

Sujet de thèse

Développement d'un solveur de nouvelle génération pour la dynamique granulaire.

Contexte. Le LMGC dispose d'une compétence reconnue dans la simulation des milieux discrets, et en particulier granulaires, complétée d'approches innovantes dans le calcul intensif et parallèle pour de tels milieux. Les applications sont diverses: ballast ferroviaire, procédés pour les poudres, géomatériaux, maçonneries et monuments... Les corps en contact peuvent être modélisés, selon les situations, comme des solides rigides ou des corps déformables.

La taille des systèmes, caractérisée par le nombre de corps en contact, est souvent très importante et requiert les recours au calcul intensif et parallèle. Diverses approches de décomposition de domaine ont été développées pour les deux types d'architecture : mémoire partagée (sous OpenMP) et mémoire distribuée (sous MPI). Ces dernières se sont avérées particulièrement performantes en terme d'extensibilité numérique sur un grand nombre de processeurs (jusqu'à 96) pour plus de 2 millions d'inconnues de contact.

L'ensemble des développements ont été réalisés dans la plateforme logicielle LMGC90 (<http://www.lmgc.univ-montp2.fr/LMGC90/>).

Sujet de thèse. L'algorithme de Gauss-Seidel Non Linéaire (Non Linear Gauss-Seidel - NLGS) est le solveur générique associé à la Dynamique Non Régulière des Contacts (Non Smooth Contact Dynamics - NSCD) [1]. L'intérêt principal de la formulation NSCD est de permettre de simuler le comportement d'une collection de corps avec des régimes variés pouvant coexister au sein d'un même système: statique (solide), dynamique lente, dynamique rapide (type fluide). En effet il est possible de résoudre, sur un pas de temps, de nombreux contacts simultanés. Le pas de temps peut être beaucoup plus grand que pour la Dynamique Moléculaire qui requiert un pas de temps d'autant plus petit que le système est de grande taille et dense.

Pourtant la méthode présente deux inconvénients. Le premier est lié à la formulation en vitesse de la condition de non-interpénétration. Cette formulation est exacte en temps continu, mais induit des interpénétrations parasites dans un schéma à pas de temps fixe (time-stepping integration). Le second inconvénient réside dans la convergence lente d'un algorithme de type Gauss-Seidel. Pour un granulat dense en régime quasi-statique la méthode peut même diverger, ce qui permet de relier cette défaillance à l'indétermination caractérisée par de multiples réseaux de forces auto-équilibrés. Les deux inconvénients se cumulent quand une granulat est fortement confiné par des conditions aux limites en vitesses imposées.

Une première étude exploratoire d'une nouvelle stratégie numérique [4,5], a montré la possibilité de stabiliser et d'accélérer la convergence en tenant compte de l'indétermination et en contrôlant l'interpénétration via un algorithme de prédiction-correction (prédiction linéaire, correction non régulière modifiée). Une telle approche constitue également une piste intéressante pour séparer les contributions globale-statique et locale-dynamique dans les contraintes internes et motiver par exemple une stratégie multi-modèle (discret-local vs continu-global) dans une méthode de décomposition de domaine [2,3].

Le développement de cette stratégie dans la plateforme LMGC90 constitue le cœur du sujet de thèse. Certaines questions restent ouvertes et nécessiteront pour y répondre rigueur et

créativité. La réalisation des développements informatiques exigera du candidat une volonté de comprendre les structures d'un logiciel dédié aux éléments discrets et de s'investir dans le domaine de l'algorithmique non régulière ou très fortement non linéaire.

Directeurs de thèse : Pierre Alart, Frédéric Dubois.

Références.

[1] Moreau, J.J., *Numerical aspects of sweeping process*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 177, Issues 3-4, 329--349, 1999.

[2] Alart, P., Iceta, D. and Dureisseix, *A nonlinear domain decomposition formulation with application to granular dynamics*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol 205-208, 59--67, 2012.

[3] Visseq, V., Martin, A., Iceta, D., Azema, E., Dureisseix, D. and Alart, P., *Dense granular dynamics analysis by a domain decomposition approach*, Computational Mechanics, 709--723, 2012.

[4] Le Borne, S., *Block computation and representation of a sparse nullspace basis of a rectangular matrix*, Linear Algebra and its Applications, Volume 428, Issues 11–12, 2455-2467, 2008.

[5] Alart, P., *How to overcome indetermination and interpenetration in granulate systems via the nonsmooth contact dynamics. An exploratory investigation*, Séminaire interne au LMGC, septembre 2012.