

Sujet : Optimisation d'un code de dynamique des dislocations

Responsables : O. Coulaud

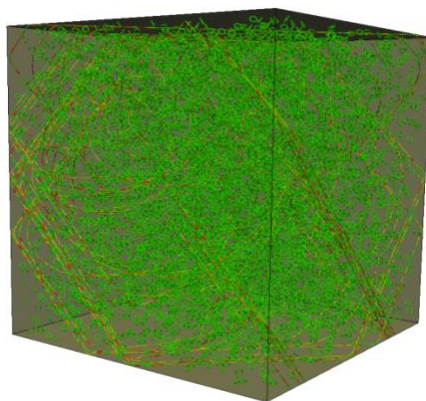
Téléphones :

Courriels : olivier.coulaud@inria.fr

Présentation du sujet :

Les matériaux utilisés dans l'industrie 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. A l'échelle microscopique, les mécanismes de fluage se traduisent par un flux de défauts ponctuels vers les dislocations présentes dans le matériau qui sont les vecteurs de la déformation plastique et qui contrôlent à ce titre les propriétés mécaniques. On parle alors de « montée des dislocations ». La simulation par Dynamique des Dislocations se révèle particulièrement bien adaptée à l'étude des mécanismes de fluage [1,2] pour peu d'y introduire l'ensemble des mécanismes physiques pertinents, et de permettre de traiter des volumes et des temps suffisamment représentatifs en s'appuyant sur le calcul haute performance (HPC). Ces deux points constituent le cœur de la thèse proposée ici.

Le développement d'un code efficace [3] sur un grand nombre de processeurs est un enjeu majeur pour aborder des tailles de domaines et un nombre de dislocations significatif 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. En effet, les dislocations collisionnent pour se multiplier ou s'annihiler. La gestion efficace de ces modifications topologiques en parallèle est un enjeu important pour le passage à l'échelle.



Simulation de la déformation plastique d'un volume de zirconium irradié (volume de côté 2 μm) réalisé avec le code *NUMODIS/OPTIDIS*.

L'objectif de ce stage est d'optimiser les différentes phases algorithmiques (collision, remaillage ...) où les opérations topologiques interviennent. Il s'agira de désérialiser l'insertion et la suppression des éléments (nœuds/segments) dans la structure de données pour introduire plus de concurrence notamment dans la gestion des collisions et le splinode (changement

topologique d'un nœud). Ensuite, il faudra fortement améliorer l'algorithme de remaillage du réseau de dislocation qui est un frein au passage à l'échelle de ces opérations topologiques.

Mot-clés :

Dynamique des dislocations, calcul parallèle, structure de données, échanges de message (MPI)

Profil souhaité :

Un esprit curieux et ouvert à de nouvelles problématiques ayant de solides connaissances en parallélisme.

Références :

[1] B. Bako, E. Clouet, L.M. Dupuy, M. Blétry, *Philosophical Magazine* 91 (2011) 31733191

[2] S.M. Keralavarma, T. Cagin, A. Arsenlis, A.A. Benzerga, *Physical Review Letters* 109 (2012)

[4] NumodisOptiDis: a parallel large scale Dislocation Dynamics simulation code.

<http://optidis.gforge.inria.fr>