

Sujet de thèse

Vers la simulation en dynamique des dislocations à très grande échelle sur machine pétaflopique

Responsables : Olivier Coulaud, Jean Roman

Téléphone : 05 24 57 40 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.

La dynamique des dislocations est par nature une méthode visant à faire le lien entre la dynamique moléculaire qui traite individuellement chaque atome et les méthodes continues de type éléments finis. La dynamique des dislocations s'inscrit dans une démarche multi-échelles dont un des objectifs est de fournir à l'échelle macroscopique des lois de comportement et d'endommagement motivées physiquement.

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. C'est l'objectif de l'ANR OPTIDIS de mettre au point un tel code (NUMODIS).

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 ainsi que le nombre de points les discrétisant. La prise en compte de cette dynamique dans les algorithmes est indispensable pour obtenir un code performant [1,2]. A chaque pas de temps, deux étapes coûtent cher et peuvent conduire à des stratégies de parallélisation différentes. La première concerne l'évaluation des contraintes, i.e. des forces entre les dislocations qui dirigent l'évolution des phénomènes ; pour les évaluer, les méthodes hiérarchiques comme la méthode des multipôles rapides [3] sont privilégiées. Le deuxième goulot d'étranglement est l'automate cellulaire qui gère la création, la fusion et la destruction des dislocations.

L'objectif de cette thèse sera de concevoir et de développer toutes les adaptations algorithmiques nécessaires pour permettre le passage à l'échelle sur un très grand nombre de cœurs de calcul de la solution actuelle. On vise, à l'échelle de plusieurs centaines de milliers de cœurs, une utilisation performante des machines à structure hiérarchique permettant l'exploitation de plusieurs niveaux de parallélisme et conduisant à une programmation et à une mise en œuvre hybride, c'est à dire depuis un grain grossier basé sur un modèle MPI jusqu'à des grains fins et très fins basés sur du multithreading en mémoire partagée. De plus,

ces travaux seront validés en collaboration avec le CEA et le SIMAP, sur une simulation d'intérêt scientifique important portant sur la formation de bandes claires dans le zirconium irradié.

Mot-clés : équilibrage de charge dynamique, simulation à grande échelle, parallélisme many-core

Commentaires :

La thèse, financée par l'ANR OPTIDIS, se déroulera dans l'équipe projet INRIA HiePACS et se fera en collaboration avec le service de Recherches Métallurgiques Appliquées (DEN/DMN/SRMA) du CEA Saclay et le laboratoire de Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés (SIMaP – Grenoble INP). Les tests se feront sur la plate-forme PlaFRIM et sur le mésocentre Bordelais MCIA.

HiePACS : <http://www.inria.fr/equipes/hiepacs>

SIMAP : <http://simap.grenoble-inp.fr/>

Platform : <https://plafrim.bordeaux.inria.fr/doku.php>

Références :

[1] T. Arsenlis et al., « Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics », *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 15, 553 (2007).

[2] Z. Wang, N. Ghoniem, S. Swaminarayan, R. LeSar, « A parallel algorithm for 3D dislocation dynamics », *J. Comp. Phys.* 219:2, 608 (2006).

[3] R. LeSar, J.M. Rickmann, « Multipole expansion of dislocation interactions: Application to discrete dislocations », *Phys. Rev. B* 65, 144110 (2002).