autre part, de considérer des grandeurs vectorielles (contrainte) au lieu de grandeurs scalaires (masse, charge, ...).

Pour tirer profit des nouveaux processeurs, une attention particulière sera apportée à l'optimisation et à la vectorisation des opérateurs impliqués par la méthode des multipôles. Une étude approfondie des différents paramètres de la méthode sera réalisée.

Pour terminer, la solution retenue sera intégrée dans le code *optidis-scalFMM* et validée sur des simulations de grandes tailles.

Mot-clés : méthode multipôle, simulation à grande échelle, parallélisme

Commentaires :

Le stage est rémunéré et se déroulera dans l'équipe projet INRIA HiePACS et se fera en collaboration avec le SRMA – CEA Saclay et le SIMAP – Grenoble INP.

Les tests se feront sur la plate-forme PlaFRIM (544 cœurs) et sur le mésocentre Bordelais MCIA (3000 cœurs).

Références :

- [1] T. Arsenlis et al., « Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics », *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 15, 553 (2007).
- [2] Wang, Z.; Ghoniem, N. & Lesar, R. Multipole representation of the elastic field of dislocation ensembles *Physical Review B*, 2004, 69, 174102
- [3] R. LeSar, J.M. Rickmann, « Multipole expansion of dislocation interactions: Application to discrete dislocations », *Phys. Rev. B* 65, 144110 (2002).